



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

جامعة تيبستي
FSES NV



كلية العلوم الدقيقة والعلوم الطبيعية والحياة
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES
ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

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 propriétés optiques et diélectriques
des composés semiconducteurs MgTe, ZnTe
et leurs alliages**

Présenté par:

Mahmoud Slimani et Seif-Eddine Abidi



Devant le jury:

Toufik Ziar	MCA	Univ. Tébessa	Président
Fella Benmakhlouf	Professeur	Univ. Tébessa	Rapporteur
Yassine Chaouche	MCA	Univ. Tébessa	Examineur

Soutenue le mardi 22 / 06 / 2021 à 15^h:30



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat
(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom: **Slimani Mahmoud** & **Abidi Seif-Eddine**

N° de carte d'étudiant: (1) **161634036343** (2) **M20124016571**

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

Année universitaire: **2020/2021**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: **Physique des matériaux**

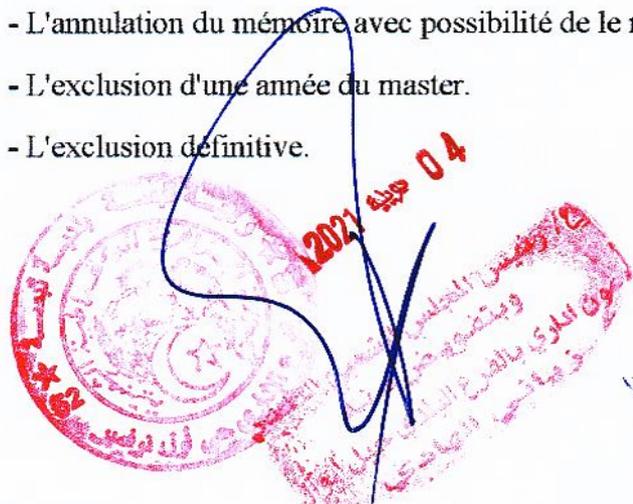
Intitulé du mémoire: **Calcul des propriétés optiques et diélectriques des composés
semiconducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages**

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'exclusion définitive.



Fait à Tébessa, le: 04 juillet 2021

Signature des étudiants (es):

(1):

(2):

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة تأثير المغنيزيوم على الخصائص الضوئية و خصائص العزل الكهربائي على المركبات الثنائية $MgTe$ و $ZnTe$ وسبائكها الثلاثية $Mg_xZn_{1-x}Te$ ذات بنية زنك- بلاند و ذلك باعتبار وإهمال العشوائية التركيبية.

لدراسة هذا النوع من السبائك الثلاثية تم استعمال طريقة شبه الكمون التجريبية الموضعية (EPM) المقترنة مع تقريب البلورة الافتراضية (VCA) بأخذ وعدم أخذ العشوائية التركيبية بعين الاعتبار، و بإشراك نموذج Harrison للمدارات المرتبطة (BOM).

قمنا بحساب قرينة الانكسار n ، ثابت العزل الكهربائي ذات التردد العالي ϵ_{∞} و ثابت العزل الكهربائي السناتيكي ϵ_0 .

درسنا تأثير المغنيزيوم x على الخصائص الضوئية و خصائص العزل الكهربائي للسبيكة الثلاثية $Mg_xZn_{1-x}Te$ في حالة وجود عشوائية وعدم وجودها على المجال [1-0].

عموما حساباتنا متوافقة مع نتائج الطرق الأخرى النظرية و التجريبية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية: $MgTe$ ، $ZnTe$ ، أنصاف النواقل (II-VI)، شبه الكمون، تقريب البلورة الافتراضية، قرينة الانكسار، ثوابت العزل الكهربائي.

Abstract:

The aim of this work is to study the Magnesium effect on the optical and dielectric properties of binary compounds $ZnTe$, $MgTe$ and ternary alloys $Mg_xZn_{1-x}Te$, crystallizing in the zinc-blende structure with and without the disorder effect.

To investigate this type of alloy, we use the empirical pseudo potential method (*EPM*) where the local potential coupled to the virtual crystal approximation (*VCA*) with and without considering the effect of disorder, and associated with bond-orbital model of Harrison (*BOM*).

We calculated the refractive index n , the high frequency dielectric constant ϵ_∞ and the static dielectric constant ϵ_0 .

We have studied the dépendance of the Magnésiums concentration x on the optical and dielectric properties of the ternary alloy $Mg_xZn_{1-x}Te$, in case of présence of the disorder or not over the whole range of the composition [0-1].

Generally our results are in good agreement with the available theoretical and experimental results.

Key words: $MgTe$, $ZnTe$, semi-conducteurs (*II-VI*), pseudo potential, virtual crystal approximation, refractive index, dielectric constants.

Résumé :

Le but de ce travail est d'étudier l'influence de Magnésium sur les propriétés optiques et diélectriques des composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ et leurs alliages ternaires $Mg_x Zn_{1-x}Te$, cristallisée dans la structure zinc-blende avec et sans tenir compte de l'effet du désordre.

Pour étudier ce type d'alliage, nous avons utilisé la méthode de pseudopotentiel empirique (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA), qui contient l'effet du désordre comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM).

Nous avons calculé l'indice de réfraction n , la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 .

Nous avons étudié la dépendance de la concentration x de Magnésium sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire $Mg_x Zn_{1-x}Te$ en cas de présence du désordre ou non sur toute la gamme de la composition [0-1].

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

Mots-clés : MgTe, ZnTe, semiconducteurs (II-VI), pseudo potentiel, approximation du cristal virtuel, indice de réfraction, constants diélectriques.



Remerciements

Louange à notre créateur qui nous a incité à acquérir le savoir, c'est à lui que nous adressons toute nos gratitudee en premier lieu.

nous tenons tout d'abord à remercier notre encadreur, Docteur **Fella Benmakhlouf**, Professeur à l'Université de Tébessa, pour nous avoir proposé ce thème de recherche et pour nous avoir dirigé ce mémoire, ses idées, ses conseils, la clarté de ses explications, sa patience, et pour nous avoir fait bénéficier de ces compétences

, d'avoir accepté d'examiner ce travail et de faire scientifique.

Nous sommes très reconnaissants au Docteur **Toufik Ziar** Maître de conférences A à l'université de Tébessa pour avoir accepté de présider ce jury.

Nos remerciements sincèrement au Docteur **Yassine Chaouche** Maître de conférences A à l'université de Tébessa pour avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Nous exprimons nos vives reconnaissances aux Docteur **Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'Université de Tébessa, **Faouzi Hanini** Maître de conférences A à l'université de Tébessa et **Abdelkader Hafdallah** Maître de conférences A à l'université de Tébessa pour l'aide précieuse qu'ils n'ont cessé de nous apporter tout au long de ce travail à travers ces conseils et leur soutien.



DEDICACE

A la mémoire de ma grande mère

A ceux sans lesquels je n'aurais jamais été ce que je suis...

A ceux qui m'ont encouragé et poussé à arriver au bout du chemin...

Je dédie cet humble travail à ceux qui me sont les plus chers au monde ...

Mes parents,

A mes chers frères, à mes chères sœurs, à mes beaux oncles et ses familles,

A toute famille SLIMANI

A tous mes chères collègues.

A ceux qui ont été à mes cotés dans les moments difficiles.

Slimani Mahmoud



شكر وتقدير

الحمد لله الذي أنار لنا درب العلم والمعرفة وأعاننا على أداء هذا الواجب ووفقنا إلى هذا العمل.

لا يسعنا بعد الإنتهاء من إعداد هذه المذكرة إلا أن نتقدم بجزيل الشكر وعظيم الامتنان إلى أستاذتنا الفاضلة "الدكتورة بن مخلوف فلة"

التي تفضلت بالإشراف على هذه المذكرة، حيث قدمت لنا كل النصح والإرشاد طيلة فترة البحث فلها منا كل الشكر والتقدير.

كما لا يفوتنا أن نتقدم بجزيل الشكر والعرفان إلى كل من مد يد المساعدة من قريب أو من بعيد ولو بكلمة طيبة.

