



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



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

Département des Sciences de la matière

MEMOIRE DE MASTER

Domaine: Sciences de la matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux



Thème:

Calcul des fréquences longitudinale et transversale  
des phonons des composés semi-conducteurs binaire  
AlSb et InSb et leur alliages ternaires (Al, In)Sb

Présenté par:

*Bekkaï Safa et Bacha Hanan*

Devant le jury:

Abdelkader Hafdallah	MCA	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Fadila Serdouk	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le Mardi 25 / 06 / 2019 à 11<sup>h</sup>:00



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



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

Département des Sciences de la matière

## MEMOIRE DE MASTER

Domaine: Sciences de la matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux

### Thème:

Calcul des fréquences longitudinale et transversale des phonons des composés semi-conducteurs binaire AISb et InSb et leur alliages ternaires (Al, In)Sb

### Présenté par:

*Beḳḳai Safa et Bacha Hanan*

### Devant le jury:

Abdelkader Hafdallah	MCA	Univ. Tébessa	Président
Abderrachid Bechiri	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Fadila Serdouk	MCB	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le Mardi 25 / 06 / 2019 à 11<sup>h</sup>:00



### Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)



Nous soussignions

Nom, prénom: Safa Bekkai & Hanan Bacha

N° de carte d'étudiant: (1) 34023658 / 2014 (2) 34021163 / 2013

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

Année universitaire: **2018/2019**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: physique des matériaux

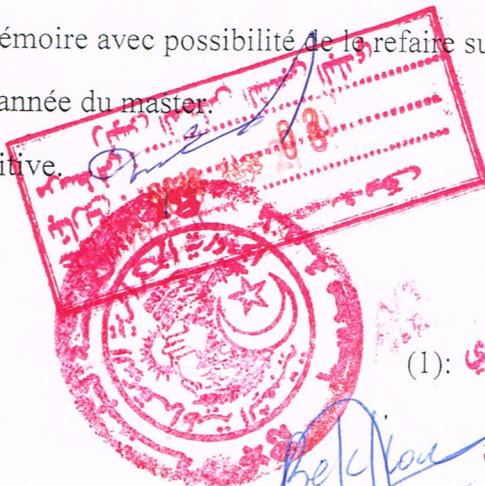
Intitulé du mémoire: calcul des fréquences longitudinale et Transversale des phonons des Composés semi - Conducteurs binaire Al Sb et InSb et leurs Alliages ternaires (Al, In) Sb.

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.



Fait à Tébessa, le: 03/04/2019

Signature des étudiants (es):

(1): Bekkai

(2): Bacha

Bekkai

Bacha

ملخص

## ملخص :

الهدف من هذا العمل ، دراسة تأثير تركيز الألمنيوم على الخواص الاهتزازية للسبيكة الثلاثية  $Al_xIn_{1-x}Sb$  ذات البنية البلورية زينك-بلاند ، بأخذ و دون الأخذ بعين الاعتبار تأثير العشوائية التركيبية. لدراسة هذا النوع من السبائك إستخدمنا الطريقة التجريبية لشبه الكمون المحلي E.P.M بالتزاوج مع تقريب البلورة الافتراضية V.C.A مقرونة مع نموذج المدارات المرتبطة لـ Harrison. لقد قمنا بحساب كل من قرينة الانكسار  $n$  ، ثابت العزل ذو التردد العالي  $\epsilon_\infty$  ، ثابت العزل الستاتيكي  $\epsilon_0$  ، الترددات الطولية  $\nu_{LO}$  ، الترددات المستعرضة  $\nu_{TO}$  ، سرعة الموجات الصوتية الطولية و المستعرضة في الاتجاهات التالية  $[100]$ ،  $[110]$ ،  $[111]$ .

عموما، حساباتنا كانت على توافق مع طرق الحسابات الأخرى و النتائج التجريبية المتوفرة.

**الكلمات المفتاحية :** AISb، AlIn ، زينك-بلاند ، تقريب شبه الكمون، تقريب البلورة الافتراضية ، قرينة الانكسار ، ثابت العزل، الترددات الطولية و المستعرضة ، سرعة الموجات الصوتية .



*Abstract*

**Abstract :**

The main of this work is to study the effect of the concentration of aluminium on the properties of the ternary alloy  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  crystallizing in the zinc-blende structure with and without the disorder effect.

To study this type of alloy, we use the empirical pseudopotential method (E.P.M) where the local potential coupled to the virtual crystal approximation (V.C.A) with and without considering the disorder effect, and associated with bond-orbital model of Harrison (bond-orbital model).

We calculated the refractive index  $n$ , the high frequency dielectric constant  $\epsilon_\infty$ , the static dielectric constant  $\epsilon_0$ , the longitudinal frequencies, the transverse frequencies, the velocities of longitudinal and transverse acoustic waves in the following directions:  $[100]$ ,  $[110]$  and  $[111]$ .

Generally, our calculations are in concord with the other computing methods and experimental works available.

**Key-words :** AlIn, InSb, Zinc-blende, Pseudopotential, Virtual Crystal Approximation, refractive index, dielectric constant, the longitudinal and the transverse frequencies, velocities of acoustic waves



*Résumé*

### Résumé :

Le but de ce travail est d'étudier l'effet de la concentration de l'Aluminium sur les propriétés vibrationnelles de l'alliage ternaire  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  cristallisée dans la structure zinc blende avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

Pour étudier ce type d'alliage, on a utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique locale (E.P.M), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte l'effet du désordre compositionnel combinées avec le modèle des orbitales liées de Harrison (bond-orbital model).

On a calculé l'indice de réfraction  $n$ , la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$ , la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$ , les fréquences longitudinales  $\nu_{LO}$ , les fréquences transversales  $\nu_{TO}$  et les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales dans les directions suivantes: [100], [110] et [111].

En générale, nos calculs sont en bon accord avec les autres méthodes de calculs et les travaux expérimentaux disponibles.

**Mots-clés :** AlIn, InSb, Zinc-blende, Pseudopotentiel, Approximation du Cristal Virtuel, indice de réfraction, constante diélectrique, les fréquences longitudinales et transversales, vitesse des ondes acoustiques.

# Remerciement

*Nous remercions tout d'abord le bon dieu pour nous avoir donné le courage et la santé pour accomplir ce travail «Hamdoulallah.».*

*Nous voudrions, ensuite, exprimer ma plus grande reconnaissance à Mr. **Bechiri Abderrachid** Professeur à l'Université de Tébessa pour avoir accepté de diriger ce travail avec efficacité et rigueur. Merci également pour son soutien et ses conseils.*

*Nous remercions particulièrement les membres de jury de m'avoir accordé l'honneur d'accepter l'évaluation de ce travail. Nous remercions Mr. **Hafdallah Abdelkader** Docteur à l'Université de Tébessa qui me fait l'honneur de présider le jury de mon mémoire. Nous remercions Madame **Serdouk Fadila** Docteur à l'Université de Tébessa pour avoir accepté de lire, d'évaluer et d'examiner mon travail à travers ce manuscrit.*

*Nous remercions également **nos parents** pour son soutien*

*Nous adressons un vif remerciement à l'ensemble des enseignants qui ont assuré notre formation le long de toutes mes 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.*



# *Sommaire*

**Sommaire :**

Liste des tableaux.....	<i>i</i>
Liste des figures.....	<i>ii</i>
Liste des symboles.....	<i>iv</i>
Introduction générale.....	1
Référence .....	2

**Chapitre I****La méthode de pseudopotentiel**

I-1-Introduction.....	3
I-2-Concept de pseudopotentiel.....	3
I-3-Construction d'un pseudopotentiel .....	4
I-4-Formalisme mathématique.....	4
I-5- Méthode de pseudopotentiel .....	5
I-6- Modèles du pseudopotentiel .....	5
I-6-1 Le modèle local .....	6
I-6-2 Modèle non locale .....	6
I-7-Méthode pseudopotentiel empirique(EPM).....	9
I-7-1-L'approximation empirique locale .....	9
I-7-2-L'approximation empirique non locale.....	10
I-8-La méthode de calcul du (E.P.M).....	11
I-9 Théorie des alliages.....	12
I-9-1-Notions de base sur les solutions solides.....	13
I-10-Méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs.....	13
I-10-1- Alliages ternaires .....	14
I-10-1-1 Approximation du cristal virtuel (V.C.A).....	14
I-10-1-2 Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).....	14
Références .....	16

**Chapitre II****Etude des propriétés optiques et diélectriques**

II-1 Introduction .....	18
II-2 Interaction rayonnement matière.....	18
II-2-1 Photons et électrons.....	18
II-2-2 Réflexion des ondes planes.....	20
II-3 Interaction électrons –photons (Transitions radiatives).....	21

II-4- Transition directe et indirecte.....	22
II-5-Constantes optiques .....	23
II-5-1-Calcul de l'indice de réfraction.....	23
II-5-2-Constante diélectrique.....	24
Références .....	24

### **Chapitre III**

#### **Dynamique du réseau**

III-1-Introduction.....	26
III-2-La chaîne linéaire unidimensionnelle .....	26
III-2-1-La chaîne linéaire monoatomique .....	26
III-2-2 -La chaîne linéaire diatomique .....	29
III-3-Branche optique et acoustique .....	31
III-3-1-Branche acoustique .....	31
III-3-2-Branche optique .....	32
III-4-Quantification des vibrations du réseau.....	32
III-4-1-Les phonons.....	33
III-4-2- Fréquences des phonons des modes optiques .....	33
III-5- Vitesses des ondes acoustiques.....	34
Références .....	34

### **Chapitre VI**

#### **Résultat et discussion**

IV-1-Introduction.....	35
IV-2-Etude des gaps énergétiques.....	36
IV-3-L'étude des propriétés optiques et diélectriques.....	38
VI-3-1- L'indice de réfraction.....	38
VI-3-2- La constante diélectrique a haute fréquence.....	40
VI-3-3- La constante diélectrique statique.....	41
IV-4-L'étude de dynamique du réseau.....	42
VI-4-1- La charge effective transversale.....	42
VI-4-2- Les fréquences des modes optiques.....	43
VI-4-3-les énergies des phonons optiques longitudinales et transversales.....	47
IV- 5- Les constantes élastiques.....	50
IV- 6- Les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales.....	51
Références .....	60

## Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
Tableau IV-1	<i>Les facteurs de forme symétriques (<math>V_S</math>) et antisymétriques (<math>V_A</math>) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs InSb et AlSb dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau <math>a</math> en (u.a) et en (<math>A^\circ</math>).</i>	36
Tableau IV-2	<i>Gap énergétique fondamental pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	37
Tableau IV-3	<i>L'indice de réfraction <math>n</math>, la constante diélectrique à haute fréquence <math>\epsilon_\infty</math> et la constante diélectrique statique <math>\epsilon_0</math> calculées par le modèle de Ravindra et ses collaborateurs des composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	39
Tableau IV-4	<i>Charge effective transverse <math>e_T^*</math> pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	43
Tableau IV-5	<i>Fréquences des phonons longitudinales et transversales pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	45
Tableau IV-6	<i>Energies des phonons longitudinales et transversales pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	49
Tableau IV-7	<i>Les constantes élastiques <math>C_{11}</math>, <math>C_{12}</math> et <math>C_{44}</math> en (<math>10^{11}</math> dyne/cm<sup>2</sup>) composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	51
Tableau IV-8	<i>Vitesses du son longitudinales et transversales pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	52

## Liste des figures

Figure	Titre	Page
Figure I-1	<i>Fonction de Heine et Abarenkov.</i>	8
Figure I-2	<i>Fonction de Gauss.</i>	8
Figure I-3	<i>Fonction d'Ashcroft.</i>	9
Figure I-4	<i>Diagramme de la procédure de calcul par EPM.</i>	12
Figure II-1	<i>les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur.</i>	22
Figure II-2	<i>Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction.</i>	23
Figure III-1	<i>Cristal unidimensionnel monoatomique. a) Chaîne linéaire monoatomique, b) mode longitudinal, c) mode transverse.</i>	27
Figure III-2	<i>Courbe de dispersion d'une chaîne monoatomique unidimensionnelle.</i>	29
Figure III-3	<i>Vibration de chaîne diatomique unidimensionnelle.</i>	29
Figure III-4	<i>Courbe de dispersion d'une chaîne linéaire diatomique unidimensionnel.</i>	31
Figure III-5	<i>onde optique et acoustique transversale dans une chaîne linéaire.</i>	32
Figure IV-1	<i>La variation du gap fondamental <math>E_g</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium de l'alliage ternaire <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math> avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.</i>	37
Figure IV-2	<i>La variation de l'indice de réfraction <math>n</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	39
Figure IV-3	<i>La variation de la constante diélectrique à haute fréquence <math>\epsilon_\infty</math> en fonction de la concentration <math>x</math> de l'Aluminium.</i>	41
Figure IV-4	<i>La variation de la constante diélectrique statique <math>\epsilon_0</math> en fonction de la concentration de l'Aluminium.</i>	42
Figure IV-5	<i>Variation de la charge effective transverse <math>e_T^*</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	43
Figure IV-6	<i>Variation de la fréquence de phonon optique longitudinale <math>\nu_{LO}</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	45
Figure IV-7	<i>Variation de la fréquence de phonon optique transversale <math>\nu_{TO}</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	46
Figure IV-8	<i>Variation des fréquences des phonons optiques longitudinale et transversale et longitudinale en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	46
Figure IV-9	<i>Variation de l'énergie de phonon optique longitudinale <math>E_{LO}</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	49

Figure IV-10	<i>Variation de l'énergie de phonon optique transversale <math>E_{TO}</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>50</b>
Figure IV-11	<i>Variation des énergies des phonons optiques transversale et longitudinale en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>50</b>
Figure IV-12	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale <math>V_{LA}</math> propagation dans la direction <math>[100]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>53</b>
Figure IV-13	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales <math>V_{TA1,2}</math> propagation dans la direction <math>[100]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>53</b>
Figure IV-14	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale <math>V_{LA}</math> propagation dans la direction <math>[110]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>54</b>
Figure IV-15	<i>de la vitesse des ondes acoustiques transversales <math>V_{TA1}</math> propagation dans la direction <math>[110]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>55</b>
Figure IV-16	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales <math>V_{TA2}</math> propagation dans la direction <math>[110]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>55</b>
Figure IV-17	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale <math>V_{LA}</math> propagation dans la direction <math>[111]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>57</b>
Figure IV-18	<i>Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales <math>V_{TA1,2}</math> propagation dans la direction <math>[111]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>57</b>
Figure IV-19	<i>Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction <math>[100]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>59</b>
Figure IV-20	<i>Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction <math>[110]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>59</b>
Figure IV-21	<i>Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction <math>[111]</math> en fonction de la composition <math>x</math> de l'Aluminium pour l'alliage <math>Al_xIn_{1-x}Sb</math>.</i>	<b>60</b>

## Liste des symboles

Symboles	Sens physique
<b>Chapitre I</b>	
$V_{\text{ext}}$	Potentiel de Coulomb.
$E_{\text{cut}}$	Energie de Coupure.
$\Psi$	La fonction d'onde du système.
$\varphi$	Les ondes planes.
$\varphi_{\text{C}}$	L'Etats atomique qui occupe le cœur.
$H$	L'Hamiltonien.
$E_{\text{C}}$	L'énergie du cœur.
$E_{\text{V}}$	L'énergie de valence.
$V_{\text{R}}$	Potentiel répulsive positif
$V_{\text{C}}$	Potentiel attractif du cœur négatif.
$\hbar$	Constante réduite de Planck.
$Z$	le nombre des électrons de valence atomique.
$r_{\text{C}}$	Le rayon du cœur.
$A$	Potentiel constant dans la région du cœur.
$V_{\text{NL}}(\mathbf{r})$	Potentiel non locale.
$V_{\text{L}}(\mathbf{r})$	Potentiel locale.
$A_{\text{I}}(E)$	L'énergie des états profonds.
$F_{\text{I}}(\mathbf{r})$	Une fonction simulant l'effet du cœur.
$P_{\text{I}}$	L'operateur de projection.
$\vec{\mathbf{R}}$	Un vecteur du réseau direct.
$\vec{\tau}$	Un vecteur de la translation réseau direct.
$V_{\text{a}}(\vec{\mathbf{G}})$	Le facteur de forme.
$S(\vec{\mathbf{G}})$	Le facteur de structure.
$N_{\text{a}}$	Nombre d'atome de base.
$V^{\text{A}}(\mathbf{G})$	Le facteur de forme symétrique.
$V^{\text{s}}(\mathbf{G})$	Le facteur de forme antisymétrique.
$V_{\text{A}}(\mathbf{G})$	Le facteur de forme d'atome A.
$V_{\text{B}}(\mathbf{G})$	Le facteur de forme d'atome B
L.D.A	L'approximation de la densité locale.
V.C.A	l'approche du cristal virtuel.
E.P.M	La méthode empirique de pseudopotentiel.
V.C.A.A	Approximation du cristal virtuel améliorée
$V_{\text{P}}(\mathbf{r})$	Pseudopotentiel du cristal.
$V_{\text{VCA}}$	Potentiel périodique virtuel du cristal.
$V_{\text{dés}}$	Potentiel non périodique.

<b>Chapitre II</b>	
$\vec{E}$	Le champ électrique.
$\vec{B}$	Le champ magnétique.
$K$	Le vecteur d'onde.
$\omega$	La pulsation.
$\lambda$	La longueur d'onde.
$T$	La période de l'onde.
$N(\omega)$	L'indice de réfraction complexe.
$K(\omega)$	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.
$\phi$	L'angle d'incidence.
$R$	Le coefficient de réflexion.
$\alpha$	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.
$\epsilon_\infty$	La constante diélectrique en haut fréquence.
$\alpha_p$	La polarité.
$V_a(3)$	Les facteurs de formes antisymétriques à G(111).
$V_s(3)$	Les facteurs de formes symétriques à G(111).
$\alpha_c$	La covalence du matériau.
$\epsilon_0$	La constante diélectrique statique.
$\mu_0$	la perméabilité magnétique du vide.
$E_0$	L'amplitude et la polarisation.
<b>Chapitre III</b>	
$C$	la constante de force.
$K$	le vecteur d'onde.
$\omega$	la pulsation.
$N$	nombre total de cellules unitaires dans la chaîne linéaire.
$\omega_+$	la branche optique.
$\omega_-$	la branche acoustique.
$\omega_{TO}$	La fréquence du mode transversal optique.
$\omega_{LO}$	La fréquence du mode longitudinal optique.
$Z$	Le nombre d'électrons de valence.
$e_T^*$	la charge effective transversale.



*Introduction générale*

### Introduction générale :

Les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes : les isolants, les semi-conducteurs et les conducteurs.

Les matériaux semi-conducteurs constituent une classe bien définie avec des propriétés électronique et autre propriétés, sont la base de la pluparts des dispositifs optoélectroniques et des appareils modernes de traitement de l'information [1].

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes IIIb et Vb de la classification périodique des éléments , 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, constantes optiques (variation du gap et de l'indice de réfraction en fonction de la concentration  $x$ ) et d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré [2] .

Les matériaux binaires sont principaux grâce à leurs larges applications dans les cellules photovoltaïques, les photodiodes, et les dispositifs optoélectroniques tels que les Diodes Electro Luminescentes (DEL) ou Diode laser (DL), Les composés binaires semi-conducteurs de base de l'alliage d'étude  $Al_xIn_{1-x}Sb$  sont l'antimoniure d'indium InSb et l'antimoniure d'aluminium AlSb ces composés sont cristallisés dans la structure zinc blende avec une bande interdite 0,17 eV pour le InSb et 2,27 eV pour le AlSb. [3,4].

L'antimoniure d'indium (InSb) est utilisé dans les détecteurs de type photodiodes, des systèmes d'imagerie, dispositifs détecteurs d'infrarouges et dans les systèmes de guidage autodirecteur infrarouge et en infrarouge, et l'antimoniure d'aluminium (AlSb) a montré des potentialités pour des applications telles que les détecteurs de photons à haute énergie, barrière matérielle pour confiner des électrons dans des dispositifs hétéro-structures d'antimonide [5].

Dans ce travail, nous étudions les propriétés vibrationnelles de AlInSb en utilisant la méthode du pseudopotentiel couplée à l'approximation du Cristal Virtual (V.C.A) avec et sans inclure l'effet de désordre compositionnel et associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (Bond Orbital Model).