الحمد لله على التخرج



إهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

إلهي لا يطيب الليل إلا بشكرك ولا يطيب النهار إلا بطاعتك ولا تطيب

اللحظات إلا بذكرك ولا تطيب الآخرة إلا بعفوك

ولا الجنة إلا برويتك .

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة ونصح الأمة إلى نبي الرحمة ونور العالمين

محمد عليه أعظم الصلاة وأتم التسليم.

إلى من أحمل اسمه بكل فخر وامتنان وعلمي معنى الصبر والسلوان والدي

"سعد" حفظه الله

إلى كل من في الوجود بعد الله ورسوله وينبوع الأمل والتفاؤل والحنان والدي

الغالية "الطائوس جمل" حفظها الله

إلى من علموني علم الحياة وأظهروا لي ما هو أجمل في الحياة

إخوتي "عايدة ، سناء ، حكيمة، رندة ، فؤاد"

إلى من قسمت معي أجمل اللحظات وسجّلت باقة من الذكريات

رفيقي طيلة فترة البحث "سليمان محمد"

إلى خير الأصحاب سفيان داهش

إلى كل من وسعهم قلبي ولم تسعهم ورقتي

جزاكم الله خيرا

«محبكم سيف الدين»

Sommaire

Sommaire

المخلص

Abstract

Résumé

Remerciements

Dédicace

Sommaire

Liste des tableaux.....	<i>i</i>
Table des figures	<i>ii</i>
Liste des symboles	<i>iv</i>

Introduction générale

Introduction générale	1
Références.....	3

Chapitre I

La méthode de pseudo potentiel

Introduction	4
I- 1. Définition.....	4
I-1-a- Qu'est ce qu'un pseudo potentiel ?.....	4
I-1-b-Du potentiel au pseudo potentiel	5
I-2- La méthode de pseudo potentiel	6
I-3- Formalisme mathématique	7
I-4- Caractéristique du pseudo potentiel	8
I-5- Les modèles du pseudo potentiel	9
I-5-1-Le modèle local	9
I-5-1-a- modèle de Heine et Abarenkov.....	9
I-5-1-b- modèle d'Aschkroft	9
I-5-2-Le modèle non local	10
I-5-2-1-La fonction de Heine Abarenkov	10
I-5-2-2-Le modèle de Gauss	11
I-5-2-3-La fonction d'Aschkroft	11
I-6- la méthode empirique de pseudo potentiel (E.P.M)	12
I-7- la méthode de calcul du (E.P.M)	13
I-8- Approximation du cristal virtuel (V.C.A)	14
I-9-Approximation du cristal virtuel amélioré (VCAA)	15

Références	18
Chapitre II	
Les propriétés optiques et diélectriques	
II-1 Introduction	20
II.2. Interaction rayonnement - matière	20
II.2.1. Photons et électrons.....	20
a- Photon	20
b-électron	23
II.3.La réflexion des ondes planes.....	24
II.4. Interaction électron - photon (Transition radiative)	26
II-5- Bande interdite (gap énergétique)	26
II-5-1 Gap direct et gap indirect	27
II-5-1-a Les semi-conducteurs à gap direct	27
II-5-1-b Les semi-conducteurs à gap indirect	27
II-6 Propriétés diélectriques	28
II- 7 L'indice de réfraction.....	30
A : La formule de moss	30
B : L'expression proposée par Ravindra et ses collaborations	31
C : La relation empirique de Heine et Vandamme.....	31
II-8-1 calcul de la constante diélectrique	31
II-8-2 L'expression proposée par Adachi	32
Références.....	33
Chapitre III	
Résultats et discussion	
III-1-Introduction.....	35
III-2- Etude des gaps énergétiques	37
III-3- Etude des propriétés optiques et diélectriques.....	38
III-3- 1 L'indice de réfraction.....	38
III-3- 2 Les constants diélectriques.....	43
III-3- 2 -1-La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞}	43
III-3-2-2- La constante diélectrique statique ϵ_0	47
Références.....	53
Conclusion générale	54

Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
Tableau III-1	<i>Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi conducteurs MgTe et ZnTe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en ($Å^\circ$).</i>	36
Tableau III-2	<i>Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ pour les concentrations $x= 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0.</i>	37
Tableau III-3	<i>L'indice de réfraction n calculé par les différentes relations et les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semi-conducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.</i>	40
Tableau III-4	<i>La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculée avec les différentes relations des composés binaires semiconducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.</i>	44
Tableau III-5	<i>La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.</i>	48

Liste des figures

Chapitre I

Figure	Titre	Page
Figure I-1	Illustration schématisée le potentiel de tout-électron (lignes continues) et pseudo-électron (lignes discontinues) et leurs fonctions d'ondes correspondantes.	5
Figure I-2	Schémas représentant : (à gauche) un potentiel (AE), les fonctions d'ondes de l'état s et p correspondantes ; (à droite) les pseudopotentiels correspondant à chaque état ainsi que les pseudo-fonctions d'ondes respectives.	6
Figure I-3	La fonction de Heine Abarenkov.	10
Figure I-4	La fonction de Gauss.	11
Figure I-5	La fonction d'Aschkroft.	11
Figure I-6	Organigramme de la procédure de calcul par E.P.M.	14

Chapitre II

Figure	Titre	Page
Figure II-1	Courbe de dispersion, a) photons dans le vide et dans le semi-conducteur, b) électrons dans le vide, c) électrons dans un semi-conducteur à gap direct, d) électrons dans un semi-conducteurs à gap indirect.	23
Figure II-2	Les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semi-conducteur.	26
Figure II-3	Gap direct et gap indirect.	27

Chapitre III

Figure	Titre	Page
Figure III-1	la variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	37
Figure III-2	La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculé par les différentes relations.	41
Figure III-3	Comparaison de la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculé avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.	42
Figure III-4	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations.	45

Figure III-5	<i>Comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ε_{∞} en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.</i>	46
Figure III-6	<i>La variation de la constante diélectrique statique ε_0 en fonction de la concentration de Magnésium, calculée par les différentes relations.</i>	49
Figure III-7	<i>Comparaison de la variation de la constante diélectrique statique ε_0 en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.</i>	50
Figure III-8	<i>La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ε_{∞} et la constante diélectrique statique ε_0 en fonction de concentration x de Magnésium, calculées par les différentes relations avec désordre de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.</i>	51

Liste des symboles

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

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

Introduction générale

Introduction générale

Les alliages ternaires des composés semi-conducteur II-VI sont considérés comme une classe importante de matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre de réseau, leurs 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 [1].

Les semi-conducteurs composés II-VI sont connus pour leurs larges fentes de bande directe et pour leurs propriétés optiques et électriques. Cela en fait une importante classe de matériaux et des candidats concurrents pour le silicium et d'autres matériaux dans la conversion photovoltaïque et les applications optoélectroniques [2].

Ici le travail de notre mémoire est consacré à l'étude d'un alliage ternaire semi-conducteur de type II-VI de la forme $A_xB_{1-x}C$. Ces types des alliages sont miscibles entre eux en toute proportion.

Notre alliage d'intérêt est $Mg_xZn_{1-x}Te$. Ces composés binaires sont $ZnTe$ et $MgTe$.

$ZnTe$ a été d'un grand intérêt en raison de son faible coût et son meilleur coefficient d'absorption optique [2].

Le tellure de zinc ($ZnTe$) est un candidat favorable pour des technologies optiques telles que les dispositifs luminescents. Dans le visible et le proche de l'UV, les mémoires optiques de haute densité, les conducteurs transparents, les photo-détecteurs et les cellules solaires [3,4]. Le tellure de zinc a une bande interdite directe de 2,21 à 2,26 eV à température ambiante. Il est utilisé comme substrat pour la croissance de $CdTe$ et les hétéro-structures basées sur $ZnTe$ et $MgTe$ est utilisé pour l'optique infrarouge.

Lorsqu'il est dopé au vanadium, $ZnTe$ devient un matériau semi-conducteur photo réfractif et a de bonnes applications potentielles pour la limitation de puissance optique. Aussi, il a été étudié pour ses utilisations comme laser à semi-conducteur à émission de lumière visible [5]. Il contient des excellentes caractéristiques, compris une grande écart d'énergie, une faible résistivité et une grande transparence de la gamme visible, il est utilisé dans divers dispositifs microélectroniques et optoélectroniques, et il a été largement étudié pour les applications dans la diode électroluminescente verte [6].

Alors que, le $MgTe$ présente des trous à large bande et de faibles constantes diélectriques, ils conviennent à l'optique dans le rayonnement UV-bleu [7,8], et a également été observé son potentiel d'émission de lumière dans un état solide très efficace [9,10].

Les alliages ternaires $A_xB_{1-x}C$ sont utilisés pour différentes applications optoélectroniques grâce à l'ajustement de leur paramètre de réseau, gap énergétique, indice de réfraction, les constantes diélectriques et d'autres paramètres physiques [11].

Il existe plusieurs méthodes théoriques pour l'étude des propriétés physiques de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$, dans nos calculs nous avons utilisé la méthode du pseudo-potentiel empirique [EPM] couplée avec la méthode du cristal virtuel (V.C.A) qui inclut l'effet de désordre compositionnel comme un potentiel effectif, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM).

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

Le premier chapitre présente la méthode de pseudo-potentiel empirique (E.P.M), le deuxième chapitre regroupe une étude théorique sur les propriétés optiques et diélectriques de l'alliage ternaire, le troisième chapitre est consacré à l'interprétation des résultats obtenus et la comparaison avec d'autres calculs.

Référence:

- [1] O. Madelung, Semiconductors-Basic Data, Ed. Spring, Berlin, (2004).
- [2] S. jeetendra , H . Nagabhushana ,K.D Mrudula, C.S. Naveen ,P.Raghu ,H.M.Mahesh ,
Int . J .Electrochem .Sci, **9** ,(2014), 2944.
- [3] D. Lee.J.Zucker,M.D.Divino,R.F.Austin,R.D.Feldman,K.L.Jones et
A.M.Johnson,Appl.Phys.Lett, **59** ,(1991), 1867.
- [4] S.Valette,G.Labrunie ,J. C Deutch,J. Lizet,Appl.Opt.,(1977),16,1289.
- [5]R.Amutha,A.Subbarayan,R.Sathyamoorthy,K.Natarajan .S.Velumani,J.NewMat.Electrochem.sys
tems. (2007),10,27.
- [6]W.A.Syed,S.Ahmed,,M.S.Saleem ,N.A.Sah,Chalcogenide letters, **12** (2015), 215.
- [7] L. Konczenwicz, P. Bigenwal, T. Cloitre, M. Chibane, R. Ricou, P. Testuo, O. Briot, R.L.
Aulombard, J. Cryst. Growth **159**, (1996), 117.
- [8] H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto, J. Cryst. Growth **117**, (1992) ,139.
- [9] M. W. Wang, M. C. Phillips, J. F. Swenberg, E. T. Yu, J. O. McCaldin, T. C. McGill, Appl.
Phys. Lett., Vol. **73**, (1993), 4660.
- [10] M. W. Wang, M. C. Phillips, J. F. Swenberg, E. T. Yu, J. O. McCaldin, R. W. Grant, T. C.
McGill, Appl. Phys. Lett., Vol. **64**, (1994) ,3445.
- [11] N. Bouarissa, matter. Chem. Phys. **72** ,(2001), 387.

Chapitre I

la méthode de pseudo potentiel

Chapitre I

La méthode de pseudo potentiel

Introduction :

La méthode de pseudo potentiel est basée sur l'hypothèse que les propriétés physiques et chimiques des matériaux dépendent essentiellement des électrons de valence, tandis que les électrons de cœur peuvent être considérés comme étant gelés dans leurs configurations atomiques [1]. Elle consiste ainsi à ne traiter explicitement que les électrons de valence, qui se déplacent alors dans un potentiel externe effectif produit par ces cœurs ioniques immobiles appelé :Pseudo potentiel .

Cette méthode est introduite pour simplifier les calculs, cependant uniquement les électrons de valence qui seront choisis, cette approximation est bien justifiée du fait que les orbitales de cœur ont une énergie plus basse et localisées près du noyau, elles sont peu sensibles à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. Par ailleurs, elles sont difficiles à représenter sur une base car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour du noyau. En revanche, les orbitales de valence sont peu localisées et s'étendent loin du noyau, ainsi elles déterminent au premier ordre les propriétés physiques et chimiques. L'idée de base proposée par Fermi et alors la simplification des calculs des structures électroniques par élimination des états de cœur, L'effet des électrons de cœur sera remplacé par un pseudo potentiel effectif. Ce qui revient à remplacer un potentiel externe électrons-noyaux par un potentiel plus faible traduisant l'écrantage par les électrons de cœur [2].

Dans ce chapitre, nous allons traiter l'idée de base qui a été proposée par Fermi et étudiée dans l'élément de la théorie du pseudo potentiel.

I-1-Définition :

La méthode pseudo potentielle est une véritable révolution dans la théorie des structures de bande [3], c'est une technique de calcul plus rapide, plus précise qui permet d'obtenir et simplifier les calculs de la structure électronique et les propriétés de nombreux solides [4].

I-1-a- Qu'est ce qu'un pseudo potentiel ?

Les électrons de valence sont les seuls électrons, qui interfèrent dans les liaisons chimiques dans les molécules et les composés solides. Les électrons du cœur se trouvent au niveau des couches internes près du noyau.

Il n'est pas effectué par l'environnement car elles peuvent être représentées sur la base de l'onde plane et elles ont généralement de fortes oscillations autour du noyau, ici, nous pouvons donc combiner les électrons du cœur avec le noyau pour former des ions solides (rigides). Son état électronique ne changera par quelque soit, l'environnement dans lequel l'atome sera placé. C'est ce qu'on appelle l'approximation du cœur gelé [1].

L'interaction des électrons de valence avec l'ensemble (le noyau et les électrons du noyau) peut également être remplacée par un potentiel qui ne produit pas le noyau avec tous les électrons. C'est ce potentiel effectif qu'on appelle un pseudo potentiel, voir la figure (I-1).

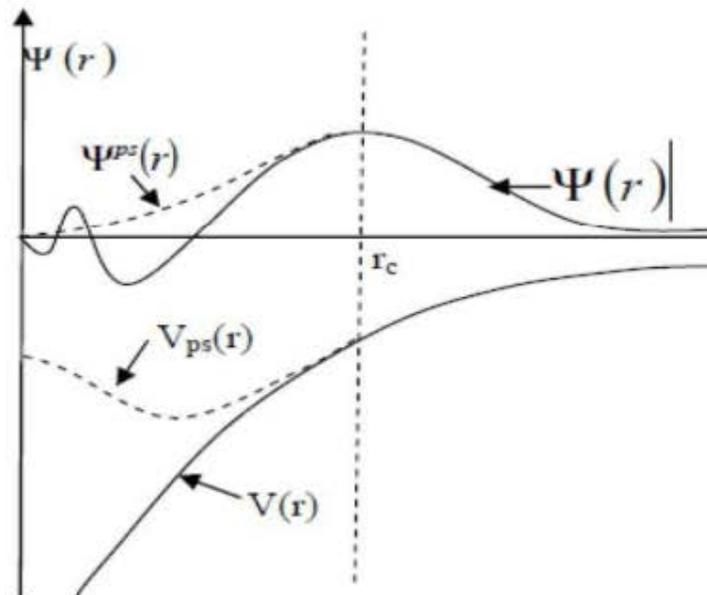


Figure I-1: Illustration schématisant le potentiel de tout-électron (lignes continues) et pseudo-électron (lignes discontinues) et leurs fonctions d'ondes correspondantes [5].