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

Le premier chapitre présent 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

Dans le troisième chapitre on donne un aperçu général sur la dynamique du réseau des semi-conducteurs.

Le quatrième chapitre expose les résultats de calculs avec les discussions et la comparaison avec d'autres calculs.

### Références :

[1] E. F. Schubert, E. O. Gobel, Y. Horikoshi, K. Ploog, and H. J. Queisser, Phys. Rev. B **30**, 813 (1984).

[2] H. Saheb, Mémoire de magister, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2012.

[3] W. Bahi , Mémoire de master , Université Kasdi Merbah, (Algérie), 2014.

[4] H. Mekahlia, Mémoire de master, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2016.

[5] X. C. Cheng, T. C. McGill, J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 2291( 1998,.

# *Chapitre I*

## *Méthode du pseudopotentiel*

**I-1-Introduction :**

La technique pseudopotentielle est une véritable révolution dans la théorie des structures de bande [1]. C'est une technique de calcul plus rapide, plus précise qui permettant d'obtenir et simplifier les calculs de la structure électronique et les propriétés de nombreux solides [2, 3].

Le concept de pseudopotentiel fut introduit par Fermi [4] (1934) pour étudier les états atomiques des couches minces et l'approximation de pseudopotentiel a été introduite par Phillips [5] et par Phillips Kleinman [6] est actuellement la plus utilisée pour la détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés telles que la bande interdite, la dépendance de la température et de la pression avec la structure électronique, les propriétés chimiques ...etc [7-9].

**I-2-Concept de pseudopotentiel :**

Le système qui contient le potentiel  $V_{\text{ext}}$  créé par le noyau (potentiel de coulomb) pose un problème technique, où les calculs deviennent de plus en plus coûteux au fur et à mesure que la taille du système étudié augmente, à cause d'une part, de l'augmentation des nombres des électrons, et l'autre part du caractère localisé de certaines orbitales [10].

En particulier quand on veut utiliser une base d'ondes planes ce qui permet d'exploiter au mieux la symétrie translationnelle du cristal, est alors de considérer deux groupes d'électrons : les électrons de cœur sont internes et les plus proches du noyau sont très sensibles à l'environnement et chimiquement inertes et les électrons de valence qui sont eux les acteurs principaux des réactions chimiques. De cette séparation, on établit le modèle suivant : les électrons de cœur et le noyau forment un potentiel effective beaucoup moins attractive agissant sur les électrons de valence c'est ce potentiel qu'on appelle un pseudopotentiel [2].

Ce pseudopotentiel possède deux choses importantes : sa douceur et sa transférabilité. Le terme douceur caractérise la possibilité de calculer l'énergie du système avec une petite valeur d'énergie de coupure  $E_{\text{cut}}$ . Plus ce paramètre est petit plus le pseudopotentiel et la capacité à prédire ou reproduire correctement un grand nombre de propriété du matériau considéré, c'est-à-dire , qu'il soit utilisable dans le plus grand nombre possible de systèmes (dans des environnements thermodynamique différents) [11].

Il existe quatre grands types de pseudopotentiel, qui ont chacun leurs avantages et leurs inconvénients :

- Les pseudopotentiels: à norme conservée introduits par Hamann et *al* [12].
- Les pseudopotentiels: Ultra-doux introduit par Vanderbilt [13].
- Les pseudopotentiels: dual-space gaussien introduit par Geodecker et *al*. [14, 15].
- Le pseudopotentiel projeté PAW, acronyme de l'anglais « Projector Augmented Wave» [16] qui ne conservent pas la norme.

**I-3-Construction d'un pseudopotentiel :**

Le pseudopotentiel doit vérifier les propriétés suivantes [17]:

- Il doit être additif, c'est à dire le pseudopotentiel totale de plusieurs atomes est la somme des pseudopotentiel des atomes individuels.
- Il doit être transférable c'est-à-dire pour les environnements chimiques différents on doit pouvoir utiliser le même pseudopotentiel.
- Il induit des variations de potentiel plus faibles que dans le cas du potentiel de cœur réel.
- Il est nécessaire d'avoir différents pseudopotentiels pour les états s, p, d, c.-à-d., le pseudopotentiel dépend du moment angulaire (pseudopotentiel non-local).

**I-4-Formalisme mathématique :**

La méthode pseudopotentielle est donnée par la fonction d'onde  $\psi$ , qui est donnée par la somme d'ondes planes  $\varphi$  et des états atomiques occupées du cœur  $\varphi_c$  [3]. Ça veut dire :

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

La fonction d'onde  $\psi$  doit être orthogonale aux états du cœur  $\varphi_c$  c'est -à- dire

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

Alors la solution  $b_c$  rapporte

$$\psi = \varphi - \sum_c \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c \quad (\text{I-3})$$

On trouve l'énergie correcte  $E$  en substituant l'expression de  $\psi$  dans 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

$$H \psi = H \left( \varphi - \sum_c \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c \right) \quad (\text{I-5})$$

$$H \varphi - H \sum_c \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c = E \varphi - E \sum_c \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c \quad (\text{I-6})$$

$$H \varphi_c + \sum_c (E - E_c) \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c = E_c \varphi_c \quad (\text{I-7})$$

$$H \varphi_c = E_c \varphi_c \quad (\text{I-8})$$

Avec :

$$V_R \varphi = \sum_c (E - E_c) \langle \varphi_c | \varphi \rangle \varphi_c \quad (\text{I-9})$$

$V_R$  : représente le potentiel répulsif positif.

Donc :

$$(H + V_R) \varphi = E \varphi \quad (\text{I-10})$$

Si l'énergie est séparée en énergie cinétique et en potentiel attractif  $V_c$  :

$$H + \frac{P^2}{2m} + V_c \quad (\text{I-11})$$

L'équation (I-10) devient:

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V_c + V_R\right) \varphi = E \varphi \quad (\text{I-12})$$

Où :

$$P^2 = -\hbar^2 \Delta \quad (\text{I-13})$$

Donc:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_c + V_R\right) \varphi = E \varphi \quad (\text{I-14})$$

Alors:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_p\right) \varphi = E \varphi \quad (\text{I-15})$$

Où :

$$V_p = V_c + V_R \quad (\text{I-16})$$

$V_p$  : C'est le pseudopotentiel qui est faible.

$V_c$  : Potentiel attractif du cœur négatif.

$V_R$  : Potentiel répulsif positif.

### I-5- Méthode de pseudopotentiel :

La méthode de pseudopotentiel est utilisée pour calculer les niveaux d'énergies  $E_n(k)$  et d'autres propriétés des semi-conducteurs.

Le principe de cette approche est seulement que les électrons de cœur forment un potentiel effectif agissant sur les électrons de valences. On peut dire que les électrons du cœur sont supposés figés dans la configuration atomique et les électrons de valence se meuvent dans un potentiel périodique d'un seul électron [18].

### I-6- Modèles du pseudopotentiel :

Il existe deux modèles de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local et le pseudopotentiel non local.

**I-6-1 Le modèle local :**

Ce modèle est le plus simple, il consiste en un potentiel local dépendant de la variable  $r$  et exploité dans le calcul de la structure de bande de semi-conducteur. Il ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états de cœur.

Le pseudo-hamiltonien pour un électron dans un cristal est donnée par :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_p^L(r) \quad (\text{I-17})$$

$V_p^L(r)$  : représente le pseudopotentiel local.

Il existe trois types dans le modèle local :

➤ **Premier modèle :**

C'est le modèle consiste en un potentiel coulombien à une distance large et un potentiel constante dans la région de cœur. La relation du potentiel  $v(r)$  est définie comme suite [7] :

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ \frac{Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-18})$$

$Z$  : le nombre des électrons

$r_c$  : représente le rayons de cœur

➤ **Deuxième modèle : modèle de Heine et Abarenkov.**

Dans ce modèle de Heine et Abarenkov [19], on introduit un potentiel  $A$  considéré comme constant dans la région de cœur. La relation du potentiel  $V(r)$  est définie comme suite [19]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-19})$$

➤ **Troisième modèle : modèle d'Ashcroft.**

Dans ce modelé Ashcroft [20] utilise une autre forme du potentiel similaire à la forme du potentiel de Heine et Abarenkov c'est le potentiel du cœur inoccupé.

La relation du potentiel  $V(r)$  est définie comme suite [8]:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{-Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{I-20})$$

**I-6-2 Modèle non locale :**

Le but de l'approche non-locale est de combler les insuffisances de l'approche précédente. Des expériences utilisant les rayons X ont prouvé que la technique du pseudopotentiel local ne

donne pas de bons résultats concernant la densité de charge de quelques composés.

Cette approche a fait son apparition à partir des années 1976 pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif [21].

La non-localité traduit la différence d'énergie qui existe entre le cœur et l'électron de valence. Elle est calculée pour chaque moment angulaire orbital ( $l = 1, 2, 3, \dots$ ) [22, 23]. Dans ce cas le pseudopotentiel dépend du moment angulaire des fonctions d'ondes d'où le pseudopotentiel non-local est la somme du pseudopotentiel local et d'un terme de correction (dépendance énergétique avec chaque moment angulaire).

Le modèle non local consiste à remplacer le potentiel  $A$  du modèle locale par une fonction  $A_l(E)$  [24].

Le pseudopotentiel non local donné par la fonction suivante [24, 25] :

$$V_p^{NL}(r, E) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{I-21})$$

$A_l(E)$  : est appelée énergie des états profonds, c'est une fonction dépendant de l'énergie des états du cœur.

$P_l$ : L'opérateur de projection de  $l^{\text{ème}}$  composant du moment angulaire.

$f_l(r)$  : Une fonction simulant l'effet du cœur.

**Remarque :** il existe plusieurs modèles selon le choix de  $f_l(r)$  .

Le modèle de Ashcroft, de Heine et Abarenkov ont la forme Gaussienne.

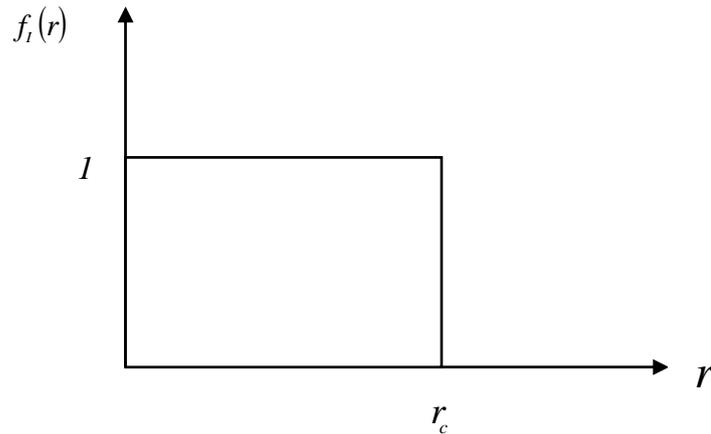
➤ **Fonction de Heine et Abarenkov :**

Dans le modèle du Heine et Abarenkov la forme de la fonction  $f_l(r)$  est carrée et plus utilisée à cause de sa simplicité.

L'expression de cette fonction et la suivante [26] :

$$F_l(r) = \begin{cases} 0 & r \geq r_c \\ 1 & r < r_c \end{cases} \quad (\text{I-22})$$

Où  $r_c$  est le rayon du cœur ionique



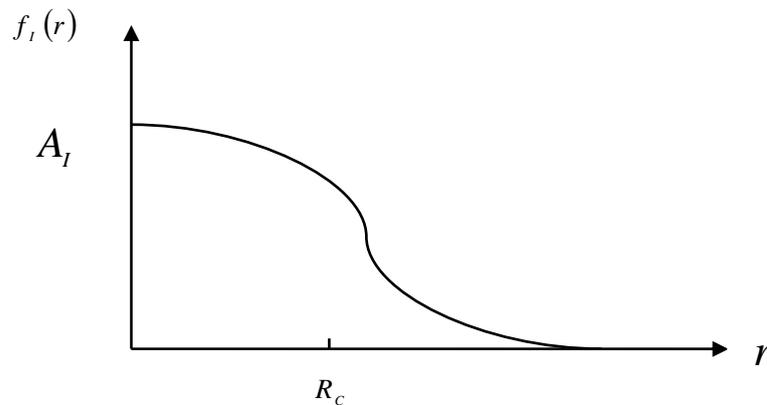
**Figure I- 1 :** Fonction de Heine et Abarenkov.

➤ **Fonction de Gauss :**

La forme de la fonction de Gauss est plus réaliste, puisque ses résultats convergent vers ceux trouvés expérimentalement.

La fonction de Gauss est représentée par l'expression suivant [26]:

$$f_1(r) = \exp\left(\frac{-r^2}{r_c^2}\right) \quad (\text{I-23})$$



**Figure I- 2 :** Fonction de Gauss.

➤ **Fonction d'Ashcroft :**

Dans cette fonction la fonction  $f_1(r)$  est nulle. L'indice zéro se réfère au paramètre non masqué. Cette dernière équation montre que le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'ondes des électrons de conduction sur les états du Cœur, annule très exactement le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique [27].

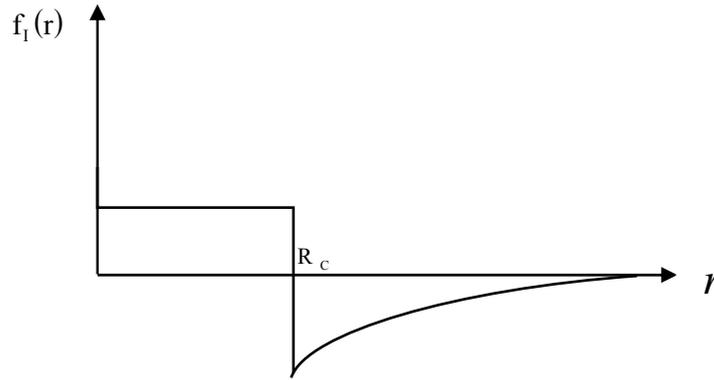


Figure I- 3 : Fonction d'Ashcroft.

### I-7-Méthode pseudopotentiel empirique (E. P. M) :

La méthode du pseudopotentiel empirique (E. P. M) est une autre image de la méthode de Pseudopotentiel, cette méthode consiste à remplacer le potentiel réel du solide par un autre appelée le pseudopotentiel, ce potentiel permet une très bonne description du système [28].

La méthode pseudopotentiel empirique (E. P. M) n'est pas été utilisée extensivement pour étudier tous les métaux mais appliquée avec succès à une douzaine de semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende. La première application réussie était sur le Germanium et le Silicium [29].

Dans cette méthode empirique du pseudopotentiel la structure de bandes est calculée en utilisant seulement quelques termes de  $V(\vec{G})$  que l'on obtient par des ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux [30].

La méthode du pseudopotentiel empirique (E. P. M) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme expérimentaux  $V(\vec{G})$ .

On distingue deux approximations de la méthode empirique du pseudopotentiel:

- Approximation empirique locale.
- Approximation empirique non locale.

#### I-7-1-L'approximation empirique locale :

Cette approche admette que le pseudopotentiel comme état local, donc indépendant de l'effet du cœur est négligeable.

L'hamiltonien d'un électron dans le cristal est donné par:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + v_p^L(r) \quad (\text{I-24})$$

Dans l'approximation locale le potentiel  $V_p(\vec{r})$  est représenté par une superposition linéaire des potentiels atomiques [3].

$$V_p(\vec{r}) = \sum_{R,\tau} V_a(\vec{r} - \vec{R} - \vec{\tau}) \quad (\text{I-25})$$

$\vec{R}$  : est le vecteur du réseau direct.

$\vec{\tau}$  : est le vecteur de translation du réseau direct.

La forme du potentiel dans le réseau réciproque prend la forme suivante :

$$V_p(\vec{r}) = \sum_G S(\vec{G}) V(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (\text{I-26})$$

$S(\vec{G})$  : est le facteur de structure donné par [7] :

$$S(\vec{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (\text{I-27})$$

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

$V(\vec{G})$  : est le facteur de forme, ce facteur est un paramètre ajustable de manière à obtenir des structures de bande satisfaisante [28].

Dans la structure zinc- blende les facteurs de forme antisymétriques et symétriques sont donnés par:

$$\begin{cases} V^A = \frac{1}{2}(V_A(G) - V_B(G)) \\ V^S = \frac{1}{2}(V_A(G) + V_B(G)) \end{cases} \quad (\text{I-28})$$

$V^A(G)$  et  $V^S(G)$  Sont respectivement les facteurs de forme antisymétriques et symétriques.

$V_A(G)$  et  $V_B(G)$  Sont respectivement le facteur de forme de l'atome A et B.

### I-7-2-L'approximation empirique non locale.

Nous savons que le potentiel répulsif se trouve dans l'expression du pseudopotentiel, ce qui fait que ce dernier dépend également du moment angulaire des fonctions du cœur. C'est pour cela que le pseudopotentiel considéré sera la somme du pseudopotentiel local et de terme de correction qui simulerait les effets répulsifs à l'intérieur du cœur.

L'Hamiltonien s'écrira comme suit :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_p^L(r) + V_p^{NL}(r, E) \quad (\text{I-29})$$

$V_p^{NL}(r, E)$  : représente la correction non-locale qui provient des différents contributions décrit précédemment.

### I-8-La méthode de calcul du (E. P. M).

La méthode de calcul du (E. P. M) est illustrée dans un organigramme présent dans la figure I-4.

- 1- choisir les facteurs de forme  $V(G)$ .
- 2- Remplacer  $V(G)$  dans la relation de pseudopotentiel qui inclut le facteur de structure.
- 3- Résoudre l'équation de Schrödinger pour les valeurs propres d'énergie  $E(k)$  et les pseudofonctions d'ondes  $\psi(k)$  .
- 4- Comparer les valeurs propres d'énergie avec l'expérience.
- 5- Si les valeurs propres d'énergie sont en bon accord avec l'expérience, altérer les calculs.
- 6- Sinon altérer les calculs et choisir d'autres valeurs de  $V(G)$ .

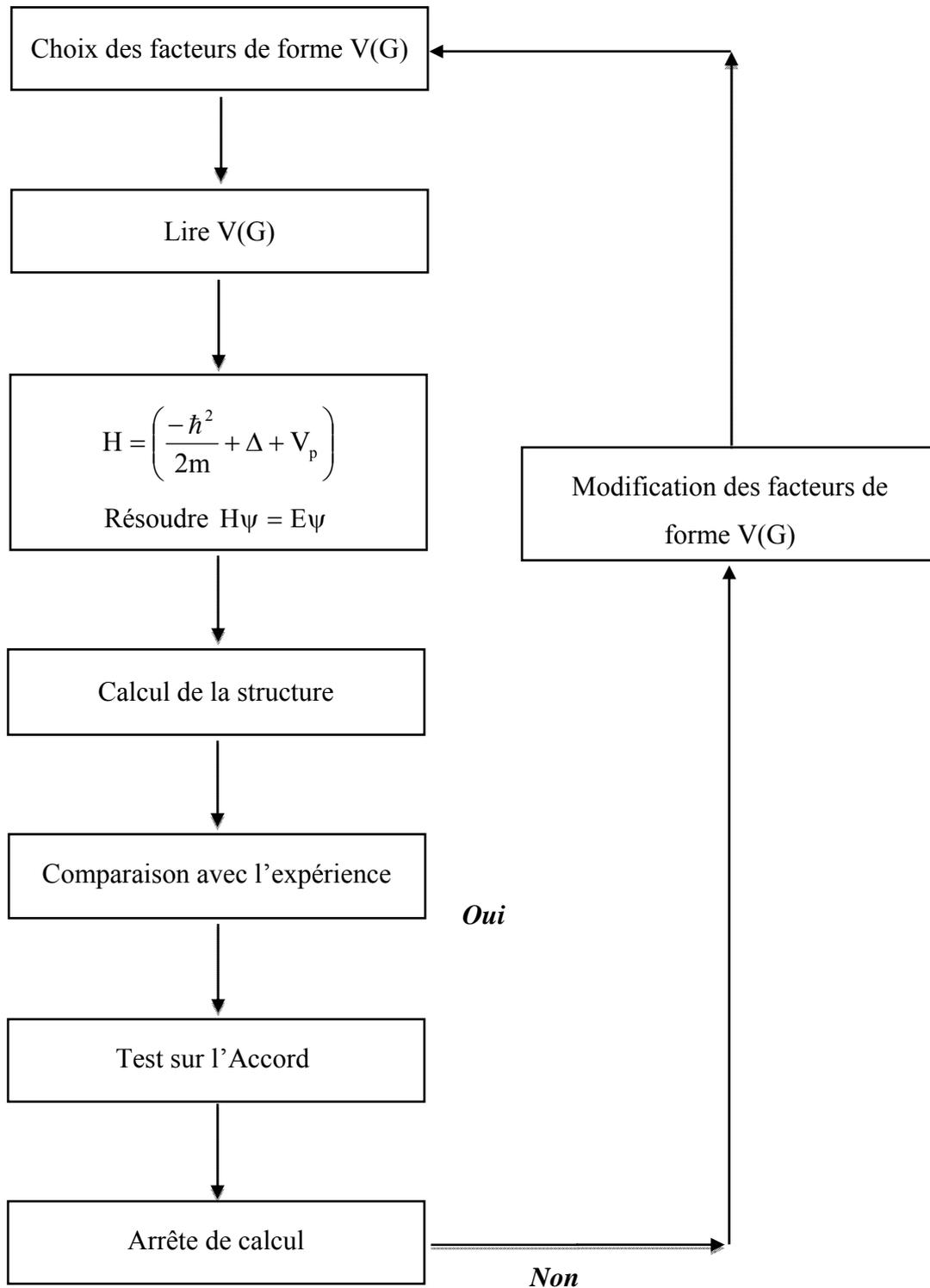


Figure I-4 : Diagramme de la procédure de calcul par EPM.

**I-9- Théorie des alliages :**

Les alliages semi-conducteurs, avec la richesse de leurs structures électroniques et autres propriétés, ont trouvé une large application dans les dispositifs optiques et électroniques. La littérature sur les propriétés fondamentales de ces matériaux a rapidement augmenté. Ces dernières décennies, beaucoup de progrès et de découvertes majeures ont été réalisés. Cependant, étant devant une difficulté majeure pour traiter le désordre dans ces matériaux, la théorie des alliages semiconducteurs prendra probablement une autre décennie pour être au même niveau de maturité que la théorie actuelle des cristaux semi-conducteurs. Il est donc impératif de donner quelques notions de base sur les jeunes théories traitant ce sujet, en reliant les propriétés des alliages semiconducteurs à leurs constituants [31].

**I-9-1-Notions de base sur les solutions solides :**

La dissolution des substances solides dans des solvants se comprend intuitivement, mais la solubilité d'un solide dans un autre est un cas parfaitement analogue difficile à saisir. Le mélange de deux éléments A et B à l'état solide forme ce qu'on appelle une solution solide dont l'élément mineur est le soluté, l'autre étant le solvant. Les solutions solides sont les phases solides d'un alliage où les concentrations relatives des constituants est variable à l'échelle microscopique sans pour autant altérer leur homogénéité à l'échelle macroscopique [32].

On distingue différents alliages selon le nombre d'atomes mis en jeu .On peut citer par exemple [33] :

- les binaires de la forme  $A_x B_{1-x}$  où x représente le taux de substitution d'atomes de A dans B. si x est compris entre 0 et 1 alors, on dit qu'il ya une totale miscibilité entre A et B par contre si x est compris entre 0 et une valeur c, on dit qu'il y a une miscibilité partielle.
- les ternaires de la forme  $A_x B_{1-x} C$ .
- Les quaternaires de la forme  $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$  Ce type d'alliages semi-conducteurs fait intervenir quatre composés binaires et caractérisé par la présence de deux coefficients stoechiométriques x et y.
- Les quasi binaires de la forme  $(AB)_x (CD)_{1-x}$  ce type d'alliages présentent quatre composés binaires mais sous forme d'alliages binaires faisant intervenir un seul coefficient stoechiométrique.

**I-10-Méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs :**

Différentes méthodes ont été appliquées pour l'étude optique et électronique des alliages semi-conducteurs (III-V, II-VI, ... ), ceci inclue les méthodes basées sur le modèle des liaisons fortes semi-empiriques [34], modèle semi-empirique pseudopotentiel [35] et le modèle self-consistant de l'approximation de la densité locale (L.D.A) [36], la C.P.A [37] et l'approche du cristal

virtuel (V.C.A) [38] etc... . Mais l'approche E.P.M combinée avec la V.C.A en tenant compte de l'effet du désordre reste le plus simple et offre des résultats compatibles avec les données expérimentales [39, 40]. C'est cette approche que nous avons utilisée pour calculer la dépendance compositionnelle et le traitement du désordre chimique des alliages semi-conducteurs [8].

### I-10-1- Alliages ternaires :

#### I-10-1-1 Approximation du cristal virtuel (V.C.A) :

Cette approche est la plus utilisée pour sa simplicité d'application tout en assurant des résultats s'accordant aux données expérimentales [33]. La V.C.A considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel) avec un potentiel atomique moyen [41].

Dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [42, 43], on considère que ces distorsions sont suffisamment faibles (théorie de perturbation du premier ordre). Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage. En particulier, le potentiel cristallin est défini par interpolation linéaire entre ceux des composants constituant le cristal [8].

$$V(x) = x V_{AC} + (1-x) V_{BC} \quad (I-30)$$

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (I-31)$$

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

#### I-10-1-2 Approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA) :

Dans les années soixante dix, Baldereschi et Maschke ont traité l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation mais restant toujours incapable d'expliquer le paramètre de courbure [44]. Les efforts requis pour cette méthode sont importants rendant son application assez difficile.

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 [45] :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (I-32)$$

Avec:

$$V_{dés} = -p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (I-33)$$

Avec:

$$\Delta(\mathbf{r}) = V_{AC}(\mathbf{r}) - V_{BC}(\mathbf{r}) \quad (\text{I-34})$$

On remplace (I-34) dans (I-33) on trouve :

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{VCA} - p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} [V_{AC} - V_{BC}] \quad (\text{I-34})$$

Où :

$V_p(\mathbf{r})$  : est le pseudopotentiel du cristal.

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

$V_{dés}$  : est le potentiel non périodique, il est dû à l'effet du désordre du cristal.

L'équation (I-34) peut être écrite sous une forme plus étendue comme suit [46] :

$$V_p(\mathbf{r}) = x V_{AC}(\mathbf{r}) + (1-x)V_{BC}(\mathbf{r}) - p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} [V_{AC} - V_{BC}] \quad (\text{I-35})$$

En termes de séries de Fourier, le potentiel  $V_p(\mathbf{r})$  devient alors comme suit :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_G V(G) \exp(i \vec{G} \cdot \vec{r}) \quad (\text{I-36})$$

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

$$V(G) = x V_{AC}(G) + (1-x)V_{BC}(G) - p(x(1-x))^{\frac{1}{2}} [V_{AC}(G) - V_{BC}(G)] \quad (\text{I-37})$$

$V_{AC}(G)$  Et  $V_{BC}(G)$  Sont les facteurs de formes des constituants de l'alliage.

**Références :**

- [1] F. Y. Ghrici, Mémoire de magistère, Université d'Oran des sciences et de technologie Mohamed Boudiaf, (Algérie).
- [2] B. Bertrand, Mémoire de master 1 de physique, Université Claude Bernard Lyon, (France), 2010.
- [3] H. Mekahlia, Mémoire de master, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2016.
- [4] E. Fermi, *Nuovo Cimento*, **11**, 157 (1934).
- [5] J. C. Phillips, *Phys. Rev* **112**, 685 (1958).
- [6] J. C. Phillips, and L. Kleinman, *Phys. Rev* **112**, 685 (1959).
- [7] M. L. Cohen and J. R. Chelikosky, "in electronic structure and optical properties of semi-conductors", Springer series in solid state sciences ed. Springer New York, 1988.
- [8] A. Bechiri, Thèse de doctorat d'état, Université de Mentouri Constantine, (Algérie), 2006.
- [9] W. A. Harrison, S. Ciraci, *Phys.***10**, 1516 (1974).
- [10] J. Ali, Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, (France), 2010.
- [11] M. Boualeg, Mémoire de magister, Université de 8 mai 1945 Guelma, (Algérie), 2012.
- [12] D. R. Hamann, M. Schlüter, and C. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1494 (1979).
- [13] D. Vanderbilt, *Phys. Rev.* **41**, 7892 (1990).
- [14] S. Geodecker, M. Teter and J. Hutter, *Phys. Rev.* **54**, 1703 (1996).
- [15] C. Hartwigsen, S. Geodecker and J. Hutter, *Phys. Rev.* **58**, 3641 (1998).
- [16] P. E. Blochl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- [17] S. Benyettou, Thèse de doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, (Algérie), 2016.
- [18] S. Debouba, Mémoire de master, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2016.
- [19] V. Heine, I. Abarankov, *Phil. Mag.* **9**, 451(1964).
- [20] N. W. Ashcroft, *Phys. Lett*, **23**, 48(1966).
- [21] S. Yousfi, Mémoire de magister, Université de Msila, (Algérie), 2004.
- [22] I. Abarankov and V. Heine, *Phil. Mag.* **13**, 529(1965).
- [23] W. A. Harrison, *Phys. Rev.* **136**, 1107(1964).
- [24] C.S.Wang, B.M.Klein, *Phys. Rev.* **24**, 3417(1981).
- [25] M. Appapillai, A. R. Williams, *J. Phys. F: Metal Phys.* **3**, 759 (1973).
- [26] L. Hannachi, Thèse de doctorat, Université de Sétif 1, (Algérie), 2010.
- [27] F. Benmakhlouf, Thèse de doctorat d'état, Université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [28] D.M.Marcel, Thèse de doctorat, Université des sciences et technologie de Lille, (France), 2013.
- [29] F. Berdi, Mémoire de magister, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2013.
- [30] R. Mouici, Mémoire de magister, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2012.

- [31] H. Hamdi, Mémoire de master, Université de Abou Bekr Belkaid Tlemcen, (Algérie), 2015.
- [32] Génard Lesoult, " Technique de l'ingénieur ", M 58.
- [33] W. Kara Mohamed, Thèse de doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, (Algérie), 2012.
- [34] P. A. Fedders und C. W. Myles, Phys. Rev. **802**, 1129(1984).
- [35] T. Ito, J. Appl. Phys. **77**, 4845(1995).
- [36] J. E. Bernard and A. Zunger, Phys. Rev. **B36**, 3199(1987).
- [37] A. N. Voloshinski, N. V. Ryzhanova, L. Yu. Vishnekov and A.G. Obukhov, Phys. Stat. Sol. (b) **133**, 735(1986).
- [38] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm and C. K. Kim, J. Phys. Condens. Matter. **2**, 3253(1990).
- [39] N. Bouarissa, N. Amrane and H. Aourag, Infrared Phys. Technol. **36**, 755(1995).
- [40] N. Bouarissa and H. Aourag, Infrared Phys. Technol. **36**, 973(1995).
- [41] J. Mycielsky and A. M. Witowski, Phys. Stat. Sol. (b) **134**, 675(1986).
- [42] C. Nordheim, Phys. **K9**, 607(1931).
- [43] R. Parmenter, Phys. Rev. **97**, 587(1955).
- [44] A. Baldereschi, E. Hese, K. Maschke, H. Neumann, K.-R. Schulze and K. Unger: J. Phys. C :Solid State Phys. **10**, 4709 (1977).
- [45] S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter **2**, 3253(1990).
- [46] N. Bouarissa, Phys. Lett. A **245**, 285(1998).

## *Chapitre II*

# *Etude des propriétés optiques et diélectriques*

**II-1- Introduction :**

Les propriétés optiques d'un semiconducteur peuvent être définies à partir des interactions entre le rayonnement électromagnétique (la lumière) et le semiconducteur étudié, y compris l'absorption, diffraction, polarisation, réflexion, réfraction, et des effets de diffusion.

Le spectre électromagnétique est un véhicule important pour donner un aperçu des types de mesures et de procédés physiques caractéristiques des différentes régions d'intérêt entre les propriétés optiques des semiconducteurs [1]. Pour comprendre les propriétés des matériaux, nous devons tenir compte des différents rôles joués par l'électron dans la structure du solide [2].

L'objectif de ce chapitre est l'étude des propriétés optiques du solide et les propriétés diélectriques.

**II-2- Interaction rayonnement matière :**

L'interaction du rayonnement électromagnétique (EM) avec la matière a fourni au fil des ans un outil efficace et puissant pour comprendre et sonder les états électroniques et de vibration ainsi que l'étude des propriétés optiques [3].

**II-2-1- Photons et électrons :***Les photons*

La combinaison d'un champ électrique  $\vec{E}$  et d'un champ magnétique  $\vec{H}$  représente la nature ondulatoire du rayonnement électromagnétique [4].

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 [5]. Ces équations sont rappelées ci-dessous [6].

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

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

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

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

$\vec{E}$  : le champ électrique.

$\vec{H}$  : le champ magnétique.

$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$  : est la permittivité absolue du milieu diélectrique.

$\varepsilon_r$  : est la permittivité relative du milieu diélectrique.

$\varepsilon_0$  : est la permittivité électrique du vide.

$\mu_0$  : Est la perméabilité magnétique du vide.

On remarque que les champs électromagnétiques dans le vide sont transverses:  $\vec{\text{div}}\vec{E}=0$  et  $\vec{\text{div}}\vec{H}=0$  [7].

Les champs électrique et magnétique vibrent perpendiculairement l'un à l'autre et à la direction de propagation.

Le champ électrique est donné par l'expression suivante :

$$E = E_0 e^{j(\omega t - kr)} \quad (\text{II-2})$$

$E_0$  : L'amplitude et la polarisation.

$k$  : Le vecteur d'onde.

$\omega = 2\pi\nu$  : La pulsation.

L'équation (II-2) est une solution de l'équation de propagation (II-1), elle représente une onde plane monochromatique de pulsation  $\omega$  et le vecteur d'onde  $k$ , cette onde se propageant dans la direction  $r$ .

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

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

Ou :  $c = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$  et  $V = \frac{c}{n}$

$n$  : L'indice de réfraction.

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

Dans le cas de l'interaction rayonnement – matière, et plus particulièrement lorsqu'il y a un 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'on appelle des photons. L'énergie du photon est donnée par [4]:

$$E = \hbar\omega = h\nu \quad (\text{II-4})$$

Où  $h$  : la constante de Planck.

**Les électrons**

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

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{mV^2}{2} \quad (\text{II-5})$$

Einstein a proposé qu'à une onde plane de fréquence  $\nu$  et de longueur d'onde  $\lambda$ , on devait associer une particule, le photon d'énergie  $E = h\nu$  et de quantité de mouvement  $p = h/\lambda$ , 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  $\nu = E/h$  et de longueur d'onde  $\lambda = h/p$ . Ainsi la quantité de mouvement de la particule et le vecteur d'onde qui lui est associée sont liés par la relation [4] :

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (\text{II-6})$$

La relation de dispersion de l'électron libre s'écrit :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II-7})$$

**II-2-2- Réflexion des ondes planes :**

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différentes, elle sera divisée en deux, en une onde réfléchie et en 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  $\theta$  se propage dans le vide sur les limites du milieu d'indice de réfraction complexe  $N$  donné par [8].

$$N = n + ik \quad (\text{II-8})$$

$n$  : 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 [9]:

$$r_n = \frac{\cos \phi - \sqrt{N^2 - \sin^2 \phi}}{\cos \phi + \sqrt{N^2 - \sin^2 \phi}} \quad (\text{II-9})$$

$$r_p = \frac{N^2 \cos \phi - \sqrt{N^2 - \sin^2 \phi}}{N^2 \cos \phi + \sqrt{N^2 - \sin^2 \phi}} \quad (\text{II-10})$$

$r_n$  : 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.

$\phi$  : représente l'angle d'incidence.

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 réfléchié alors [10] :

$$R_n = |r_n|^2 \quad \text{et} \quad R_p = |r_p|^2 \quad (\text{II-11})$$

Pour une incidence normale ( $\phi = 0$ ), les équations (II-9) et (II-10) mènent au résultat suivant [11]:

$$R_n = R_p = R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{II-12})$$

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

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{II-13})$$

La mesure de la réflexion de la lumière fournit l'information la plus complète sur les systèmes électroniques [12].

Pour tous les semiconducteurs,  $R$  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 semiconducteur [4].

### II-3- Interaction électrons –photons (Transitions radiatives) :

Dans les semiconducteurs l'interaction du rayonnement avec les électrons se manifeste selon trois processus distincts [4] :

- Un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement.
- Un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée. Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.

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

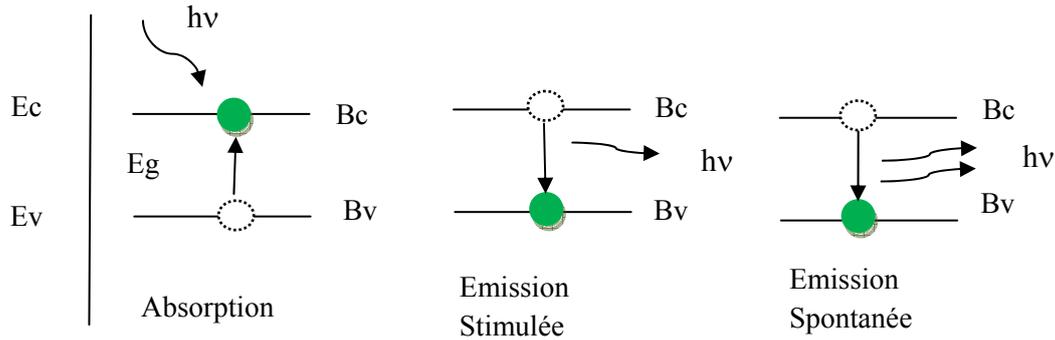


Figure II-1: les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur.

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 1 et 2, les états : initial et final de l'électron, et par p l'état du photon, les règles de conservation s'écrivent :

$$E_2 - E_1 = \pm E_p \tag{II-14}$$

$$\vec{k}_2 - \vec{k}_1 = \pm \vec{k}_p \tag{II-15}$$

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

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  $\mu\text{m}$  [4,8].

$$E(\text{eV}) = \frac{1.24}{\lambda(\mu)} \tag{II-16}$$

**II-4- Transition directe et indirecte :**

Un semiconducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k. Un semi conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k. L'appellation gap « indirect » est justifiée par le fait que les électrons libres de la bande de conduction ont toujours tendance à se placer au minimum de la bande de conduction pour minimiser leur énergie [13].

Pour les semiconducteurs à gap direct, les électrons peuvent redescendre directement dans la bande de valence en émettant un photon (juste pour la conservation de l'énergie). Dans un semiconducteur à gap indirect, on a bien entendu aussi un gap direct d'énergie supérieure. Mais, puisque ce sont les transitions obliques (c.-à-d., avec modification de quantité de mouvement) qui sont favorisées énergétiquement (les électrons se placent au minimum absolu de la bande de

conduction) et qui ont donc lieu en pratique, on appelle le gap indirect le gap « fondamental » pour le différentier du gap direct de plus grande énergie ce qui est montré sur la figure ci dessous[14].

La distinction entre les semi conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semiconducteurs à gap indirect qui sont illustrés ci-dessous [5 ,14].

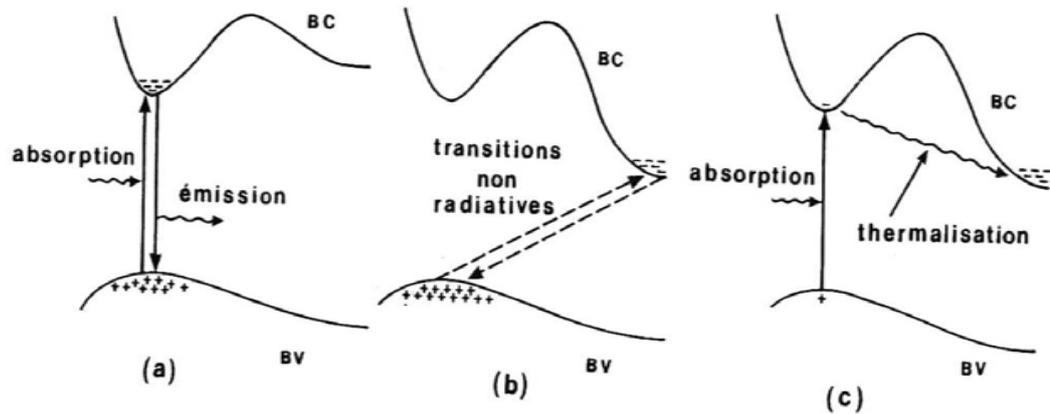


Figure II-2: *Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) semiconducteur à gap direct, b) semiconducteur à gap indirect, c) absorption direct des photons dans un semiconducteur à gap indirect [8].*

### II-5-Constantes optiques :

L'indice de réfraction représente l'un des plus importantes constantes optiques qui dépend généralement de la longueur d'onde d'une onde électromagnétique.