I-1-b-Du potentiel au pseudo potentiel :

La figure (I-2) montre un potentiel, une fonction d'onde de valence en plus, le pseudo potentiel correspondant associé aux fonctions de pseudo-ondes. Le pseudo potentiel est toujours idéalement construit. C'est à dire que les propriétés de diffusion ou les déphasages pour la fonction de pseudo-onde sont identiques aux propriétés de diffusion de l'ion et des électrons du cœur pour les fonctions d'onde de valence. Pour que les fonctions de pseudo-onde ne contiennent pas de nœuds radiaux dans la région du cœur, chaque nœud a ses propres fonctions de parité.

Dans la région du cœur, le déphasage total produit par l'ion aussi les électrons du cœur seront plus grands qu'à celui produit par l'ion et leurs électrons de valence.

Les deux potentiels sont identiques en dehors de la région du cœur [6].

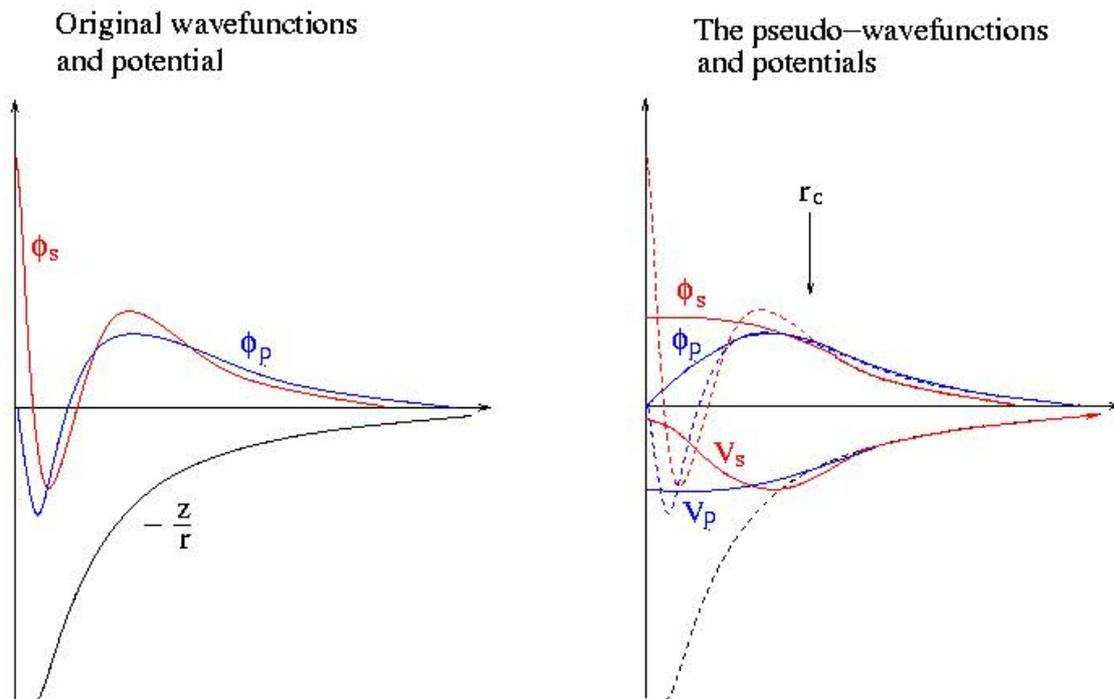


Figure I-2 : Schémas représentant : (à gauche) un potentiel (AE), les fonctions d'ondes de l'état s et p correspondantes ; (à droite) les pseudopotentiels correspondant à chaque état ainsi que les pseudo-fonctions d'ondes respectives [2].

I-2- La méthode de pseudo potentiel :

En 1934 Fermi a introduit la méthode de pseudo potentiel [7] pour étudier les états atomiques des couches minces l'année suivante, Hellman [8] a proposé que cette méthode peut être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des matériaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Philips et Kleinman en 1959 [9].

La méthode du pseudo potentiel, comme la méthode (O.P.W) utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et conduction avec les états du cœur[10]. Mais dans le formalisme pseudo potentiel l'effet d'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudo potentiel.

L'effet orthogonale des états de cœur peut également être obtenu en extrayant du potentiel cristallin, à évoluer rapidement la région du cœur. Le pseudo potentiel change alors lentement et se prête bien à aborder une approche du problème en termes de perturbations [11]. L'important dans cette méthode c'est que seuls les électrons du cœur son "gelés" signifiant que les électrons de valence se déplacent dans une potentielle électronique.

Les coefficients qui sont utilisés dans la méthode (O.P.W) pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisée pour construire une potentielle orthogonale.

Ce potentiel est répulsif puisque son effet est de repousser les électrons de valence loin du noyau. Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger .Cette méthode fut appliquée notamment pour le calcul des structures électroniques des solides et liquides, les interactions électron-phonon, la supraconductivité, les vibrations de réseaux, les liaisons et structure de cristaux [12].

I-3- Formalisme mathématique :

Comme dans la méthode (O.P.W) la fonction d'onde ψ est donnée par la somme des ondes planes ϕ et les états atomiques occupés du cœur ϕ_c [9,13-16] :

$$\psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (I,1)$$

La fonction d'onde doit être orthogonale aux états du cœur. Donc $\langle \phi_c | \psi \rangle = 0$ ce qui implique que :

$$\psi = \phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \quad (I,2)$$

On trouve l'énergie correcte E en substituant l'expression de ψ dans l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi \\ H\phi + \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle &= E\phi \end{aligned} \quad (I,3)$$

Qu'on peut écrire d'une façon condensé [13,17-19] :

$$(H + V_R)\phi = E\phi \quad (I,4)$$

$$\text{Ou} \quad V_R \phi = \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle \quad (I,5)$$

E: n'est pas la pseudo – énergie, mais plutôt la vraie énergie correspondante à la vraie fonction d'onde ψ .

Le potentiel V_R s'oppose au potentiel attractif cristallin V_c . Il est important de noter que V_R est très faible ce qui justifie l'utilisation de la méthode N. F.E M pour résoudre l'équation de Schrödinger [20], l'équation (I ,4) devient :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_C + V_R \right] \phi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right] \phi = E\phi \quad (I,6)$$

Ou

V_R : est le potentiel répulsif (positif).

V_C : est le potentiel attractif (négatif).

V_P : devient faiblement attractif dans la région du cœur et faiblement répulsif dans la région des électrons de valence [15,17].

I-4- Caractéristique du pseudo potentiel :

Le pseudo potentiel est considéré comme une perturbation (potentiel attractif près du cœur).

Les éléments de matrice du pseudo potentiel V_R sont donnés par [9, 17,19] :

$$\psi V_R \psi = \sum_c (E_v - E_c) \left| \int dr \psi_c^* \psi \right|^2 \quad (I,7)$$

Etant donné que E_v est l'égerment supérieure à E_c donc :

V_R : est toujours positif ainsi, $V_P = V_C + V_R$ est très faible, d'où l'utilisation de la théorie d'électron presque libre pour le calcul des niveaux de valence.

Si on néglige l'effet du cœur, le pseudo-potentiel devient local est dépend explicitement de la position r , il peut être comme suit [15, 17,21] :

$$V_R = V(r,r') = \sum_c (E_v - E_c) |\phi_c(r)\langle \phi_c(r) | \phi \rangle| \quad (I,8)$$

Où la fonction ϕ dépend de r .

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

I-5- Les modèles du pseudo potentiel :

I-5-1-Le modèle local :

L'Hamiltonien d'un électron dans un cristal est pris comme la somme de son énergie cinétique et son énergie potentiel dépendant de sa position comme suit:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (I,9)$$

Dans le cas du modèle local, le potentiel prend la forme suivante:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & , r > r_c \\ -\frac{Ze}{r_c} & , r \leq r_c \end{cases} \quad (I,10)$$

Où Z est la valence atomique.

r_c étant le rayon du cœur utilisé pour ajuster les données atomiques.