#### II-5-1-Calcul de l'indice de réfraction :

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

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 ...etc [15].

De nombreuses tentatives ont été faites pour évaluer l'indice de réfraction de divers matériaux en le mettant en relation avec l'énergie de gap  $E_g$ .

1- Moss à proposé une formule qui se base sur un model atomique [16] :

$$E_g n^4 = k \quad (\text{II-17})$$

Où

$E_g$  : est le gap d'énergie.

$k$  : est une constante trouvée égale à 108 eV.

2- une relation empirique pour  $\omega \ll \omega_0$  a été proposée par Herve et Vandamme [17] :

$$n = \sqrt{1 + \left( \frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{II-18})$$

Où A et B sont respectivement des constantes de valeurs 13.6 eV et 3.4 eV, et  $\omega_0$  est la fréquence de résonance ultraviolet.

3- Une relation linéaire à été proposé par Ravendra et *al.* [18] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{II-19})$$

Où  $\alpha = 4.048$  et  $\beta = -0.62 \text{eV}^{-1}$

### II-5-2-constante diélectrique :

À partir du calcul de l'indice de réfraction on peut déterminer la constante diélectrique à haute fréquence par la relation [19] :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (\text{II-20})$$

La constante diélectrique statique est obtenue à partir de la relation de Harrison [20] :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + v \quad (\text{II-21})$$

Où v est donné par [21] :

$$v = \frac{\alpha_p (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{II-22})$$

$\alpha_c$  : C'est la covalence.

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{II-23})$$

$\alpha_p$  : C'est la polarité du matériau sous investigation déterminé par la définition de Vogel [22] :

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{II-24})$$

Où  $V_S(3)$  et  $V_A(3)$  sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques.

### Références:

- [1] E. D. Palik, Handbook of Optical constants of solids, Academic press (1998).
- [2] B. Chalmers, Structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, 1987.
- [3] S. Bacha, Thèse de doctorat, Université de Badji Mokhtar Annaba, (Algérie), 2014.
- [4] H. Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants électronique, 4 Ed Masson 1998.
- [5] H. Saheb, Mémoire de magister, Université de Larbi Tébessi Tébessa, (Algérie), 2012.
- [6] J. D. Patterson, B. C. Bailey, Solid-State Physics Introduction to the Theory, Springer (2007).
- [7] R. Carminati et C. Boccara, optique lumière et matière, Ed. Paris Tech **8**, 7 (2010).

- [8] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Université de Annaba (Algérie), 2010.
- [9] F. Mezrag, Mémoire de magister, Université de M'Sila, (Algérie), 2003.
- [10] P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties, 4 ed. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [11] F. Abelés, Optical Properties of Solids, North-Holland, Publishing Company, 1972.
- [12] C. Kittel, physique de l'état solide, Ed. Dunod Université, 1983.
- [13] A. C. Jones, Paul O'Brien and Paul O'Brien (Ph.D.), " CVD of compound semiconductors: precursor synthesis, development and application ", 1997.
- [14] W. K. Mohamed, Thèse de doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra.
- [15] R. R. Reddy, M. R. Kumar and T.V.R. Rao, Infrared Phys, **34**, 95 (1993).
- [16] V. P. Gupta and N.M. Ravindra, Phys. Stat. Sol. (b) **100**, 715 (1980).
- [17] P. J. L. Herve and L. K. J. Vandamme. J Appl Phys, **77**, 5476 (1995).
- [18] N. M. Ravindra, S. Auluck and V. K. Srivastava. Phys Status Solidi B, K 155, **93** (1979).
- [19] G. A. Samara, Phys. Rev. B **27**, 3494 (1983).
- [20] W. A. Harrison, S. Ciraci, Phys. Rev. B **10**, 1516 (1974).
- [21] S. Yu. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors, **32**, 947 (1998).
- [22] P. Vogl, Dynamical effective charges in semiconductors: a pseudopotential approach. J. Phys C, **11**, 251 (1978).
- [23] M. Boucenna, N. Bouarissa, Materials Science and Engineering B **138**, 228 (2007).
- [24] N. Bouarissa, Phys. Lett. A, **245**, 285(1998).
- [25] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th ed, John Wiley and Sons (2005).
- [26] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso and P. Giannozzi, Rev. Mod. Phys. **73** (2001) 515 and references therein.
- [27] N. Bouarissa and S. Saib, Current Appl. Phys. **13**, 493 (2013).
- [28] N. Bouarissa, S. Bougouffa and A. Kamli, Semicond. Sci. Technol. **20** (2005) 265.

# *Chapitre III*

## *Dynamique du réseau*

**III-1-Introduction :**

Des recherches sur la dynamique de réseau cristallin parfait ont suscité un intérêt considérable dans le composé ayant une structure de blende. Cette évolution est le résultat de nombreux travaux expérimentaux, en particulier les données neutrons diffusion inélastique pour les courbes de dispersion des phonons. Borchers et *al.* [1] ont fait la mesure de diffusion thermique de neutrons sur InP. L'application d'un modèle de force de bande a été utilisée pour décrire correctement ce résultat expérimental [2,3].

Les atomes dans un solide exécutent des oscillations autour de leurs positions d'équilibre. Ces vibrations, incohérentes, ont une grande importance pour l'étude des propriétés électriques des solides. Chaque type de réseau possède ses propres modes caractéristiques ou des fréquences de vibration appelée modes normaux [4].

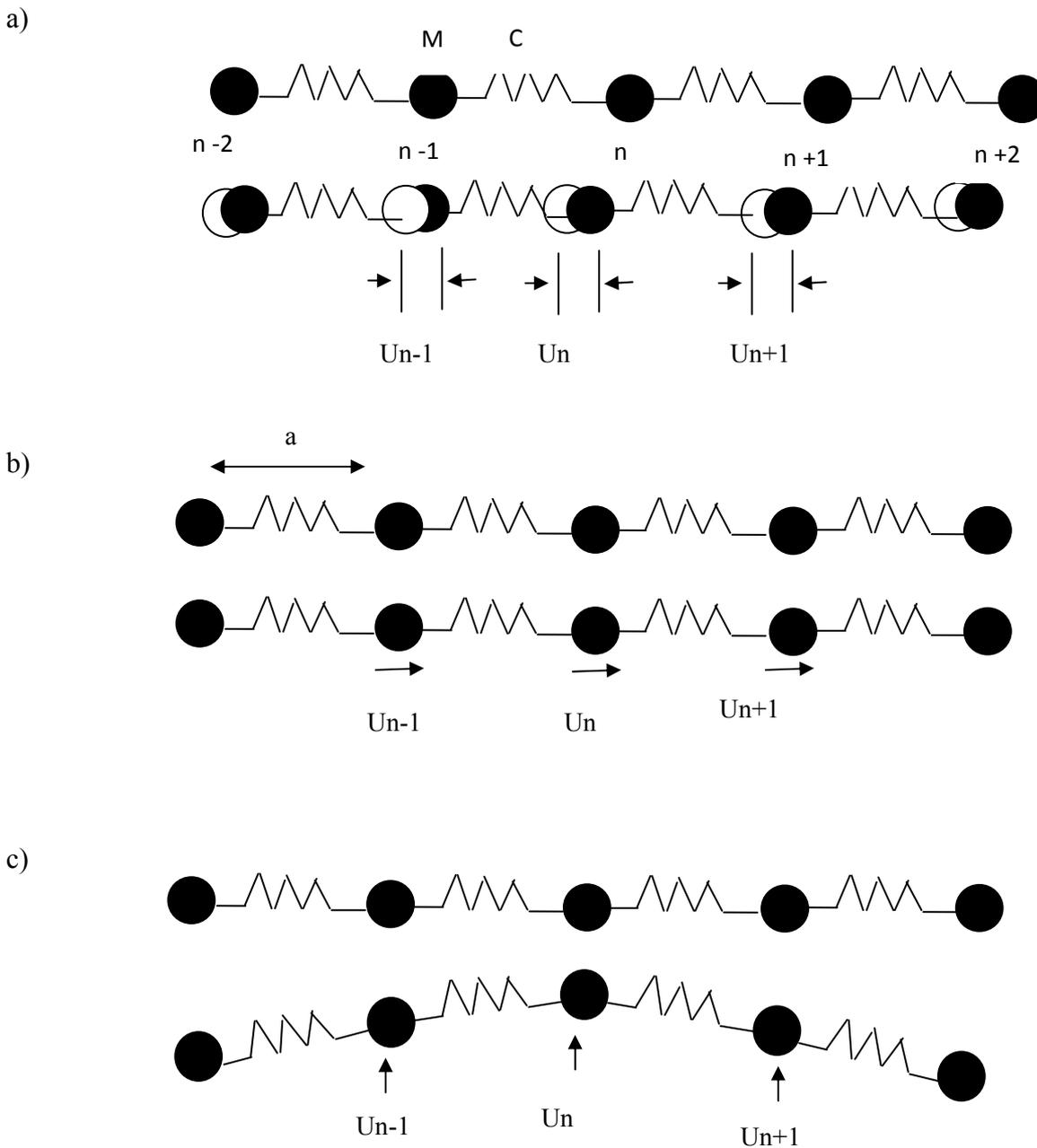
Ces modes normaux de vibrations ont une grande importance parce que tout mouvement de type vibratoire dans un solide peut être représenté comme la superposition d'un certain nombre de modes normaux de vibration de fréquences différentes. Les modes normaux de vibration peuvent être compris comme les vibrations élémentaires du réseau [5].

Dans ce chapitre, on présente la théorie moderne pour calculer les propriétés vibrationnelles des cristaux. Nous commençons par présenter les notions de vibration de réseau et la relation de dispersion.

**III-2-La chaîne linéaire unidimensionnelle :****III-2-1-La chaîne linéaire monoatomique :**

Soit une chaîne linéaire infinie monoatomique composée d'un seul type d'atome identique relié par des ressorts élastiques séparé par une distance ( $a$ ) les uns des autres. La figure (III-1) schématisé ce système. Les atomes ont une masse  $M$  et interagissent entre eux de façons harmoniques à condition que les déplacements soient faibles.

On suppose qu'une onde élastique de vecteur d'onde  $\vec{k}$  se propage dans une direction telle que les polarisations en soient purement ou longitudinales (déplacement colinéaire à  $\vec{k}$ ) ou transversales (déplacement perpendiculaire à  $\vec{k}$ ).



**Figure III-1 :** Cristal unidimensionnel monoatomique.

a) Chaîne linéaire monoatomique, b) mode longitudinal, c) mode transverse.

Nous Supposons que la réponse élastique du cristal est une fonction linéaire de force et que la force dans un plan  $n$  supposé causer par un déplacement  $n+p$  du plan est proportionnelle à la différence  $u_{n+p} - u_n$  de leur déplacement. On prend en considération que les interactions des atomes voisins, la force totale dans le plan  $n$  est [6] :

$$F_n = C(u_{n-1} - u_n) + C(u_{n+1} - u_n) \tag{III-1}$$

L'expression de déplacement est linéaire et sous la forme de la loi de Hooke, avec  $C$  est la constante de force entre plans plus proches voisins. L'équation de mouvement d'un atome est donnée :

$$M \ddot{u}_n = C(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) \quad (\text{III-2})$$

La solution de l'équation de mouvement est de la forme :

$$u_n = u \exp[i(kx - \omega t)] = u \exp[i(kna - \omega t)] \quad (\text{III-3})$$

Où :

$k = 2\pi/\lambda$  : est le vecteur d'onde.

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

Considérant les 3 directions possibles de vibration des atomes, à chaque vecteur  $k$  seront associées une onde longitudinale (déplacement colinéaire à  $\vec{k}$ ) et deux ondes transverses (déplacement perpendiculaire à  $\vec{k}$ ).

Nous pouvons résoudre l'équation du mouvement en remplaçant l'équation (III-3) dans l'équation (III-2) :

$$-M\omega^2 A \exp[i(kan - \omega t)] = -C(2 - e^{-ika} - e^{ika})A \exp[i(kan - \omega t)] \quad (\text{III-4})$$

Après simplification l'équation (III-4) devient :

$$-M\omega^2 = -C(2 - e^{-ika} - e^{ika}) \quad (\text{III-5})$$

D'où :

$$\omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos ka) = \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{ka}{2} \quad (\text{III-6})$$

Cette dernière expression peut également être réécrite comme suit :

$$\omega = \omega_{\max} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (\text{III-7})$$

$$\text{Où : } \omega_{\max} = \sqrt{\frac{4C}{M}}$$

Cette expression est nommée la relation de dispersion de phonon, est représentée graphiquement sur la Figure (III-2)

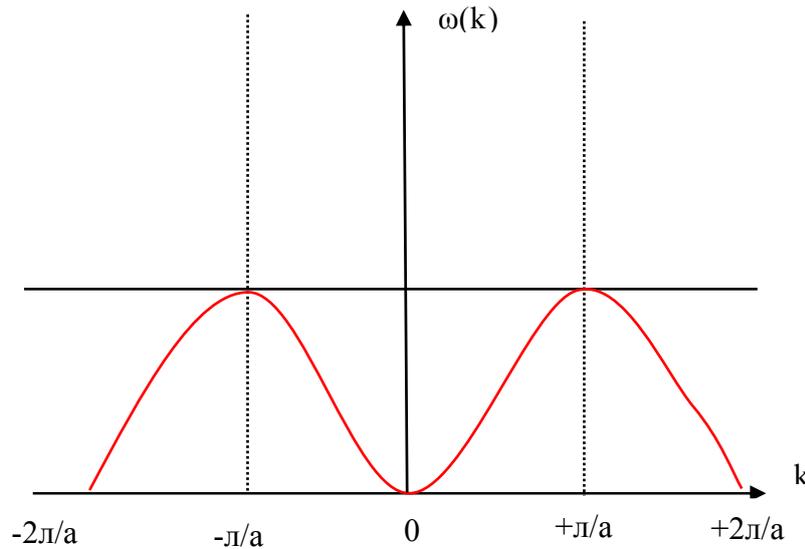


Figure III-2: Courbe de dispersion d'une chaîne monoatomique unidimensionnelle.

**III-2-2 -La chaîne linéaire diatomique :**

Nous Considérons une chaîne diatomique, de paramètre de réseau  $a$ , avec deux atomes de masses respectives  $M_1$  et  $M_2$  ( $M_1 > M_2$ ). On suppose que chaque atome interagit avec ses proches voisins avec la même constante de rappel  $C$ , on note « $u$ » le déplacement de l'atome de masse  $M_1$  et « $v$ » le déplacement de l'atome de masse  $M_2$ . On suppose qu'une onde élastique de vecteur d'onde  $\vec{k}$  se propage dans la chaîne.

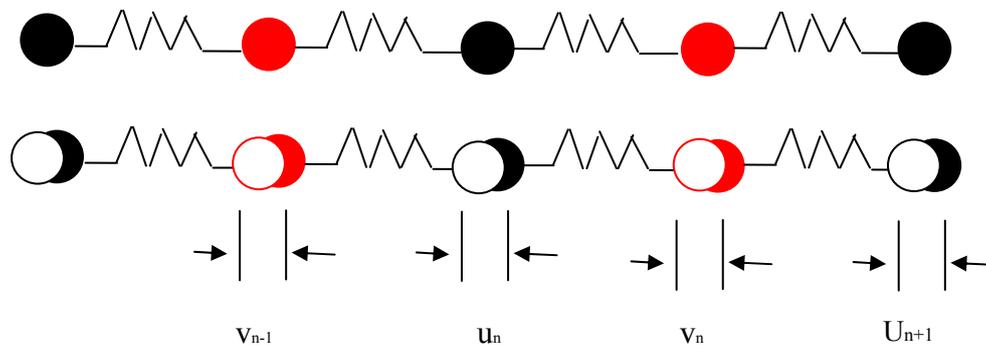


Figure III-3: Vibration de chaîne diatomique unidimensionnelle.

On prend en considération que les interactions des atomes voisins, la force totale dans le plan  $n$  est [6] :

$$\begin{aligned}
 F_{1,n} &= C(v_{n-1} - u_n) + C(v_n - u_n) \\
 F_{2,n} &= C(u_n - v_n) + C(u_{n+1} - v_n)
 \end{aligned}
 \tag{III-8}$$

De sorte que les équations régissant leurs mouvements prennent la forme :

$$\begin{aligned}
 M_1 \ddot{u}_n &= C(v_{n-1} + v_n - 2u_n) \\
 M_2 \ddot{v}_n &= C(u_n + u_{n+1} - 2v_n)
 \end{aligned}
 \tag{III-9}$$

Comme précédemment, ces déplacements peuvent se faire dans la direction de la chaîne ou dans une des deux directions perpendiculaires donnant naissance à des ondes longitudinales ou transverses.

La solution de les équations (II-8) peuvent être exprimé, comme suit :

$$\begin{aligned} u_n &= u \exp [i(kna - \omega t)] \\ v_n &= v \exp [i(kna - \omega t)] \end{aligned} \quad (\text{III-10})$$

On remplace (III-9) dans (III-10), on obtient :

$$\begin{aligned} -M_1 \omega^2 u &= C v [1 + \exp(-ika)] - 2C u \\ -M_2 \omega^2 v &= C u [( \exp(ika) + 1)] - 2C v \end{aligned} \quad (\text{III-11})$$

Les équations (III-11) auront une solution non triviale si et seulement si le déterminant des coefficients de v et u dans les deux équations est égal à zéro. Ainsi que, la fréquence  $\omega$  doit satisfaire à l'équation séculaire donnée par :

$$\begin{vmatrix} (2C - M_1 \omega^2) & -2C \cos(ka) \\ -2C \cos(ka) & (2C - M_2 \omega^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{III-12})$$

La résolution de (III-12) pour  $\omega$  donne :

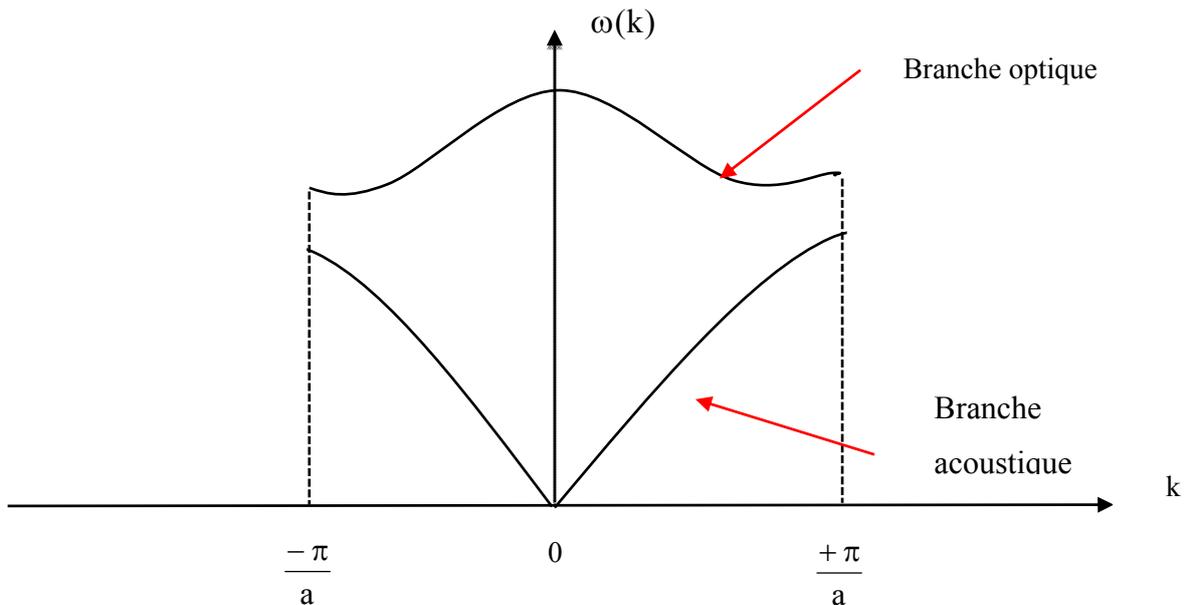
$$\omega_{\pm}^2 = C \left( \frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right) \pm C \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2} - \frac{4 \sin^2(ak)}{M_1 M_2} \quad (\text{III-13})$$

En utilisant le même argument que dans le cas d'une chaîne linéaire monoatomique, on constate que les valeurs permises de  $|K|$  pour la chaîne linéaire diatomique sont donnée par :

$$|k| = \frac{n\pi}{Na} \quad (\text{III-14})$$

Où N est le nombre total de cellules unitaires dans la chaîne linéaire, et n est un nombre entier. Etant donné que la période d'une chaîne linéaire diatomique est égal à 2a, la première zone de Brillouin est défini par  $-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$ .

Il y'a donc deux relations de dispersion possibles, noté  $\omega_+(k)$  et  $\omega_-(k)$ , concernant la fréquence angulaire de nombre d'onde. Les deux relations sont tracées dans la première zone de Brillouin dans la Figure III-4. Ces courbes représentent le spectre d'un cristal harmonique diatomique unidimensionnel phonon [7].



**Figure III-4 :** Courbe de dispersion d'une chaîne linéaire diatomique unidimensionnelle.

La branche inférieure est appelé le mode **acoustique** et La branche supérieure est appelé le mode **optique**.

On peut maintenant avoir une idée plus précise de ce que sont les modes optiques et les modes acoustiques.

### III-3-La branche optique et acoustique :

#### III-3-1-Branche acoustique :

- Pour  $k=0$  en utilisant  $\omega_-$  (III-13) pour la branche acoustique, on obtient

$$\omega_- = 0 \quad (\text{III-15})$$

L'équation (III-15) montre que la branche **acoustique** a la même structure que celle obtenue dans le cas d'une base monoatomique et l'atome adjacent vibrant presque en même phase [5,7].

- Pour  $k = \frac{\pi}{a}$  on obtient enfin les valeurs :

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} \quad (\text{III-16})$$

En outre, à partir de (III-13) pour  $M_1$ , et pour  $k=0$ , le rapport de l'amplitude de deux atomes différents de masse est donné par :

$$\frac{u}{v} = 1 \quad (\text{III-17})$$

**III-3-2-Branche optique :**

➤ Pour  $k=0$  en utilisant  $\omega_+$  (III-13) pour la branche optique, on obtient

$$\omega_+ = \sqrt{2C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \tag{III-18}$$

L'équation (III-18) montre que la branche optique présente une valeur finie (élevée) intéressante et une dispersion beaucoup plus faible sur la zone de Brillouin.

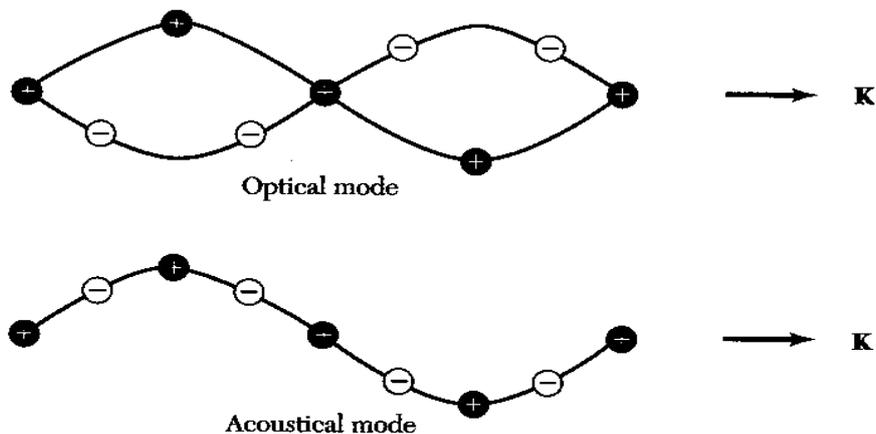
➤ Pour  $k = \frac{\pi}{a}$  on obtient enfin les valeurs :

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2C}{M_2}} \tag{III-19}$$

La résolution de (III-13) pour  $k=0$ , le rapport de l'amplitude de deux atomes différents de masse est donnée par :

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1} \tag{III-20}$$

La figure (III-5) montre les déplacements des atomes dans les deux modes pour la même longueur d'onde. Si les atomes sont de charges opposées, les vibrations des branches optiques peuvent être excitées par le champ électrique d'une onde lumineuse, la dénomination optique vient de là [2].



*Figure III-5 : Onde optique et acoustique transversale dans une chaîne linéaire diatomique [6].*

**III-4-Quantification des vibrations du réseau :**

Jusqu'à maintenant, nous avons discuté l'approche classique des vibrations du réseau. Nous avons appris à calculer les fréquences de vibration du réseau, lorsque les ions sont traités comme

des particules classiques. En pratique, cette approximation n'est pas trop mauvaise pour beaucoup gamme de propriétés des matériaux.

Dans une vue très approximative, on peut dire que si seulement la fréquence vibratoire  $\omega(k)$  d'un mode lui-même est pertinente, le traitement classique donne déjà une bonne réponse (ce qui explique pourquoi nous pourrions comprendre la structure de bande de phonons mesurée expérimentalement avec notre analyse classique). Si, au contraire, l'énergie connectée à ce mode  $\omega(k)$  est importante, ou plus précisément la manière dont on excite (ou peuple) ce mode, l'image classique échouera.

### III-4-1- Les phonons:

L'énergie d'une vibration du réseau est quantifiée. Le quantum d'énergie est appelé phonon. Les ondes élastique dans les cristaux sont formées de phonons .les vibration thermiques des cristaux sont des phonons excité thermiquement [6].

### III-4-2- Fréquences des phonons des modes optiques :

La compréhension de vibration du réseau est importante pour de nombreuses raisons, il permet de déterminer la propagation du son à travers le cristal ainsi que ses propriétés thermiques. Il a un effet sur la propagation d'électrons et même affecte l'absorption et l'émission de lumière des cristaux [8,6]. Suite à la procédure utilisée par Bouarissa et *al.* [8], la fréquence longitudinale optique et la fréquence transversale sont calculées à partir de la combinaison de la relation de Lyddane-Sachs-Teller [9].

$$\frac{\omega_{TO}^2}{\omega_{LO}^2} = \frac{\epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \quad (\text{III-21})$$

Avec l'utilisation de l'expression suivante [10, 11] :

$$\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2 = \frac{4\pi e_T^{*2} e^2}{M\Omega_0 \epsilon_{\infty}} \quad (\text{III-22})$$

Où  $\epsilon_{\infty}, \epsilon_0, e_T^*$  sont respectivement la constante diélectrique à haute fréquence, la constante diélectrique statique et la charge effective transversal, avec  $\Omega_0$  est le volume occupé par un atome et  $M$  est la masse réduite.

La charge effective est calculée par l'utilisation de la relation reportée dans la référence [12] :

$$e_T^* = -\frac{\Delta z}{2} + \frac{4\alpha_p}{1 + \alpha_p^2} \quad (\text{III-23})$$

$$\Delta z = z_{Sb} + (1-x)z_{In} + x z_{Al} \quad (\text{III-24})$$

$z$  : sont les valences

**III-5- vitesses des ondes acoustiques:**

Si la densité cristalline  $\rho$  et les constantes élastiques  $C_{ij}$  des solides sont connues, la vitesse du son  $V$  peut être calculée à partir d'une relation simple [13, 8] suivante :

$$V = \left( \frac{C_{ij}}{\rho} \right)^{1/2} \quad (\text{III-25})$$

**Références :**

- [1] P. H. Brocherds, G. F. Alfrey, D. H. Saunderson, and A. D. B. Woods, *J. Phys. C* **8**, 2022 (1975).
- [2] S. Yip and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* **30**, 7037 (1984).
- [3] R. K. Ram, S. S. Kushawaha, and A. Shukla, *Phys. Status Solidi, B* **154**, 553 (1989).
- [4] J. D. Patterson, B. C. Bailey, *Solid-State Physics Introduction to the Theory*, Springer (2007).
- [5] N.W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt-Saunders International Editions. (1979).
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8<sup>th</sup>Ed, John Wiley and Sons, (2005).
- [7] J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, Cambridge University Press, (2003).
- [8] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* **245**, 285 (1998).
- [9] R. H. Lyddane, R. G. Sachs, and E. Teller, *Phys Rev.* **59**, 673 (1951).
- [10] S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov, *Semiconductors* **32**,947(1998).
- [11] N. Bouarissa, S. Bougouffa and A. Kamli, *semicond. Sci. Technol.* **20**, 265 (2005).
- [12] S. Adachi, *J. Appl. Phys. R* **1**,58 (1985).
- [13] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Hand Book Series on Semiconductor Parameters*, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.

# *Chapitre IV*

## *Résultats et discussions*

**IV-1-Introduction :**

Au cours des dernières années des nombreux travaux expérimentales et théoriques ont été faites pour comprendre les propriétés optiques, électroniques, élastiques et thermiques des composés binaires et ces alliages [1,2].

Les composés semiconducteurs III-V dans la structure zinc blende ont des applications potentielles dans la réalisation et le développement des dispositifs optiques et optoélectroniques comme photo-détecteurs, modulateurs électro-optiques, diode laser et diode électroluminescente [3].

Plusieurs méthodes du calcul ont été développées pour l'étude des propriétés des solides. Cependant la méthode empirique des pseudopotentiels reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience [4].

Dans notre travail on est intéressé par l'étude des propriétés vibrationnelles de l'alliage ternaire  $Al_x In_{1-x} Sb$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium d'alliage.

Dans nos calculs, nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui introduit l'effet du désordre compositionnel, et combinée avec le model des orbitales liées de Harrison (BOM).

Le pseudopotentiel est défini comme étant une superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme suivante [5] :

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

$V_L$  : La partie locale du pseudopotentiel.

$V_{NL}$  : La partie non locale du pseudopotentiel.

Dans nos calculs, on néglige les parties non locales et on a considéré les composants de Fourier de  $V_L(\vec{r})$  Comme des paramètres du pseudopotentiel [4].

$$V_p(\vec{r}) = V_L(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} S(\vec{G}) V_a(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\vec{r}) \quad (IV-2)$$

$V(\vec{G})$  : Le facteur de forme.

$S(\vec{G})$  : Le facteur de structure.

Les composés de Fourier  $V(G)$  [6] sont les paramètres du pseudopotentiel ou les facteurs de formes. Ces derniers ont été tirés de la littérature et ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carrés [7] nommée le modèle d'optimisation de Kobayasi et Nara [6] où tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carré de

l'écart des gaps d'énergies calculés par la méthode du pseudopotentiel par rapport à ceux trouvés expérimentalement, définit par [8]:

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

$\delta$  Doit être minimal.

Avec

$$\Delta E_{i,j} = E_{ij}^{\text{exp}} - E_{ij}^{\text{cal}} \quad (\text{IV-4})$$

Où  $E_{ij}^{\text{exp}}$  et  $E_{ij}^{\text{cal}}$  sont les énergies observées expérimentalement et calculés ; entre le  $i^{\text{ème}}$  état au vecteur d'onde  $k = k_i$  et le  $j^{\text{ème}}$  état au vecteur d'onde  $k = k_j$  dans les  $m$  paires 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  $\delta$ .

Les facteurs de formes du pseudopotentiel local symétriques et antisymétriques et aussi les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteur *AlSb* et *InSb* dans la phase zinc

Blende sont présentés dans le tableau IV-1

**Tableau IV-1:** Les facteurs de forme symétriques ( $V_S$ ) et antisymétriques ( $V_A$ ) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs *InSb* et *AlSb* dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau  $a$  en (u.a) et en ( $A^\circ$ ).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau $a$
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(8)$	$V_A(11)$	
AlSb	-0.233314	0.068246	0.02599	0.057	0.058960	0.016475	11.5946 (u.a)
							6.1355 ( $A^\circ$ )
InSb	-0.186001	0.01	0.03084	0.045970	0.03	0.015	12.2437 (u.a)
							6.479 ( $A^\circ$ )

#### IV-2-Etude des gaps énergétiques :

Nous avons résumé le gap d'énergie fondamental  $E_g$  de l'alliage  $Al_x In_{1-x} Sb$  pour les concentrations  $x=0,0.1, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7, 0.9$  et 1 de l'aluminium avec et sans tenir compte l'effet du désordre compositionnel dans le tableau IV-2.

Nous constatons que, le gap d'énergie fondamental  $E_g$  de l'alliage  $Al_x In_{1-x} Sb$  augmente non linéairement en fonction de la concentration  $x$  de l'aluminium.

La figure IV-1 représente la variation du gap fondamental  $E_g$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium de l'alliage ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On observe que l'effet de désordre est important et donc on ne peut pas le négliger.

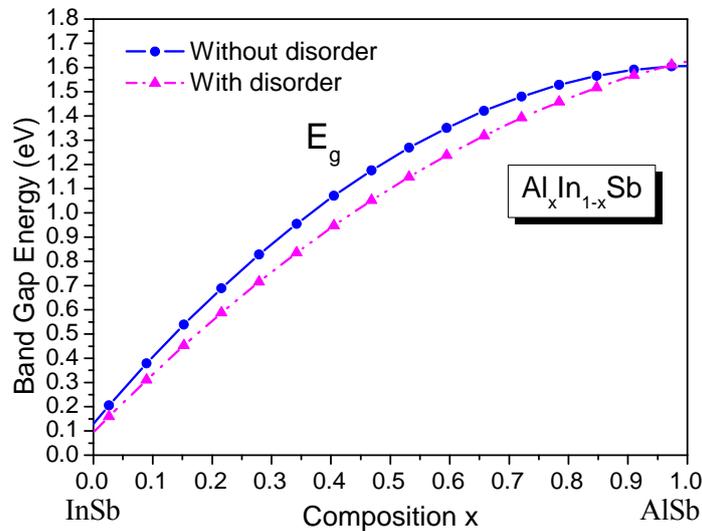
**Tableau IV-2:** Gap énergétique fondamental pour les composés binaires  $AlSb$  et  $InSb$  et leurs alliages ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Matériaux	$E_g$ (eV)	
	Cal.	Autre
InSb	0.17	0.17 <sup>a,b</sup>
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	0.39492* 0.30478**	-
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	0.83576* 0.70119**	-
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	1.26562* 1.12206**	-
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	1.46382* 1.40154**	-
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	1.56729* 1.52883**	-
AlSb	1.61501	1.615 <sup>a, b</sup>

\* les gaps d'énergie sans désordre.

\*\* les gaps d'énergie avec désordre.

<sup>a</sup> Réf.: [ 9 ], <sup>b</sup> Réf.: [ 10].



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

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

$$E_g = A + Bx + Cx(x-1) \tag{IV-5}$$

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

Les expressions analytiques du gap fondamental  $E_g$  avec (VCA) et (VCAA) des alliages ternaires  $Al_xIn_{1-x}Sb$  sont donnés par les relations suivantes :

$$E_g = 0.1307 + 2.8952x - 1.4185x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-6})$$

$$E_g = 0.0948 + 2.4931x - 0.9614x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-7})$$

L'addition du terme correctif p fait augmenter le paramètre de courbure de la valeur ( $c = -1.4185$ ) à la valeur ( $c = -0.9614$ ).

### IV-3- 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'énergies et les constantes optiques (l'indice de Réfraction  $n$ ) et les constantes diélectriques (la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  et la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$ ) sont des paramètres importants [11, 12, 13].

Les valeurs de l'indice de réfraction, la constante diélectrique statique et la constante diélectrique à haute fréquence sont illustrés dans le tableau IV-3.

#### IV-3-1-Indice de réfraction :

Pour obtenir les valeurs de l'indice de réfraction  $n$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre, nous utilisons la relation de Ravindra (eq. II-19), les valeurs de l'indice de réfraction  $n$  sont illustré dans le tableau IV-3, ce tableau regroupe nos calculs concernant les valeurs de l'indice de réfraction  $n$  et d'autre résultats.

La précision de notre calcul ou le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres travaux pour le composé binaire  $InSb$  en employant la relation de Ravindra, est dans l'intervalle [0.724% - 0.469% - 22.444%] et pour le composé binaire  $AlSb$  l'intervalle est [3.3638% - 44.727%].

On remarque que, nos résultats sont en bon accord par rapport aux autres travaux.

La figure IV-2 représente la variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium, calculée par la relation de Ravindra sans et avec désordre.

Dans cette figure, nous observons que les courbes sont presque identiques et ces variations sont non linéaires. On constate aussi, que l'effet du désordre fait augmenter l'indice de réfraction  $n$  en allant du composé  $InSb$  ( $x=0$ ) vers le composé  $AlSb$  ( $x=1$ ), mais cet effet est faible surtout pour les concentrations supérieure à  $x=0.6$ , dans ce cas, on peut le négligé. Une autre remarque importante est que, l'indice de réfraction  $n$  diminue avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

**Tableau IV-3 :** L'indice de réfraction  $n$ , la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  et la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  calculées par le modèle de Ravindra et ses collaborateurs des composés binaires  $AlSb$ ,  $InSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Composé	n	$\epsilon_\infty$	$\epsilon_0$
$InSb$	3.9786 <sup>(a)</sup> 3.95 <sup>(b), (c) (d)</sup> 3.96 <sup>(e)</sup> 5.13 <sup>(f), (g)</sup>	15.829258 <sup>(a)</sup> 15.68 <sup>(i), (j)</sup> 13.51 <sup>(i), 20.62<sup>(i)</sup></sup> 15.3 <sup>(k), 15.68<sup>(l)</sup></sup>	17.3077502 <sup>(a)</sup> 17.88 <sup>(i), 18.01<sup>(i)</sup></sup> 19.40 <sup>(i), 18.0<sup>(j)</sup></sup> 17.2 <sup>(k), 16.8<sup>(m)</sup></sup> 17.70 <sup>(l)</sup>
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	3.8391496* 3.8950364**	14.7390697* 15.1713086**	16.1046797* 16.5814982**
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	3.5658288* 3.6492622**	12.715135* 13.3171146**	13.872954* 14.5363781**
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	3.2993156* 3.3883228**	10.8854834* 11.4807314**	11.8574115* 12.51283**
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	3.1764316* 3.2150452**	10.0897177* 10.3365156**	10.9791655* 11.2513379**
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	3.1122802* 3.1361254**	9.68628804* 9.83528252**	10.5325521* 10.6967544**
$AlSb$	3.0826938 <sup>(a)</sup> 3.19 <sup>(b), (c) (d)</sup> 2.13 <sup>(e), (h)</sup>	9.50300106 <sup>(a)</sup> 10.24 <sup>(i), (j)</sup> 7.21 <sup>(i), 9.77<sup>(i)</sup></sup> 9.88 <sup>(k), 10.24<sup>(l)</sup></sup>	10.3297076 <sup>(a)</sup> 12.04 <sup>(i), 11.80<sup>(i)</sup></sup> 12.41 <sup>(i), 12.04<sup>(j)</sup></sup> 11.21 <sup>(k), 12.04<sup>(m)</sup></sup> 12.04 <sup>(l)</sup>

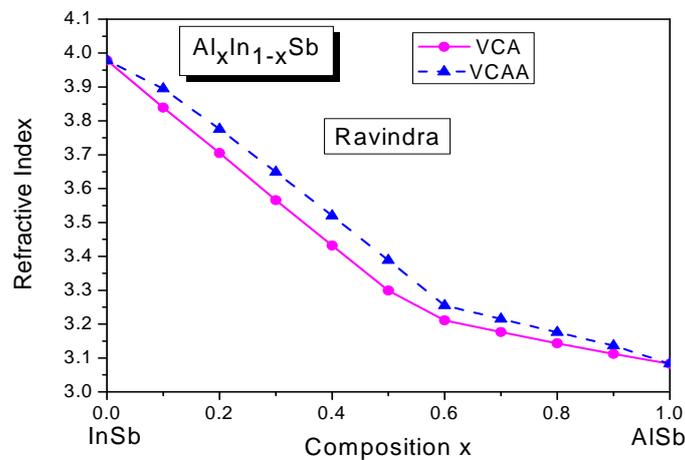
(a) Nos calculs

\* Nos calculs sans désordre.

\*\* Nos calculs avec désordre.

(b) Réf.: [13], (c) Réf.: [14], (d) Réf.: [15], (e) Réf.: [16], (f) Réf.: [17], (g) Réf.: [18], (h) Réf.: [19],

(i) Réf.: [20], (j) Réf.: [21], (k) Réf.: [22], (l) Réf.: [23], (m) Réf.: [24].



**Figure IV-2:** La variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium, calculé par la relation de Ravindra: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

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

$$n = A + Bx + Cx(x-1) \quad (\text{IV-8})$$

C : est le paramètre de courbure de l'indice de réfraction n.