I-5-1-a- modèle de Heine et Abarenkov :

Heine et Abarenkov ont considéré un potentiel du cœur constant A pour avoir plus de flexibilité dans le paramétrage des données et $V(r)$ est défini comme suit [22]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & ; r > r_c \\ A & ; r \leq r_c \end{cases} \quad (I,11)$$

I-5-1-b- modèle d'Aschkroft :

Aschkroft a supposé que le cœur est inoccupé, et alors son potentiel sera nul, le Potentiel complet de l'électron devient alors comme ceci [23]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & ; r > r_c \\ 0 & ; r \leq r_c \end{cases} \quad (I,12)$$

I-5-2-Le modèle non local :

Étant donné que le potentiel du cœur peut être non local, la non localité est corrigée par la dépendance de ce potentiel en fonction de l'énergie sous forme de constantes différentes pour chaque état quantique et peut s'écrire comme suit :

$$V_p = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(r, E) f_l(r) P_l \quad (I, 13)$$

Où $A_l(r, E)$ est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur [24].

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

$f_l(r)$ est la fonction représentant l'effet de l'état du cœur possédant plusieurs formes telle que la forme Gaussienne, carré, et la forme d'Aschkroft.

I-5-2-1- La fonction de Heine Abarenkov:

La fonction est une fenêtre d'amplitude unitaire et de durée r_c et peut être modélisée comme suit [25] :

$$V(r) = \begin{cases} 1 & ; r < r_c \\ 0 & ; r \geq r_c \end{cases} \quad (I, 14)$$

Avec r_c le rayon du cœur ionique.

Cette fonction tout simplement exprime l'effet du cœur avec une certaine pondération unitaire.

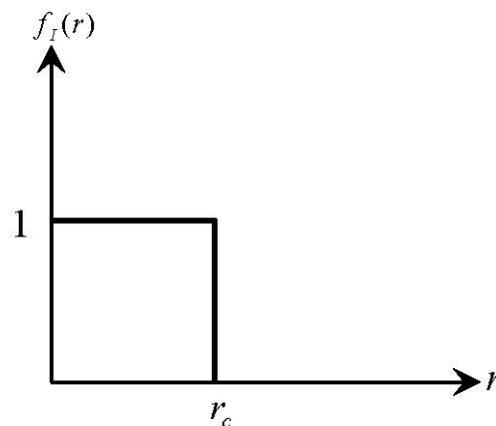


Figure (I, 3) : La fonction de Heine Abarenkov.

I-5-2-2- Le modèle de Gauss :

Dans ce cas, l'effet du cœur est pris en compte sous forme gaussienne, comme suit [24]:

$$f_1 = \exp\left(-\frac{r^2}{r_c^2}\right) \quad (\text{I,15})$$

Et dont la représentation serait comme suit:

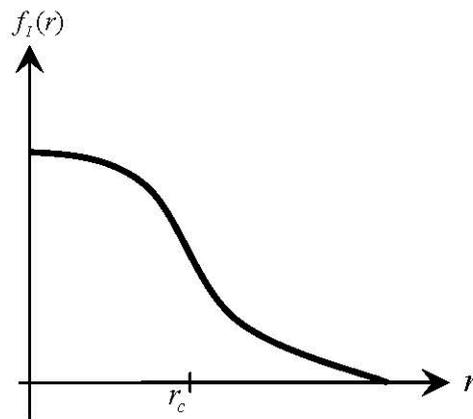


Figure (I, 4) : La fonction de Gauss

I-5-2-3- La fonction d'Aschkroft :

Pour le cas de cette fonction, l'effet du cœur est pris en compte par une fenêtre unitaire de durée r_c , puis plus en s'éloigne plus l'effet est atténué jusqu'à l'annulation, comme le montre la figure ci-dessous.

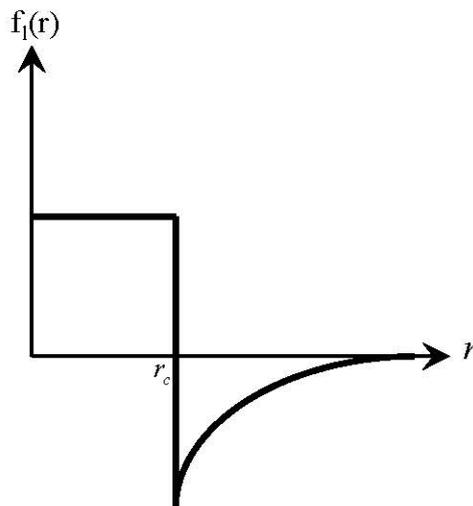


Figure (I, 5) : La fonction d'Aschkroft

I-6- la méthode empirique de pseudo potentiel (E.P.M) :

Il s'agit d'une approche déviée de la méthode des pseudos potentiels décrite précédemment, mais dans la quelles les pseudos potentiels sont supposés locaux [26].

La méthode E.P.M est couramment utilisée pour le calcul de la structure des bandes. Cette méthode empirique est appliquée aux semi-conducteurs [27] qui sont appliqués à la structure de diamant ou de zinc blende [14, 16, 18,21].

Les ajustements théoriques des observations sur les expériences de la réflexion et d'absorption cristallines déterminent les paramètres d'entrée dans le calcul de la structure de bandes comme $V(G)$.

La méthode empirique des pseudos potentiels (**E.P.M**) résout le problème d'ajustement des facteurs de forme $V(G)$ du pseudo potentiel expérimentaux [14,21].

$V_p(\mathbf{r})$ représente la superposition linéaire des potentiels atomique [18, 21,28- 30] :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}, \boldsymbol{\tau}} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}) \quad (\text{I},16)$$

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

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

Dans le réseau réciproque, le potentiel $V_p(\mathbf{r})$ prend la forme suivante [21, 18,31] :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I},17)$$

$V_a(G)$ est le facteur de forme.

Le facteur de forme joue un rôle important dans la théorie de pseudo potentiel. Il intervient dans le calcul des propriétés électroniques des matériaux [32].

$S(G)$ est le facteur de structure. Ce facteur a la forme [16, 18, 31,33] :

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I},18)$$

Ou N_a est le nombre des atomes de base.

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

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_p(\mathbf{r}) \right] \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n,k}(\mathbf{r}) \quad (\text{I},19)$$

Ou n indique l'indice de la bande.

$V_p(\mathbf{r})$: est le pseudo potentiel.

$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$: est la fonction de Bloch qui peuvent être développées en une série d'ondes planes.

I-7-La méthode de calcul (E.P.M) :

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

- Choisir les facteurs de forme $V(G)$.
- Remplacer $V(G)$ dans la relation du pseudo potentiel qui inclut le facteur de structure.
- Résoudre l'équation de Schrödinger avec les potentiels construit et trouver l'énergie propre E_k et les fonctions d'onde propre ψ_k .
- Comparer la valeur propre d'énergie avec l'expérience.
- Si les valeurs propres d'énergie sont en bon accord avec l'expérience, arrêter les calculs.
- Si non altérer les calculs et choisir d'autres valeurs de $V(G)$.

Le diagramme ci-dessous illustre la procédure de calcul de la méthode E.P.M [16, 29,34] :