Leurs expressions analytiques sont comme suites :

$$n = 4.00297 - 1.79504x + 0.87947x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-9})$$

$$n = 4.02525 - 1.59608x + 0.59608x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-10})$$

On note que, les paramètres de courbure (Bowling) sont positifs et ils diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces diminutions sont faibles.

#### IV-3-2- la constante diélectrique à haute fréquence :

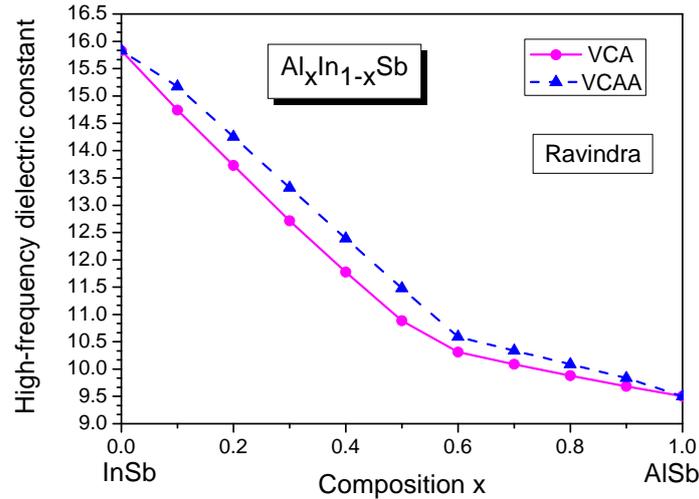
Pour calculer la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  nous avons utilisé la relation  $\epsilon_\infty = n^2$ .

Le Tableau IV-3 regroupe nos résultats de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  calculée avec la relation de Ravindra des composés binaires semiconducteurs *InSb* et *AlSb* et leurs alliages ternaires  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  et d'autres travaux disponibles.

Le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres travaux pour le composé binaire *InSb* en utilisant la relation de Ravindra, est dans l'intervalle [0.9519% - 17.1669% - 23.2334% et 3.4592%], et pour le composé binaire *AlSb* est dans l'intervalle [7.1972% - 31.8030% - 2.7328% et 3.8157%].

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

Dans la figure IV-3, la variation de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  diminue non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium et l'effet du désordre compositionnel influe sur la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$ . Mais cette influence est moins importante pour des concentrations supérieures à  $x=0.6$ , dans ce cas on peut le négliger. Cet effet fait augmenter la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  en allant du composé *InSb* ( $x=0$ ) vers le composé *AlSb* ( $x=1$ ).



**Figure IV-3:** La variation de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium, calculée par la relation de Ravindra: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

L'interpolation quadratique de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  ci-dessus est ajustée sous la forme suivante :

$$\epsilon_{\infty} = A + Bx + Cx(x-1) \tag{IV-11}$$

C: est le paramètre la courbure de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$ .

Leurs expressions analytiques sont comme suites :

$$\epsilon_{\infty} = 15.94855 - 13.184x + 6.81151x^2 \tag{VCA} \tag{IV-12}$$

$$\epsilon_{\infty} = 16.13708 - 11.56458x + 4.90765x^2 \tag{VCAA} \tag{IV-13}$$

Nous notons que les valeurs du bowing pour la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  sont positifs et elles diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces diminutions sont faibles.

### IV-3-3- la constante diélectrique statique :

Pour calculer la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$ , nous avons utilisé le model de Harrison qui relie la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_{\infty}$  avec la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$ .

Le tableau IV-3 regroupe nos calculs concernant les valeurs de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel calculée avec la relation de Ravindra des composés binaires semiconducteurs  $InSb$ ,  $AlSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$  et d'autres résultats disponibles.

Le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  en utilisant la relation de Ravindra est dans l'intervalle [3.20% - 3.89% - 10.78% -0.62% - 3.02% -

7.93% et 2.21%] et pour le composé binaire  $AlSb$ , l'intervalle est [14.20% - 12.46% - 16.76% et 7.85%].

Dans la figure IV-4, la variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  diminue non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

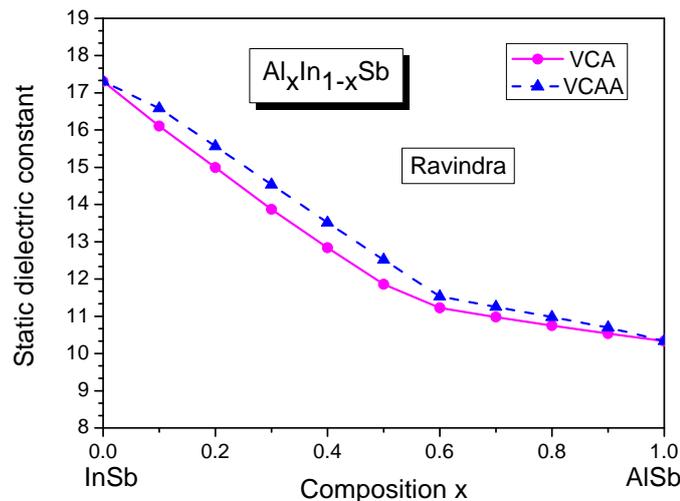
On constate aussi que, la variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium est semblable à celle de la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$  et de l'indice de réfraction  $n$ .

Les interpolations quadratiques de la variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium sont exprimées par les expressions analytiques suivantes :

$$\epsilon_0 = 17.43806 - 14.53101x + 7.50353x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-14})$$

$$\epsilon_0 = 17.64609 - 12.74729x + 5.40619x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-15})$$

On note que l'effet de désordre compositionnel est très clair et il ne doit pas être négligé.



**Figure IV-4:** La variation de la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en fonction de la concentration de l'Aluminium, calculée par la relation de Ravindra: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

#### IV-4-Etude de la dynamique du réseau :

##### IV-4-1- La charge effective transversale :

Nous attirons maintenant notre attention vers la dynamique du réseau Propriétés. La charge effective transversale est un paramètre de base caractérisant les propriétés diélectriques des solides. C'est une échelle appropriée pour la classification des structures en cristal.

Les valeurs de la charge effective transverse  $e_T^*$  et d'autres résultats sont illustrées dans le tableau IV-4.

Le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  est [20.17%] et pour le composé binaire  $AlSb$  est [0.40%].

Les résultats révèlent généralement un meilleur accord avec les autres travaux rapportés dans Références.

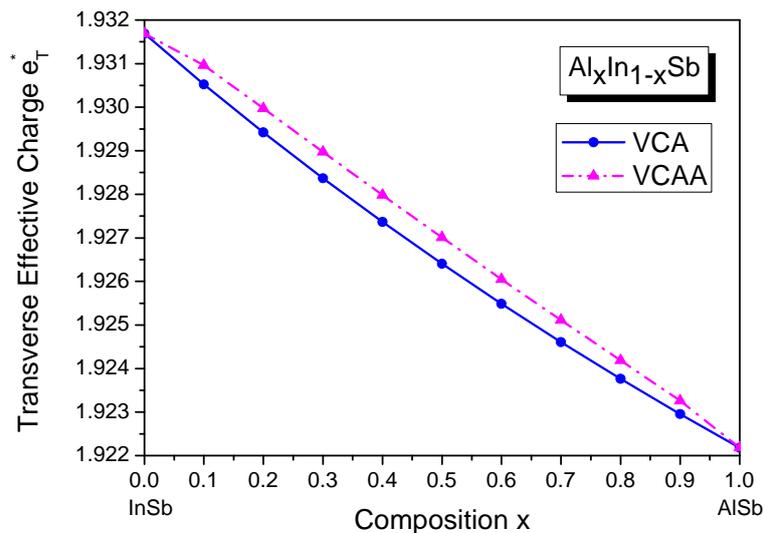
**Tableau IV-4:** Charge effective transverse  $e_T^*$  pour les composés binaires  $AlSb$  et  $InSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Matériaux	Charge effective transverse $e_T^*$	
	Cal.	Autre
InSb	1.93168686	2.42 <sup>(a)</sup>
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	1.9305264* 1.93096091**	-
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	1.92836847* 1.92897411**	-
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	1.92640357* 1.92700694**	-
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	1.92460691* 1.92511268**	-
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	1.92295778* 1.92326083**	-
AlSb	1.92218297	1.93 <sup>(a)</sup>

\* Nos calculs sans désordre.

\*\* Nos calculs avec désordre.

(a) Réf.: [25].



**Figure IV-5:** Variation de la charge effective transverse  $e_T^*$  en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

#### IV-4-2- Les fréquences des modes optiques :

Pour calculer la fréquence de phonon optique longitudinale et la fréquence de phonon optique transversale, nous avons utilisé la combinaison de la relation de Lyddane-Sachs-Teller (eq. III- 21) avec l'utilisation de l'expression (eq. III-22).

Le tableau IV-6 regroupe nos calculs concernant les valeurs des fréquences des phonons optiques longitudinales et transversales avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel des composés binaires semiconducteurs  $InSb$ ,  $AlSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$  et d'autres résultats disponibles.

Pour les fréquences des phonons optiques longitudinales le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  est dans l'intervalle [3.6540% -6.6423 %], et pour le composé binaire  $AlSb$  est dans l'intervalle [27.2914% -29.4519 %].

Pour les fréquences des phonons optiques transversales le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  est dans l'intervalle [2.21644% -4.9169 %], et pour le composé binaire  $AlSb$  est dans l'intervalle [30.2040% -31.2341 %].

On trouvera également à titre de comparaison les données connues disponibles, un accord raisonnable peut être noté entre nos résultats et les données connues.

Dans la figure IV-6, la variation de la fréquence de phonon optique longitudinale  $\nu_{LO}$  augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium, et l'effet du désordre compositionnel influe sur la fréquence de phonon optique longitudinale  $\nu_{LO}$  mais cette influence est moins importante pour des concentrations supérieures à  $x=0.6$ , dans ce cas on peut le négliger. Cet effet fait diminuer la fréquence de phonon optique longitudinale  $\nu_{LO}$  en allant du composé  $InSb$  ( $x=0$ ) vers le composé  $AlSb$  ( $x=1$ ).

La figure IV-7, représente la variation de la fréquence de phonon optique transversal  $\nu_{TO}$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium. Dans cette figure, nous observons que la variation de la fréquence de phonon optique transversal  $\nu_{TO}$  augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium. On constate aussi, que l'effet du désordre fait diminuer la fréquence de phonon optique transversal  $\nu_{TO}$  en allant du composé  $InSb$  ( $x=0$ ) vers le composé  $AlSb$  ( $x=1$ ), mais cet effet est faible surtout pour les concentrations supérieures à  $x=0.6$ , dans ce cas on peut le négliger.

Figure IV-8, représente la Variation des fréquences des phonons optiques longitudinale et transversale et longitudinale en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Tableau IV-5: Fréquences des phonons longitudinales et transversales pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Matériaux	Fréquences des phonons longitudinales $\nu_{LO}$ (THz)		Fréquences des phonons transversales $\nu_{TO}$ (THz)	
	Cal.	Autre	Cal.	Autre
InSb	5.5081	5.717 <sup>a</sup> 5.90 <sup>b</sup>	5.2676	5.387 <sup>a</sup> 5.54 <sup>b</sup>
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	6.2363* 6.1392**		5.9661* 5.8723**	
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	7.7934* 7.5986**		7.4611* 7.273**	
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	9.5433* 9.2664**		9.1438* 8.8761**	
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	11.011* 10.862**		10.556* 10.411**	
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	12.316* 12.210**		11.811* 11.708**	
AlSb	12.971	10.19 <sup>a</sup> 10.02 <sup>c</sup>	12.441	9.555 <sup>a</sup> 9.48 <sup>c</sup>

\* Nos calculs sans désordre

\*\* Nos calculs avec désordre.

(<sup>a</sup>) Réf.: [22], (<sup>b</sup>) Réf.: [26], (<sup>c</sup>) Réf.: [21].

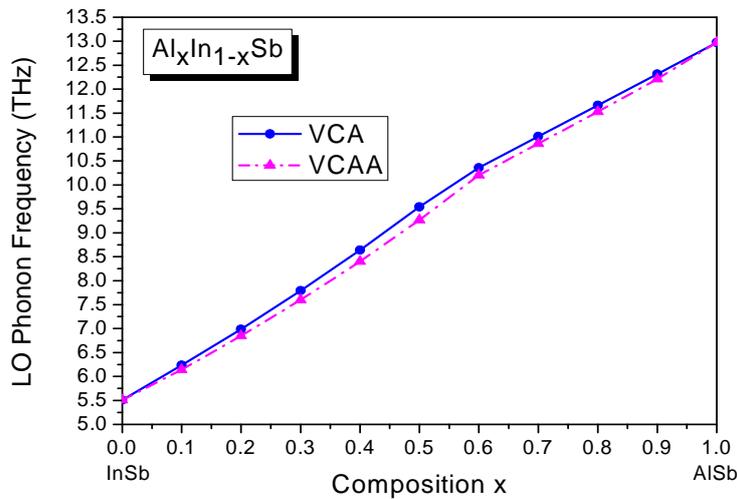


Figure IV-6: Variation de la fréquence de phonon optique longitudinale  $\nu_{LO}$  en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

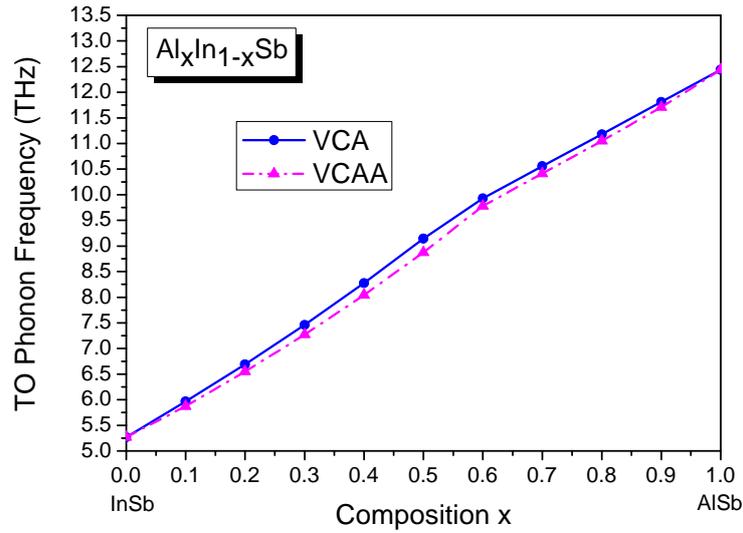


Figure IV-7: Variation de la fréquence de phonon optique transversale  $\nu_{TO}$  en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

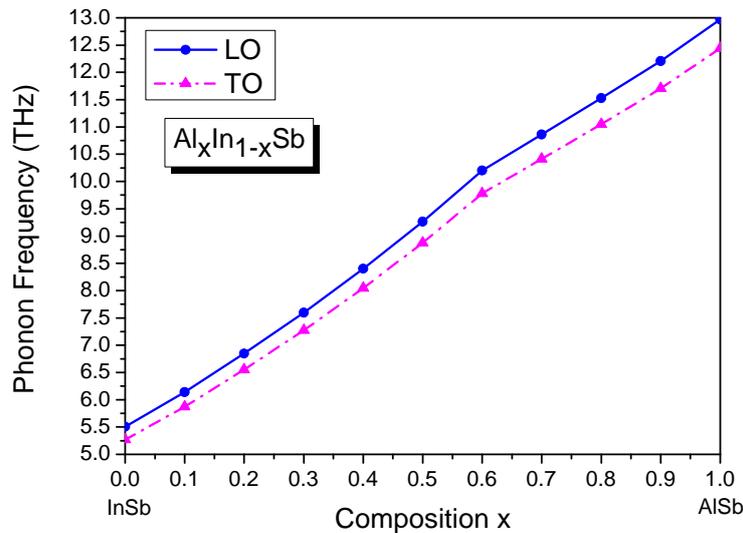


Figure IV-8: Variation des fréquences des phonons optiques longitudinale et transversale et longitudinale en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

L'interpolation quadratique de la variation des fréquences de phonon optique longitudinal  $\nu_{LO}$  et transversale  $\nu_{TO}$  ci-dessus est ajustée sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \nu_{LO} &= A + Bx + C x(x-1) \\ \nu_{TO} &= A + Bx + C x(x-1) \end{aligned} \tag{IV-16}$$

C: est le paramètre la courbure de la des fréquences de phonon optique longitudinal  $\nu_{LO}$  ou transversale  $\nu_{TO}$

Leurs expressions analytiques sont comme suites :

$$\nu_{LO}(\text{THz}) = 5.39216 + 8.71587 x - 1.09643 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-17})$$

$$\nu_{LO}(\text{THz}) = 5.37921 + 7.86345 x - 0.23 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-18})$$

$$\nu_{TO}(\text{THz}) = 5.1555 + 8.36885 x - 1.04386 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-19})$$

$$\nu_{TO}(\text{THz}) = 5.1432 + 7.5439 x - 0.206 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-20})$$

On note que, les paramètres de courbure (Bowling) sont négatifs et ils augmentent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces augmentations sont considérables donc l'effet du désordre ne doit pas être négligé.

#### IV-4-3- Les énergies des phonons optiques longitudinal et transversales :

La connaissance des fréquences des phonons  $\nu_{LO}$  et  $\nu_{TO}$  permet d'obtenir énergies phonons  $E_{LO}$  et  $E_{TO}$  pour toutes compositions  $x = 0, 0.1, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7, 0.9$  et 1 de l'aluminium.

Pour calculer l'énergie de phonon optique longitudinale et transversale, nous avons utilisé la relation suivante :

$$E_{TO/LO} = h \nu_{TO/LO} \quad (\text{IV-21})$$

Le tableau IV-6 regroupe nos calculs concernant les valeurs des énergies de phonons optiques longitudinale et transversale avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel des composés binaires semiconducteur  $InSb$ ,  $AlSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$  et d'autres résultats disponibles.

Pour les énergies de phonon optique longitudinal le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  est 3.9673%, et pour le composé binaire  $AlSb$  est 26.8560%.

Pour les énergies de phonon optique transversal le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire  $InSb$  est 2.5133%, et pour le composé binaire  $AlSb$  est 29.8019%.

Dans la figure IV-9, la variation de l'énergie de phonon optique longitudinale  $E_{LO}$  augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium, et l'effet du désordre compositionnel influe sur l'énergie de phonon optique longitudinale  $E_{LO}$ . Mais cette influence est moins importante pour des concentrations supérieures à  $x=0.8$  dans ce cas on peut le

négligé. Cet effet fait diminuer l'énergie de phonon optique longitudinale  $E_{LO}$  en allant du composé  $InSb(x=0)$  vers le composé  $AlSb(x=1)$ .

La figure IV-10, représente la variation d'énergie de phonon optique transversal  $E_{TO}$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

Dans cette figure, nous observons que la variation d'énergie de phonon optique transversal  $E_{TO}$  augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

On constate aussi, que l'effet du désordre fait diminuer l'énergie de phonon optique transversal  $E_{TO}$  allant du composé  $InSb(x=0)$  vers le composé  $AlSb(x=1)$ , mais cet effet est faible surtout pour les concentrations supérieures à  $x=0.9$  dans ce cas on peut le négliger.

La figure IV-11, représente la variation des énergies des phonons optiques transversale et longitudinale en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

On observe que la variation des énergies des phonons optiques longitudinales  $E_{LO}$  est au dessus de la variation des énergies des phonons optiques transversale  $E_{TO}$ .

L'interpolation quadratique de la variation des énergies des phonons optiques longitudinale  $E_{LO}$  et transversale  $E_{TO}$  ci-dessus est ajustée sous la forme suivante :

$$E_{LO/TO} = A + Bx + Cx(x-1) \quad (IV-22)$$

C: est le paramètre la courbure.

Leurs expressions analytiques sont comme suites :

$$E_{LO}(\text{meV}) = 22.233698 + 35.93998x - 4.5242x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (IV-23)$$

$$E_{LO}(\text{meV}) = 22.18008 + 32.42662x - 0.95284x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (IV-24)$$

$$E_{TO}(\text{meV}) = 21.2578 + 34.50838x - 4.30606x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (IV-25)$$

$$E_{TO}(\text{meV}) = 21.20698 + 31.10712x - 0.85093x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (IV-26)$$

On note que, les paramètres de courbure (Bowling) sont négatifs et ils augmentent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces augmentations sont considérables donc l'effet du désordre ne doit pas être négligé.