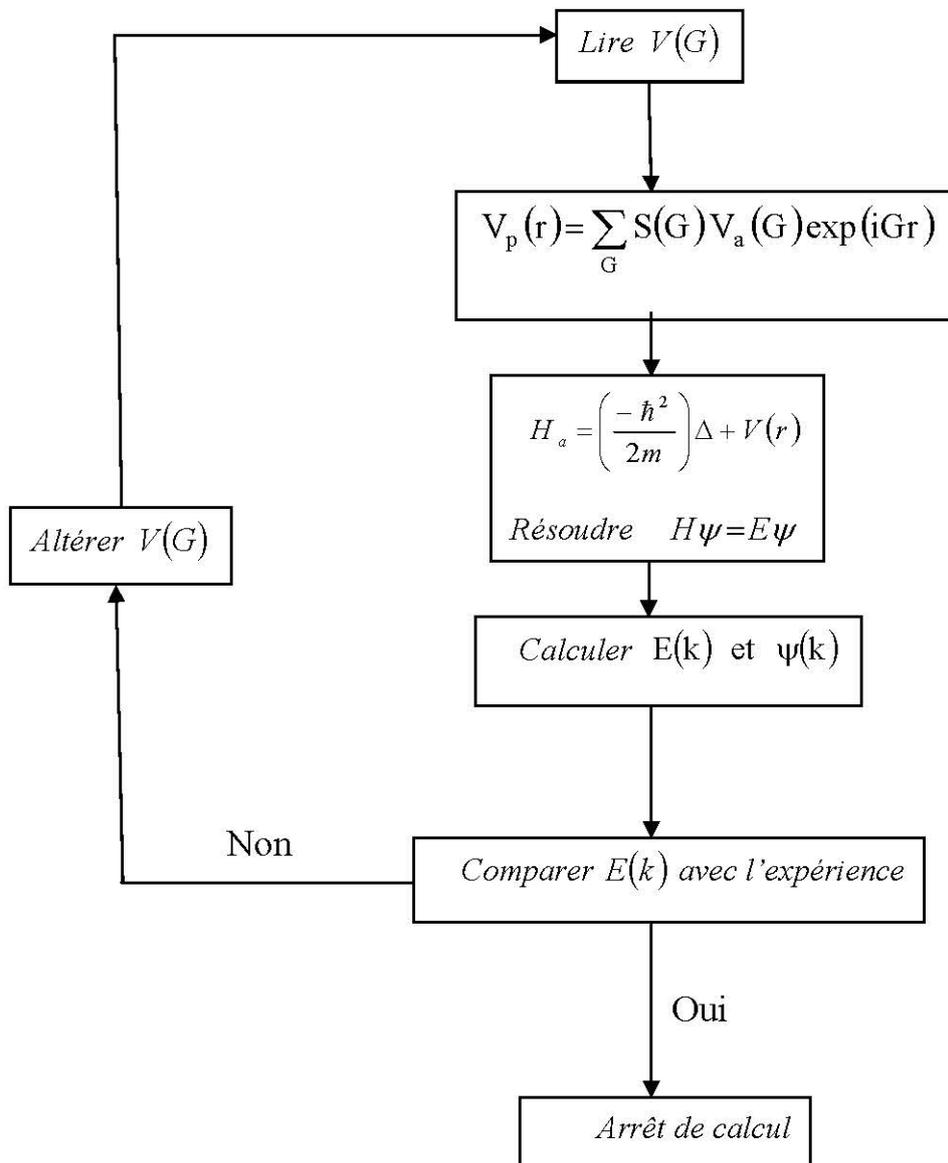


Figure (I, 6) : Organigramme de la procédure de calcul par E.P.M [16, 29,34]

I-8-Approximation du Cristal virtuel (V.C.A) :

Dans l'approximation du cristal virtuel, (Virtual Crystal Approximation VCA) les distorsions sont considérées comme suffisamment faibles (théorie des perturbations du premier ordre). Pour maintenir la structure en bande d'un cristal parfait, cela permet d'obtenir une nouvelle constante de réseau et de nouveau potentiel cristallin moyen.

Ce modèle garantit une variation linéaire des principaux paramètres de l'alliage, dans un sens plus précis, les potentiel cristallin, du triple alliage $A_xB_{1-x}C$ sont déterminées par interpolation linéaire entre ceux des composants constituent le cristal [35].

$$V(x) = xV_{AC} + (1-x)V_{BC} \quad (I, 20)$$

L'Hamiltonien considéré dans la V.C.A est donnée par :

$$H(x) = \frac{P^2}{2m} + V(x) \quad (I, 21)$$

Pour établir le calcul de la structure des bandes, il est nécessaire de construire le potentiel de l'alliage en fonction de la composition, en tenant compte de l'effet de désordre [35].

A I-9-Approximation du cristal virtuel amélioré (VCAA) :

Cette approche fait intervenir certaines approximations [36] :

$$\sum_{j_{BC}} \Delta(r - R_j) = \alpha x \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (I, 22)$$

et

$$\sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) = \beta(1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (I, 23)$$

α et β étant des fonctions du désordre dépendantes de la composition x et de l'énergie potentielle. Le potentiel du désordre s'écrit alors :

$$V_{dés} = (\alpha - \beta)x(1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (I, 24)$$

Considérant que le terme $(\alpha - \beta)$ est ajustable et par un calcul de probabilité, on aura :

$$\alpha - \beta = \pm \frac{1}{N[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}} + \left[N^2 \frac{(1-x)}{x} + \sum_{n=0}^N C_n^N x^{N-n-1} (1-x)^{n-1} (n^2 - 2nN(1-x)) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (I, 25)$$

Ou

C_n^N représente la combinaison d'occupation des N sites par les composés BC ou AC.

Après simplification des calculs on aura :

$$\alpha - \beta = -[x(1-x)N]^{-\frac{1}{2}} \quad (I, 26)$$

En substituant cette expression dans l'équation (I, 24) on trouve :

$$V_{\text{dés}}(\mathbf{r}) = - \left(\frac{x(1-x)}{N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{I},27)$$

Si on considère tout les sites du cristal étudié, l'expression de $V_{\text{dés}}$ aura cette forme [37].

$$V_{\text{dés}}(\mathbf{r}) = -P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{I},28)$$

Ou encore :

$$P = \frac{\left(\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)} \quad (\text{I},29)$$

P : est le facteur d'ajustement donnant le meilleur bowing.

i : indique l'ième plus proche voisin.

n : pour inclure tous les sites du cristal.

d_i : la distance entre la ième plus proche voisin [38].

Et finalement, l'expression du pseudo potentiel du cristal est la suivante :

$$V^P(\mathbf{r}) = V_{\text{VCA}}(\mathbf{r}) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{I},30)$$

Comme elle peut être écrite sous une forme plus étendue [39].

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

Ce même potentiel peut être donné sous forme de séries de fourrier :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_G V(G) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (\text{I},32)$$

Avec $V(G)$ sont les facteurs de forme donnés par :

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

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

Cette expression a été utilisée pour calculer les gaps d'énergie de l'alliage ternaire semi conducteur $Mg_xZn_{1-x}Te$ étudié dans notre travail, formé à partir des composés binaires ZnTe et MgTe.

Les facteurs de forme de cet alliage sont estimés comme suit :

$$V_{MgZnTe}(G) = xV_{MgTe}(G) + (1-x)V_{ZnTe}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{MgTe}(G) - V_{ZnTe}(G)) \quad (I,34)$$

Référence:

- [1] U. Von Barth, C.D.Gellat, *phys.Rev.B***12**, 2222, (1980).
- [2] M. Ferhat, B. Bouhafs, A. Zaoui et al, *J. phys, condens - Matter***10**.7995, (1995).
- [3] F.Y.Ghrici, Mémoire de magistère, Université d'Oran des sciences et des technologies Mohamed Boudiaf, (Algérie), (2013).
- [4] B. Bertrand, Mémoire de master de physique, université Claude Bernard Lyon, (France), (2010).
- [5] W, E Pickett pseudo potential methods in condensed Matter application, Elsevier, science publishers, (1989).
- [6] K, Fatima, Thèse de doctorat, université de Metz, France, (2007).
- [7] E. Fermi, *Nuovo Cimento*, **11**, (1934), 157.
- [8] H. J. Hellman, *J. Chern. phys.* **3**, (1935), 61.
- [9] M.L. Cohen and J.R.Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Proprieties of Semiconductors*, Berlin: Springer ,(1988).
- [10] N.H. Fars, Thèse de doctorat, université Mouhamed Khider de Biskra, (Algérie), (2016).
- [11] H. Mathieu, *physique des semi- conducteurs et des composant électronique*, 4Ed Masson, (1998).
- [12] DJ, Taris, Mémoire de magister, université Abou Bakr-Bel Kaid-Telemcen (Alegria) ,(2010).
- [13] S. Yousfi, Mémoire de magistère, Univ. M'sila, Algérie ,(2004).
- [14] J. C. Phillips, *Phys. Rev.* **112**, (1958) ,685.
- [15] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Univ. Annaba, Algérie ,(2010).
- [16] S. Bounab, Mémoire de magistère, Univ. Constantine, (2002).
- [17] N. Y. Aouina, Mémoire de magistère, Univ. M'sila, Algérie, (2003).
- [18] F. D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30**, 244, (1944).
- [19] J. Wang, S. Li, S. Yip, S. R. Phillpot and D. Wolf, *Phys. Rev. B* **52**, 12627 ,(1995).
- [20] : H. M Zenasni, Mémoire de magistère, Univ.Tlemcen, Algérie, (2008).
- [21] A. K. Garlu, *Phys. Rev. B* **38**, 9790, (1988).
- [22] J. V. Abarenkov and V. Heine, *Phil. Mag.* **9**, 451, (1965).
- [23] N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 48, (1966).
- [24] H. Nara and T. Kobayasi, *J. Phys. Soc. Japan*, **14**, 1429, (1976).
- [25] J. V. Abarenkov and V. Heine, *Phil. Mag.* **12**, 529, (1965).
- [26] M. Bescond, Thèse de doctorat, Université de Provence (Aix-Marseille I), France, (2004).
- [27] A. Zaoui, Thèse de doctorat, Université de Metz, (1999).

- [28] J. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **14**, (1976), 552.
- [29] F. Barka, Thèse de magister, Université de M'sila, Algérie ,(2004).
- [30] S. Adachi, J. Appl. Phys. **61** ,(1987) ,4869.
- [31] P. Vogl, J. Phys. C**11**, (1978) ,251.
- [32] N. Koubaa, Thèse de doctorat, Université de Metz, (1990).
- [33] J. M. Baranowski, J. Phys. C **17** ,(1984), 6287.
- [34] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, Semiconductors **32**, (1998), 947.
- [35] R. G. Parr and W. Yang, in Density Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, New-York (1989); J. K. Labanowski and J. W. Andzelm, in Density Functional Methods in Chemistry, Ed. Springer-Verlag, New-York (1991); L. J. Bartolotti and K. Flurchick, in Reviews in Computational Chemistry, Ed. Lipkowitz, K. B. Boyd, D. B, VCH Publishers, NewYork, 2 (1996) 187; A. Amant, in Reviews in Computational Chemistry, Ed. Lipkowitz, K. B; Boyd, D. B, VCH Publishers, New-York, **2** ,(1996), 217.
- [36] N. Bouarissa ,J.Phys. Chem.Solids **62** (2001) ,1163.
- [37] N. Bouarissa, Mater. Sci. Eng. B **86** (2001) ,53.
- [38] N. Bouarissa, Superlattices and Microstructure, Vol. **26**, No. 4, (1999), 280.
- [39] N. Bouarissa, K. Kassali, Phys State. Sol. (b) **228**, No. 3, (2001) ,665.

Chapitre II

les propriétés optiques et diélectriques

Chapitre II

Les propriétés optiques et diélectriques

II.1. Introduction :

Dans cette partie, nous verrons que notre connaissance du comportement des électrons va jusqu'à nous expliquer la réflexion de la lumière par certains solides, alors que quelques-uns l'absorbent et que d'autres sont transparents. Elle nous apporte aussi l'explication pour certains solides de pouvoir sous certaines conditions, émettre de la lumière [1]. Plusieurs domaines dans lesquels la lumière réagit avec la matière sont évidemment d'intérêt pratique. L'étude des propriétés optiques des solides (absorption, réflexion, transmission...) a été prouvée pour être un outil puissant pour la compréhension de la structure électronique et atomique de ces matériaux [2].

L'objectif de ce chapitre est l'étude des propriétés optiques du solide (absorption, réflexion, transmission...).

II.2. Interaction rayonnement - matière:**II.2.1. Photons et électrons:*****a-Photon :***

A la fin du dernier siècle, l'Anglais Maxwell a réussi à unifier l'ensemble de l'électricité, de la radioélectricité, du magnétisme et de l'optique sous la forme de quatre équations différentielles seulement. Ces équations sont rappelées ci dessous [3,4].

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

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

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

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

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

ε_r est la permittivité relative du milieu diélectrique.

ε_0 est la permittivité électrique du vide.

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

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

Avec $\omega = 2 \pi \nu$ est la pulsation et \vec{k} est le vecteur d'onde.

E_0 : représente l'amplitude.

L'expression (II-2) est la solution de l'équation (II-1) [3, 5,6]. En portant cette expression dans les équations on obtient facilement la relation :

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

n : L'indice de réfraction.

ν : La vitesse de propagation de l'onde dans le vide et dans un milieu de constant diélectrique relatif

ϵ_r . Alors $n = \sqrt{\epsilon_r}$

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

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp i 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{r}{\lambda} \right) \quad (\text{II-4})$$

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

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

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

avec la vitesse $v = \frac{\omega}{k}$ que l'on appelle vitesse de phase. L'onde réelle est constituée de paquets

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

La représentation ondulatoire du rayonnement que nous venons de rappeler est bien adaptée à l'étude des interactions rayonnement– rayonnement. 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 [6]:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{II-5})$$

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

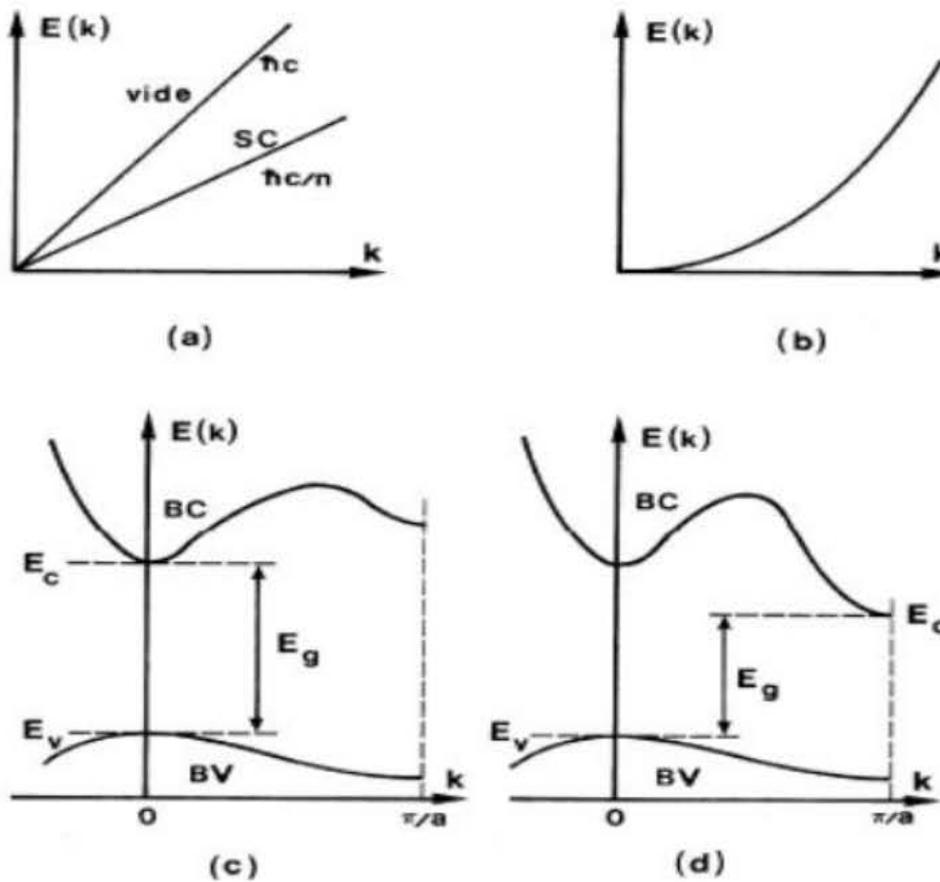
La relation de dispersion du photon qui relie l'énergie au vecteur d'onde s'écrit [7]:

$$E = \frac{\hbar c}{\sqrt{\epsilon_r}} k \quad (\text{II-6})$$

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

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

$$E = \frac{h}{T} = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{II-7})$$



Figure(II-1) : Courbe de dispersion ,a) photons dans le vide et dans le semi-conducteurs ,b)électrons dans le vide ,c)électrons dans un semi- conducteur à gap direct ,d) électrons dans un semi- conducteurs à gap indirect [8] .