Tableau IV-6: Energies des phonons longitudinales et transversales pour les composés binaires AlSb et InSb et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Matériaux	Energies des phonons longitudinales $E_{LO}$ (meV)		Energies des phonons transversales $E_{TO}$ (meV)	
	Cal.	Autre	Cal.	Autre
InSb	22.71173	23.65 <sup>a</sup>	21.72002	22.28 <sup>a</sup>
$Al_{0.1}In_{0.9}Sb$	25.71444* 25.31389**		24.60006* 24.21355**	
$Al_{0.3}In_{0.7}Sb$	32.13490* 31.33170**		30.76472* 29.98893**	
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	39.35028* 38.20869**		37.70307* 36.59900**	
$Al_{0.7}In_{0.3}Sb$	45.40189* 44.78677**		43.52400* 42.92741**	
$Al_{0.9}In_{0.1}Sb$	50.78153* 50.34439**		48.69873* 48.27458**	
AlSb	53.48251	42.16 <sup>a</sup>	51.29773	39.52 <sup>a</sup>

\*Sans désordre

\*\* Avec désordre

(a) Réf.: [22]

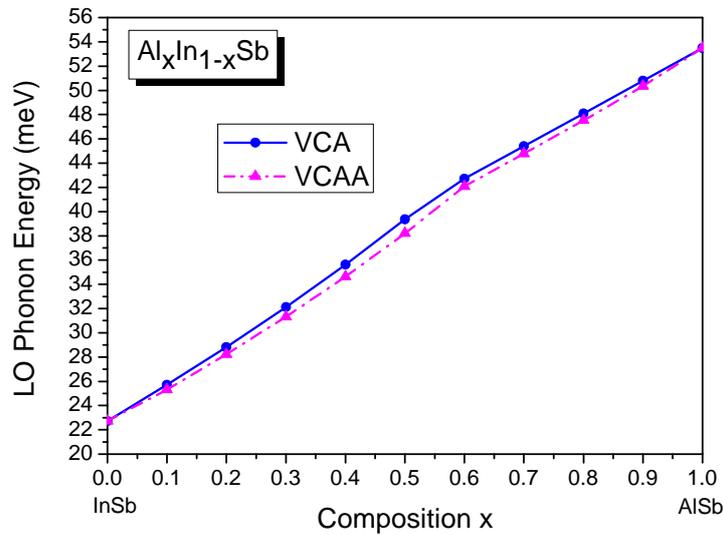


Figure IV-9: Variation de l'énergie de phonon optique longitudinale  $E_{LO}$  en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

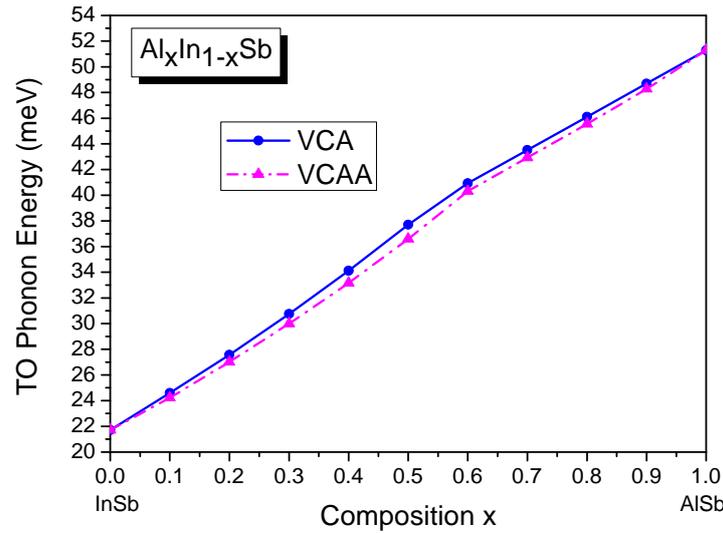


Figure IV-10: Variation de l'énergie de phonon optique transversale  $E_{TO}$  en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

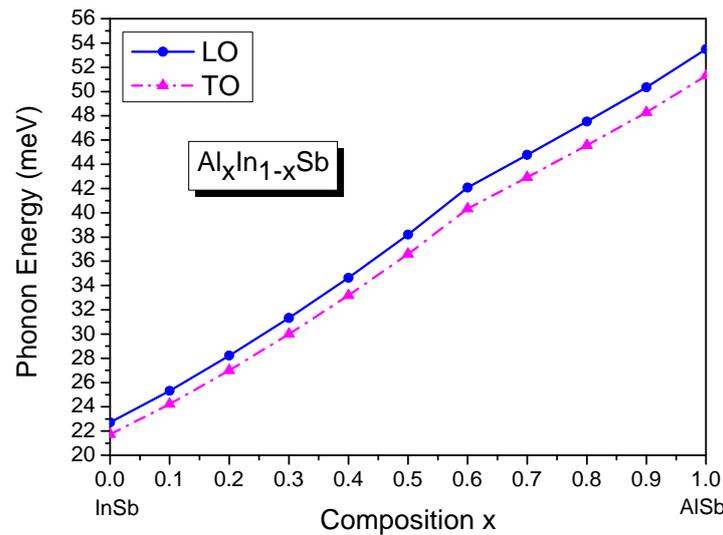


Figure IV-11: Variation des énergies des phonons optiques transversale et longitudinale en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

**IV-5-Les constantes élastiques:**

On utilise l'approche de Baranovski pour calculer les constantes élastiques et voir l'effet de la concentration  $x$  de l'Aluminium [7].

Le tableau IV-7, représente les constantes élastiques que nous avons calculées pour les deux composés binaire  $AlSb$ ,  $InSb$  et de leurs alliages ternaires  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

On fait la comparaison avec les résultats expérimentaux, nous avons trouvé que nos résultats sont en très bon accord avec d'autres travaux disponibles. On remarque aussi que l'effet du désordre

a une faible influence, il diminue un peu les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  pour les différentes concentrations  $x$  de l'Aluminium.

**Tableau IV-7:** Les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  en ( $10^{11}$  dyne/cm<sup>2</sup>) composés binaires *AlSb* et *InSb* et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Matériaux	Constantes élastiques ( $10^{11}$ dyne /cm <sup>2</sup> )								
	$C_{11}$			$C_{12}$			$C_{44}$		
	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres	Cal.	Exp.	Autres
InSb	6.76194	6.67 <sup>(a)</sup> 6.918 <sup>(b)</sup> 6.720 <sup>(c)</sup> 6.608 <sup>(d)</sup> 6.7 <sup>(k)</sup>	8.71 <sup>(e)</sup> 7.77 <sup>(e)</sup> 5.91 <sup>(e)</sup> 6.847 <sup>(f)</sup>	2.91536	3.65 <sup>(a)</sup> 3.788 <sup>(b)</sup> 3.670 <sup>(c)</sup> 3.531 <sup>(d)</sup> 3.7 <sup>(k)</sup>	4.76 <sup>(e)</sup> 2.72 <sup>(e)</sup> 2.53 <sup>(e)</sup> 3.735 <sup>(f)</sup>	2.73334	3.02 <sup>(a)</sup> 3.132 <sup>(b)</sup> 3.020 <sup>(c)</sup> 3.027 <sup>(d)</sup> 3 <sup>(k)</sup>	3.80 <sup>(e)</sup> 3.35 <sup>(e)</sup> 2.40 <sup>(e)</sup> 3.03 <sup>(h)</sup>
Al <sub>0,1</sub> In <sub>0,9</sub> Sb	6.94601* 6.94529**	-	-	2.99467* 2.99438**	-	-	2.80776* 2.80746**	-	-
Al <sub>0,3</sub> In <sub>0,7</sub> Sb	7.33217* 7.33111**	-	-	3.16106* 3.16063**	-	-	2.9639* 2.96346**	-	-
Al <sub>0,5</sub> In <sub>0,5</sub> Sb	7.74392* 7.74281**	-	7.723 <sup>(i)</sup>	3.33849* 3.33804**	-	3.33 <sup>(i)</sup>	3.13037* 3.12991**	-	3.572 <sup>(i)</sup>
Al <sub>0,7</sub> In <sub>0,3</sub> Sb	8.1833* 8.18232**	-	-	3.52783* 3.52742**	-	-	3.30802* 3.30761**	-	-
Al <sub>0,9</sub> In <sub>0,1</sub> Sb	8.65255* 8.65193**	-	-	3.73003* 3.72978**	-	-	3.49774* 3.49748**	-	-
AlSb	8.89912	8.769 <sup>(g)</sup> 8.94 <sup>(a)</sup> 8.769 <sup>(b)</sup> 8.939 <sup>(c)</sup> 8.769 <sup>(d)</sup> 8.9 <sup>(l)</sup>	9.87 <sup>(e)</sup> 9.84 <sup>(e)</sup> 9.17 <sup>(e)</sup> 8.088 <sup>(e)</sup> 8.769 <sup>(f)</sup>	3.83629	4.341 <sup>(g)</sup> 4.43 <sup>(a)</sup> 4.341 <sup>(b)</sup> 4.427 <sup>(c)</sup> 4.341 <sup>(d)</sup> 4.4 <sup>(l)</sup>	4.97 <sup>(e)</sup> 3.19 <sup>(e)</sup> 3.87 <sup>(e)</sup> 3.732 <sup>(e)</sup> 4.341 <sup>(f)</sup>	3.59743	4.076 <sup>(g)</sup> 4.16 <sup>(a)</sup> 4.076 <sup>(b)</sup> 4.155 <sup>(c)</sup> 4.076 <sup>(d)</sup> 4.2 <sup>(l)</sup>	4.45 <sup>(e)</sup> 4.30 <sup>(e)</sup> 3.74 <sup>(e)</sup> 4.20 <sup>(h)</sup> 3.903 <sup>(i)</sup>

\*Nos calculs sans désordre.

\*\*Nos calculs avec désordre.

<sup>(a)</sup>Ref. [27], <sup>(b)</sup>Ref. [21], <sup>(c)</sup>Ref. [18], <sup>(d)</sup>Ref. [28], <sup>(e)</sup>Ref. [29], <sup>(f)</sup>Ref. [23], <sup>(g)</sup>Ref. [22], <sup>(h)</sup>Ref. [14], <sup>(i)</sup>Ref. [30], <sup>(j)</sup>Ref. [31], <sup>(k)</sup>Ref.[32], <sup>(l)</sup>Ref. [33].

#### IV-6-Les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales :

Pour calculer les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales on a utilisé la formule (eq. III-25)

Le tableau IV-8, représenté les vitesses des ondes acoustique longitudinales et transversales que nous avons calculé pour les deux composés binaires *InSb* et *AlSb* et leur alliage ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

On fait la comparaison avec les résultats des autres travaux, nous avons trouvé que nos résultats sont en très bon accord avec d'autres travaux disponibles.

On remarque aussi que l'effet du désordre a une faible influence, il diminue un peu les vitesses dans les différentes directions pour les différentes concentrations  $x$  de l'Aluminium.

**Tableau IV-8:** Vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales pour les composés binaires  $AlSb$  et  $InSb$  et leurs alliages  $Al_xIn_{1-x}Sb$

Matériaux	g(g/cm <sup>3</sup> )	Vitesses du son (x 10 <sup>5</sup> cm/s)						
		V <sub>LA</sub> [100]	V <sub>TA1,2</sub> [100]	V <sub>LA</sub> [110]	V <sub>TA1</sub> [110]	V <sub>TA2</sub> [110]	V <sub>LA</sub> [111]	V <sub>TA1,2</sub> [111]
InSb	5.777	3.4213	2.3098	3.7029	1.8247	2.3098	3.7920	1.9995
		3.38 <sup>(a)</sup>	2.29 <sup>(a)</sup>	3.74 <sup>(a)</sup>	1.63 <sup>(a)</sup>	2.29 <sup>(a)</sup>	3.86 <sup>(a)</sup>	1.88 <sup>(a)</sup>
Al <sub>0,1</sub> In <sub>0,9</sub> Sb	5.627	3.5135*	2.3720*	3.8026*	1.8738*	2.3720*	3.8942*	2.0534*
		3.5133**	2.3719**	3.8024**	1.8737**	2.3719**	3.8940**	2.0533**
Al <sub>0,3</sub> In <sub>0,7</sub> Sb	5.327	3.7100*	2.5047*	4.0153*	1.9786*	2.5047*	4.1121*	2.1683*
		3.7097**	2.5046**	4.0151**	1.9785**	2.5046**	4.1118**	2.1681**
Al <sub>0,5</sub> In <sub>0,5</sub> Sb	5.027	3.9248*	2.6498*	4.2478*	2.0932*	2.6498*	4.3502*	2.2938*
		3.9245**	2.6496**	4.2475**	2.0931**	2.6496**	4.3499**	2.2936**
Al <sub>0,7</sub> In <sub>0,3</sub> Sb	4.727	4.1606*	2.8090*	4.5030*	2.2190*	2.8090*	4.6115*	2.4316*
		4.1604**	2.8089**	4.5028**	2.2189**	2.8089**	4.6113**	2.4315**
Al <sub>0,9</sub> In <sub>0,1</sub> Sb	4.427	4.4207*	2.9847*	4.7846*	2.3578*	2.9847*	4.8998*	2.5837*
		4.4205**	2.9846**	4.7844**	2.3577**	2.9846**	4.8997**	2.5836**
AlSb	4.278	4.5612	3.0795	4.9366	2.4327	3.0795	5.0555	2.6658
		4.53 <sup>(a)</sup>	3.09 <sup>(a)</sup>	4.99 <sup>(a)</sup>	2.28 <sup>(a)</sup>	3.09 <sup>(a)</sup>	5.13 <sup>(a)</sup>	2.57 <sup>(a)</sup>

\*Sans désordre

\*\* Avec désordre

<sup>(a)</sup>Ref. [22].

La figure IV-12 représente les variations de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  propagation dans la direction [100] en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium dans l'intervalle [0,1] avec et sans désordre.

La figure IV-13 représente les variations de la vitesse des ondes acoustiques transversale  $V_{TA1,2}$  propagation dans la direction [100] en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium dans l'intervalle [0,1] avec et sans désordre.

A partir de ces deux figures, nous notons que la variation de courbe de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  et vitesse des ondes acoustiques transversale  $V_{TA1,2}$  augmentent presque linéairement en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium en allant de  $InSb$  où ( $x=0$ ) vers  $AlSb$  où ( $x=1$ ) de l'alliage ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

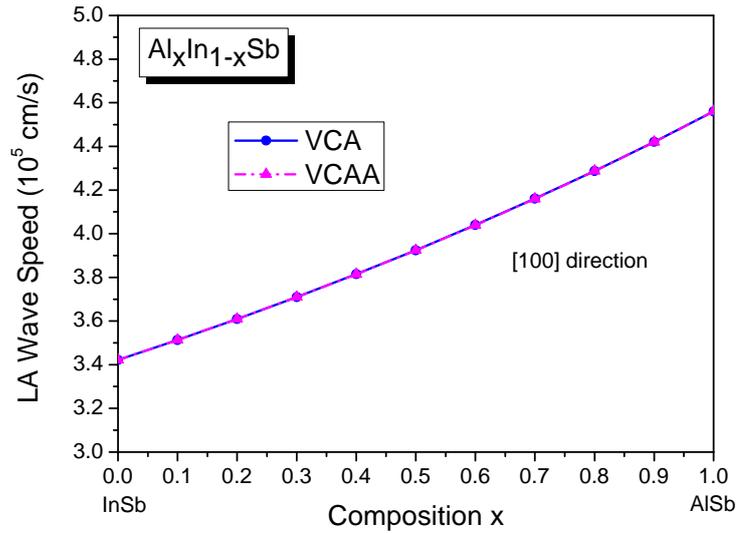


Figure IV-12: Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  propagation dans la direction [100] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

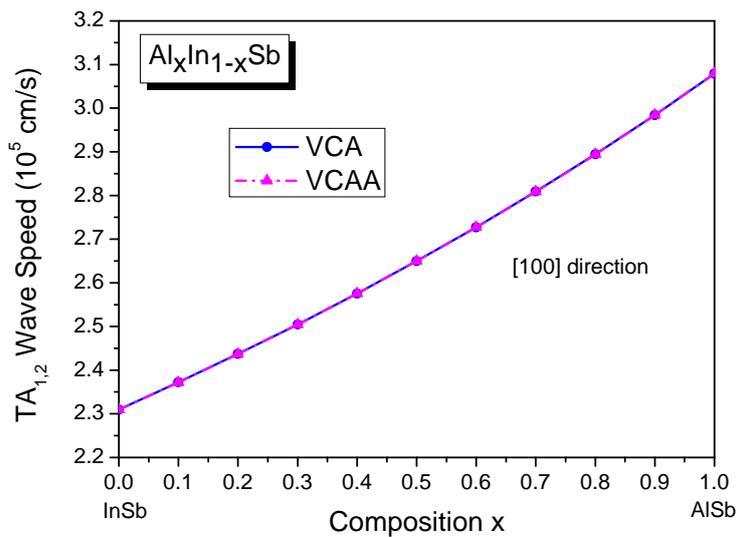


Figure IV-13: Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales  $V_{TA_{1,2}}$  propagation dans la direction [100] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Ces courbes sont interpolées par les équations suivantes :

$$V = A + Bx + Cx(x-1) \tag{IV-27}$$

C : est le paramètre de courbure

Les expressions analytiques sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$V_{LA}[100](10^5 \text{ cm/s}) = 3.4235 + 0.8696x + 0.2657x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-28})$$

$$V_{TA_{1,2}}[100](10^5 \text{ cm/s}) = 2.3113 + 0.5872x + 0.1794x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-29})$$

Avec désordre :

$$V_{LA}[100](10^5 \text{ cm/s}) = 3.4235 + 0.8685x + 0.2668x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-30})$$

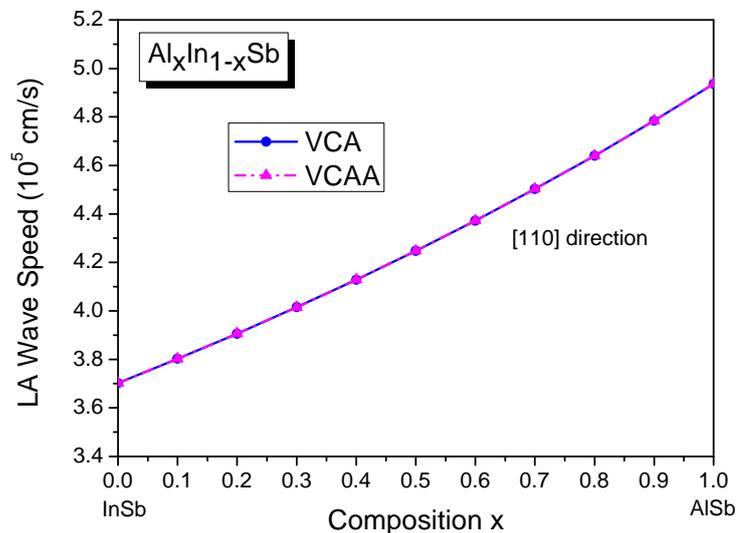
$$V_{TA_{1,2}}[100](10^5 \text{ cm/s}) = 2.3113 + 0.5864x + 0.1802x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-31})$$

D'après la comparaison entre ces équations dans les deux cas (VCA et VCAA), nous trouvons que l'effet du désordre affecte faiblement les termes quadratiques et il ne change pas les signes positifs, donc on peut dire que cet effet est presque négligeable dans tout l'intervalle [0,1] de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

Figures IV-14 – IV-16 représente la Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  transversales  $V_{TA_1}$  et  $V_{TA_2}$  propagation dans la direction [110] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

A partir de ces courbes, nous distinguons qu'il y a une augmentation presque linéaire de ces vitesses avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium.

Nous remarquons aussi que les valeurs de la vitesse pour le composé binaire  $AlSb$  est plus grande que celle du composé binaire  $InSb$ .



**Figure IV-14:** Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  propagation dans la direction [110] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

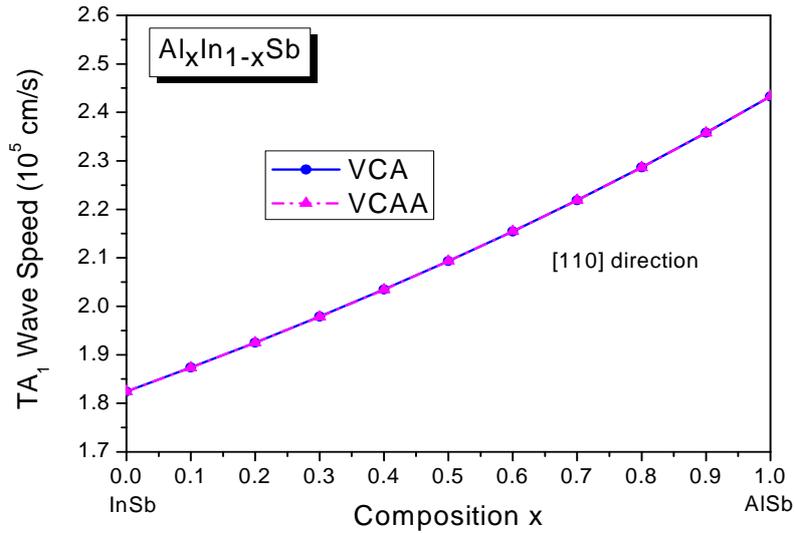


Figure IV-15: Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales  $V_{TA_1}$  propagation dans la direction [110] en fonction de la composition x de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_x In_{1-x} Sb$ .

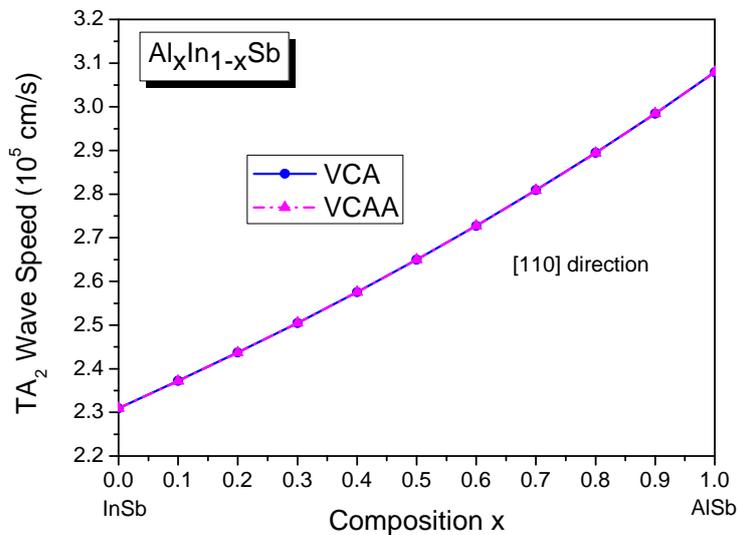


Figure IV-16: Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales  $V_{TA_2}$  propagation dans la direction [110] en fonction de la composition x de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_x In_{1-x} Sb$ .

Ces courbes sont interpolées par l'équation suivante :

$$V = A + Bx + Cx(x-1) \tag{IV-32}$$

C : est le paramètre de courbure.

Les expressions analytiques sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$V_{LA}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 3.7052 + 0.9411x + 0.2876x^2 \text{ (VCA)} \quad (\text{IV-33})$$

$$V_{TA1}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 1.8258 + 0.4639x + 0.1417x^2 \text{ (VCA)} \quad (\text{IV-34})$$

$$V_{TA2}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 2.3113 + 0.5872x + 0.1794x^2 \text{ (VCA)} \quad (\text{IV-35})$$

Avec désordre :

$$V_{LA}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 3.7052 + 0.94x + 0.2888x^2 \text{ (VCAA)} \quad (\text{IV-36})$$

$$V_{TA1}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 1.8258 + 0.4633x + 0.1423x^2 \text{ (VCAA)} \quad (\text{IV-37})$$

$$V_{TA2}[110](10^5 \text{ cm/s}) = 2.3113 + 0.5864x + 0.1802x^2 \text{ (VCAA)} \quad (\text{IV-38})$$

D'après ces équations dans les deux cas avec et sans désordre, on peut remarquer que l'effet du désordre affecte faiblement les paramètres de courbure et il ne change pas leurs signes positifs qui sont : 0.2879, 0.1417, 0.1794 dans le cas de VCA et 0.2888, 0.1423, 0.1802 dans le cas de VCAA. Donc l'effet du désordre sur les vitesses acoustique longitudinale et transversale est presque négligeable.

La Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  et transversales  $V_{TA1,2}$  propagation dans la direction [111] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$  sont présentées dans les figures IV-17 et IV-18 respectivement.

A partir des figures IV-17 et IV-18 qui représentent les variations des vitesses des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  et transversales  $V_{TA1,2}$  respectivement, avec et sans désordre de l'alliage ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$  en fonction de la concentration  $x$  de l'Aluminium, nous remarquons qu'il y a une augmentation presque linéaire de ces vitesses avec l'augmentation de la concentration  $x$  sur tout l'intervalle  $[0, 1]$  du composé  $InSb$  lorsque ( $x=0$ ) à le composé  $AlSb$  où ( $x=1$ ). Il y a aussi une autre remarque importante, qu'il y a une faible influence de l'effet de désordre sur les vitesses.

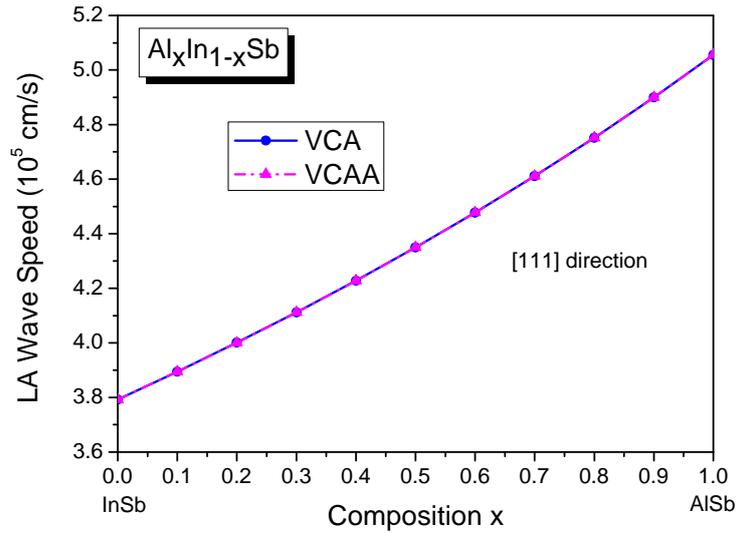


Figure IV-17: Variation de la vitesse des ondes acoustiques longitudinale  $V_{LA}$  propagation dans la direction [111] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$

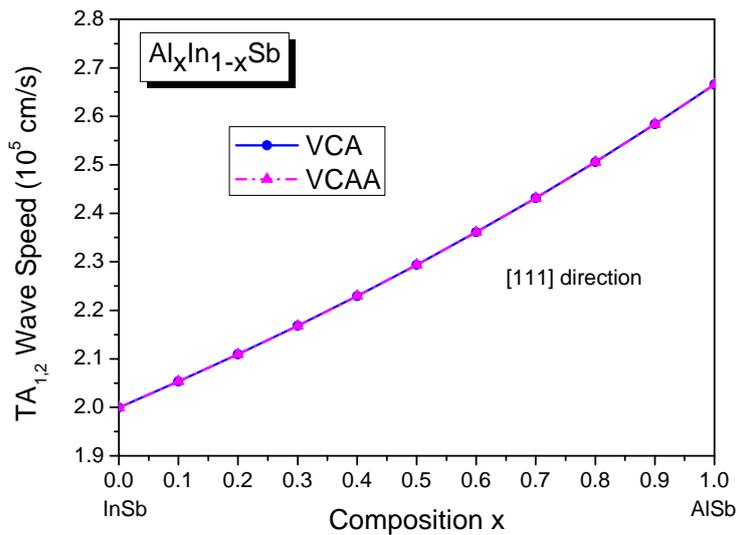


Figure IV-18: Variation de la vitesse des ondes acoustiques transversales  $V_{TA_{1,2}}$  propagation dans la direction [111] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Ces courbes sont interpolées par les équations suivantes :

$$V = A + Bx + Cx(x-1) \tag{IV-39}$$

C : est le paramètre de courbure.

Les expressions analytiques sont d'écrites comme suites:

Sans désordre :

$$V_{LA}[111](10^5 \text{ cm/s}) = 3.7945 + 0.9638x + 0.2945x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-40})$$

$$V_{TA1,2}[111](10^5 \text{ cm/s}) = 2.0008 + 0.5083x + 0.1553x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{IV-41})$$

Avec désordre :

$$V_{LA}[111](10^5 \text{ cm/s}) = 3.7945 + 0.9626x + 0.2957x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-42})$$

$$V_{TA1,2}[111](10^5 \text{ cm/s}) = 2.0008 + 0.5077x + 0.156x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{IV-43})$$

Les figures IV-19, IV-20 et IV-21 représentent la variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales propagation dans les directions [100], [110] et [111] en fonction de la composition x de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

Nous remarquons que l'augmentation de ces deux vitesses est presque linéaire avec l'augmentation de la concentration x de l'Aluminium, et aussi la vitesse d'onde acoustique transversal est moins élevée que celle de la vitesse d'onde acoustique longitudinale sur tout l'intervalle allons de  $x = 0$  jusqu'à  $x = 1$ .

On constate aussi que :

- les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales sont presque parallèle dans les directions [100] et [111], et les vitesses des ondes longitudinales  $V_L$  sont au dessus de les vitesses des ondes transversales  $V_{T1,2}$
- Presque la même constatation a été faite dans la direction [110]. Mais la vitesse des ondes acoustiques transversale  $V_{T2}$  est au dessus de la vitesse des ondes acoustiques transversale  $V_{T1}$ .
- La variation de la vitesse des ondes acoustique transversales est plus faible par rapport La variation de la vitesse des ondes acoustique longitudinales dans les trois directions.

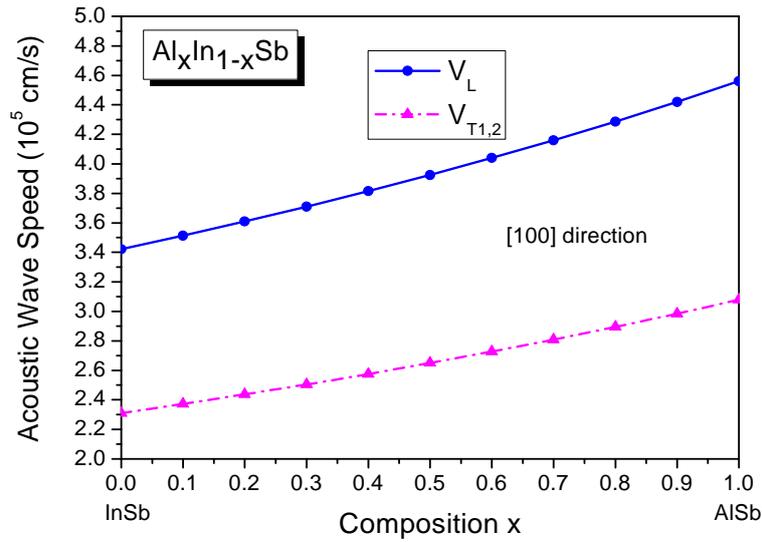


Figure IV-19: Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction [100] en fonction de la composition x de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

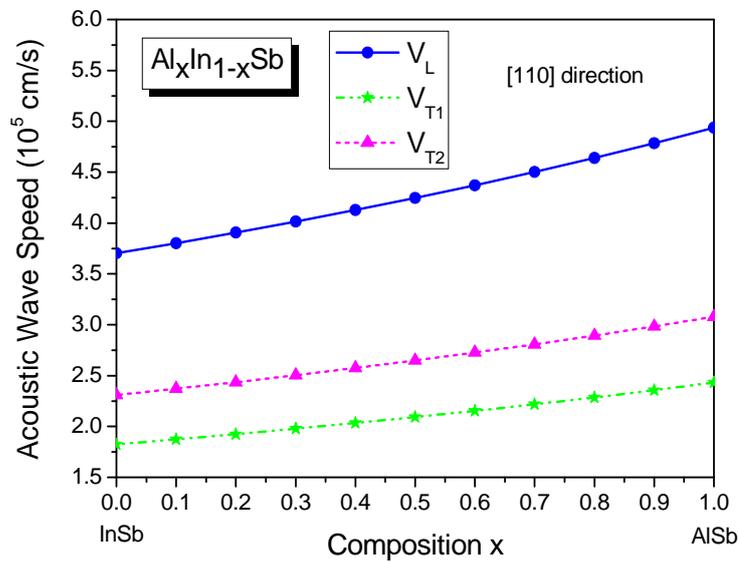
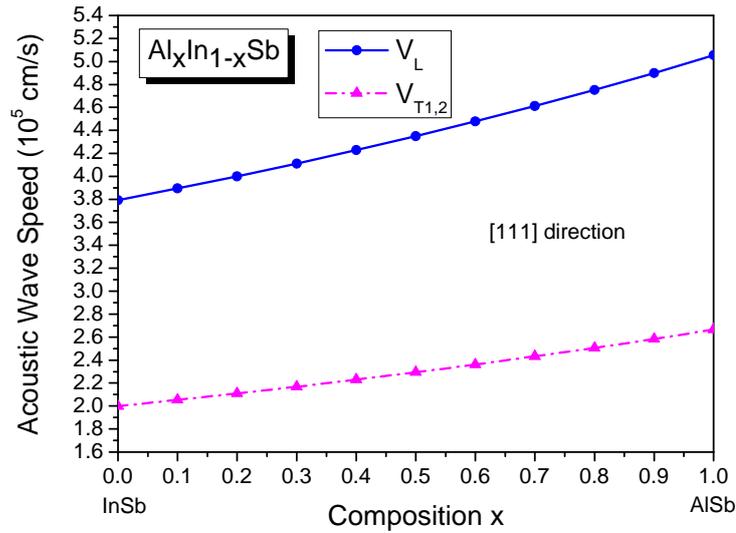


Figure IV-20: Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction [110] en fonction de la composition x de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .



**Figure IV-21:** Variation des vitesses des ondes acoustiques longitudinale et transversales propagation dans la direction [111] en fonction de la composition  $x$  de l'Aluminium pour l'alliage  $Al_xIn_{1-x}Sb$ .

#### Références :

- [1] M. Guden, J. Piprek, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **4**, 349 (1996).
- [2] E. F. Schubert, E. O. Gobel, Y. Horikoshi, K. Ploog, and H. J. Queisser, *Phys. Rev. B* **30**, 813 (1984).
- [3] G. J. Ackland, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 483 (2001).
- [4] F. Benmakhlouf, thèse de doctorat d'état, université de Constantine, (Algérie), 2006.
- [5] N. Richard, Rapport CEA-R-6603 Actinides et terres rares sous pression: approche pseudopotentiel CEA/DAM. Direction Ile de France, 2002.
- [6] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu, R.J. Needs, *Phys. Stat. Sol. B* **211**, 345 (1999).
- [7] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci., Tohoku. Univ.* **2**, 7 (1993).
- [8] J.M. Baranowski, *J. Phys. C* **17**, 6287 (1984).
- [9] S. Adachi, *Properties of semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons (2009).
- [10] S. Adachi, *III-V Ternary and Quaternary Compounds*, in *Springer handbook of electronic and photonic material*, S. Kasap, P. Capper (Eds.) Springer Science, 2006.
- [11] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 (Algérie), 2010.
- [12] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.V.R. Rao, *Infrared Phys* **34**, 103 (1993).

- [13] 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 (2008).
- [14] R. R. Reddy, K. Rama Gopal, K. Narasimhulu, L. Siva Sankara Reddy, K. Raghavendra Kumar, G. Balakrishnaiah, M. Ravi Kumar, *Journal of Alloys and Compounds* **473**, 28 (2009).
- [15] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu and C. L. N. Sarma, *J. Phys. Chm. Solids* **54**, 635 (1993).
- [16] M. A. Salem, *Chinese J. Phys.* **41**, 288 (2003).
- [17] V. Kumar, J. K. Singh, *Indian J. Pure & Appl. Phys*, **48**, 571 (2010).
- [18] Marvin J- Weber, "Hand book of optical Materials ", *CRC Press LLC 2003*.
- [19] R. R. Reddy, Y. N. Ahammed, P. A. Azeem, K. R. Gopal, B. Sasikaladevi, T. V. R. Rao, *Def. Sci. J.* **53**, 239 (2003).
- [20] A. S. Verma, Naresh Pal, B. K. Sarkar, R Bhandari and V. K. Jindal, *Phys. Scr.* **85**, 15705 (2012).
- [21] O. Madelung, ebook-"Semiconductors: Data Handbook", 3rd edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [22] S. Adachi, "Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors", John Wiley & Sons Ltd, 2005.
- [23] J. Piprek, "Semiconductor Optoelectronic Devices". *Elsevier Science*, 2003.
- [24] U. K. Mishra and J. Singh, *Semiconductor Device Physics and Design*, Springer, 2008.
- [25] J. Bennetto and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **53** 15417(1996).
- [26] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol. 1, World Scientific, 1999.
- [27] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, New York, 1980.
- [28] S. Kasap, P. Capper, "Spring Hand book of electronic and photonic materials, *spring science, Inc.* 2006.
- [29] Jiajin Tan, Ying Li, Guangfu Ji, *Computational Materials Science* **58**, 243 (2012).
- [30] Gokhan Gokoglu, *Journal of Alloys and Compounds* **478**, 653 (2009).
- [31] Paresh S. Vyas, thèse de doctorat, université de Sardar Patel, Gujarat, (India) 2012.
- [32] S. Muramatsu, M. Kitamura, *J. Appl. Phys.* **73**, 4270 (1993).
- [33] S. Q. Wang, H. Q. Ye, *Phys. Status Solidi (b)* **240**, 45 (2003).

# *Conclusion générale*

**Conclusion générale :**

L'objectif de ce travail est d'étudier quelques propriétés optiques, diélectriques et dynamique du réseau de l'alliage ternaire  $Al_xIn_{1-x}Sb$ . Nous avons calculé : le gap d'énergie fondamental  $E_g$ , l'indice de réfraction  $n$ , la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$ , la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$ , la charge effective transversale  $e_T^*$ , les fréquences optiques des phonons longitudinales  $\nu_{LO}$  et transversal  $\nu_{TO}$ , les énergies optiques des phonons longitudinales  $E_{LO}$  et transversales  $E_{TO}$  et les vitesses des ondes acoustique longitudinales  $V_{LO}$  et transversales  $V_{TO}$ , propagation dans les direction suivantes [100], [110] et [111]. Nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel empirique locale (E.P.M), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) sans et avec tenir compte l'effet du désordre compositionnel et combinées avec le modèle des orbitales liées de Harrison (bond-orbital model).

Dans nos résultats, nous avons trouvé que le gap d'énergie fondamental  $E_g$  augmente 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  $\epsilon_\infty$  et la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  diminuent non linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium. Pour les propriétés vibrationnelles nous avons trouvé que les fréquences optiques des phonons longitudinales  $\nu_{LO}$  et transversales  $\nu_{TO}$ , et les énergies optiques des phonons augmentent presque linéairement avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'Aluminium et pour les vitesses des ondes acoustique longitudinales  $V_{LO}$  et transversales  $V_{TO}$  augmentent aussi presque linéairement, propagation dans les différents directions [100], [110] et [111].

Nous avons noté que l'effet du désordre fait diminuer le gap d'énergie fondamental  $E_g$ , les fréquences optiques des phonons longitudinales, transversales et les énergies des phonons optiques transversale et longitudinale par contre il fait augmenter l'indice de réfraction  $n$ , la constante diélectrique à haute fréquence  $\epsilon_\infty$ , la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$  en allant du composé  $InSb$  ( $x=0$ ) vers le composé  $AlSb$  ( $x=1$ ). Mais cet effet est moins important pour les concentrations supérieures à  $x=0.6$ , donc on peut le négligé. Pour les vitesses des ondes acoustiques longitudinales et transversales, nous avons remarqué que l'effet du désordre est plus faible pour les concentrations  $x$  de l'Aluminium, donc on peut le négligé.

Nous avons calculé le paramètre de courbure  $c$  en utilisant le paramètre du désordre, et nous avons trouvé que les paramètres de courbures (Bowling) pour  $n, \epsilon_\infty, \epsilon_0$  et les vitesses des ondes

acoustique sont positifs et ils diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre. Mais pour les fréquences optiques des phonons et les énergies des phonons, les paramètres de courbures (Bowing) sont négatifs et ils augmentent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre.

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