Les courbes de dispersion d'un semi conducteurs à gap direct et d'un semi-conducteur à gap indirect sont schématisées sur la figure (II-1). Il faut noter que lorsque le semi-conducteur est indirect, le minimum de la bande de conduction est situé en bord de zone de Brillouin(ou à son voisinage dans le cas du silicium), c'est-à-dire pour $k = \frac{\pi}{a}$ ou a représente le paramètre du réseau cristallin.

b-électron :

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

$$\vec{p} = m\vec{v} \tag{II-8}$$

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

De même qu'Einstein a proposé qu'à une onde plane de fréquence ν et de longueur d'onde λ . On devait associer une particule, le photon d'énergie $E = h\nu$ de quantité de mouvement $p = \frac{h}{\lambda}$. Louis de Broglie a proposé en 1924 qu'à une particule matérielle d'énergie E et de quantité de mouvement, on devait associer une onde de fréquence $\nu = \frac{E}{h}$ de longueur d'onde $\lambda = \frac{h}{p}$. Ainsi la quantité de mouvement de la particule et le vecteur d'onde de l'onde qui lui est associée sont liés par la relation :

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

Ou, en représentation vectoriel :

$$\vec{p} = \hbar \vec{K} \quad (\text{II-11})$$

Il en résulte, compte tenu des relations (II-7-8), que la dispersion de l'électron libre s'écrit [9,10] :

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

II.3. La réflexion des ondes planes :

Si une onde plane se propage entre deux milieux avec des constantes diélectriques différents, elle sera divisée en deux, une onde réfléchie et une onde réfractée, leurs amplitudes seront déterminées par les conditions aux limites qui exigent que la composante tangentielle champ H Pour une onde électromagnétique d'angle incidente ϕ se propagent du vide sur les limites du milieu, l'indice de réfraction complexe N est donné par :

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

n : étant l'indice de réfraction réelle.

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

Les conditions aux limites à la formule de Fresnel :

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

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

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

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

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

Les intensités des coefficients de réflexion R_n et R_p sont souvent appelés coefficients de réflexion déterminés par le rapport entre l'onde incidente et celle réfléchi alors

$$R_n = |r_n|^2 \quad (\text{II-18})$$

$$R_p = |r_p|^2 \quad (\text{II-19})$$

Pour une incidence normale ($\varphi = 0$) les équations mènent au résultat suivant [11] :

$$R_n = R_p = R = \frac{k^2 (n-1)^2}{k^2 (n+1)^2} \quad (\text{II-20})$$

Pour $k = 1$, n est réel ; le coefficient de réflexion devient :

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (\text{II-21})$$

La mesure de la réflexion de la lumière fournit l'information la plus complète sur les systèmes électroniques [12]. Pour tous les semi-conducteurs, R varie entre (0,25 et 0,35), ainsi dans les meilleurs conditions c'est à dire en incidence normale, 30% du rayonnement est réfléchi par le semi-conducteur [6].

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

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

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

Un photon présent dans le semi-conducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence avec l'émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée, ce processus sera mis à profit dans les lasers à semi-conducteurs [13].

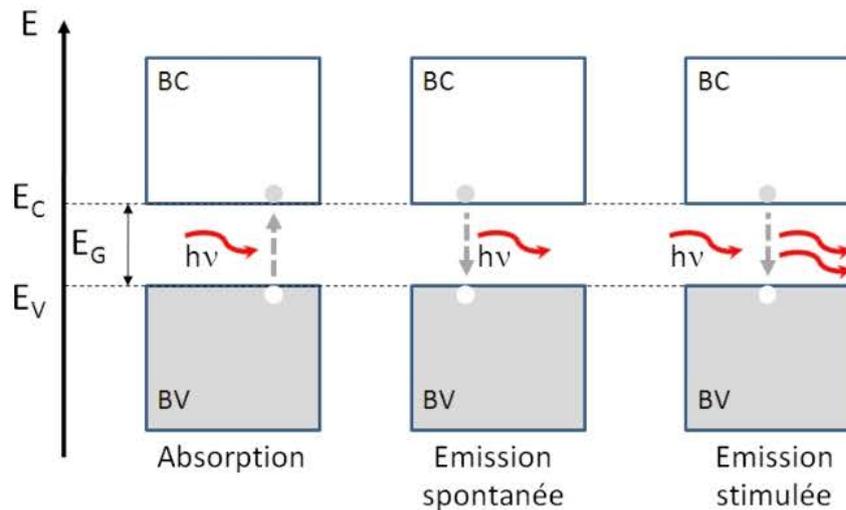


Figure (II-2) : Les processus d'interaction du rayonnement avec les électrons du semi-conducteur [13].

II-5- Bande interdite (gap énergétique) :

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

L'énergie de bande interdite correspond à la différence entre le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence, c'est à dire [14] :

$$E_g = E_c - E_v$$

Dans les isolants, cette valeur de bande interdite est si grande que les électrons ne peuvent pas passer de la bande de valence à la bande de conduction. Alors que pour les semi-conducteurs, cette bande est suffisamment petite pour qu'une excitation adéquate, permette aux électrons de la bande de valence de rejoindre la bande de conduction. Ainsi le semi-conducteur peut transporter de l'électricité et donc devenir conducteur. Par contre dans les métaux, on rencontre un chevauchement des bandes, les électrons peuvent passer directement de la bande de valence à la bande de conduction et circulent dans tout le solide [10].

II-5-1 Gap direct et gap indirect :

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde k .

Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [15].

II-5-1-a Les semi-conducteurs à gap direct :

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k le semi-conducteur est dite à gap direct

II-5-1-b Les semi-conducteurs 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 le semi-conducteur est dit à gap indirect. La distinction entre les semi-conducteur 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 semi-conducteurs à gap indirect [16].

Les structures de bandes représentées sur la figure (II-3) font apparaitre deux types fondamentaux de semi-conducteurs :

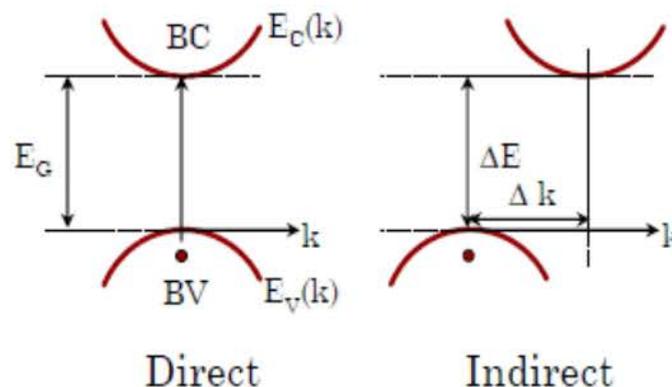


Figure (II-3) : Gap direct et gap indirect [16].

II-6 Propriétés diélectriques :

La réponse des électrons d'un solide peut être décrite macroscopiquement, par la constante diélectrique complexe $\varepsilon(\vec{k}, \omega)$, qui relie le vecteur champ électrique $\vec{E}_{\vec{a}}$ l'induction électrique dans le solide D. cette fonction a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides. Les relations reliant la partie réelle et imaginaire du constant diélectrique complexe et donnée par [17,18] :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \quad (\text{II-22})$$

Elle relie le vecteur champ électrique E au déplacement dans le solide D par la relation.

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon(\omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) \quad (\text{II-23})$$

Ceci est strictement valable que pour les composés isotropes, c'est le cas des matériaux étudiés dans ce travail car ils cristallisent dans un système cubique.

La partie imaginaire ε_2 traduit l'absorption du matériau tandis que la partie réelle ε_1 à la polarisation du milieu.

La partie imaginaire ε_2 pour fréquence W est proportionnelle à la somme de toutes les transitions entre états occupés et états vides séparés en énergie par $h\omega$ [19,20] :

$$\varepsilon_2(\omega) = \left[\frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \right] \sum_{i,f} \int |\langle i | M | j \rangle|^2 f_i (1 - f_j) \delta(E_f - E_i - h\omega) d^3k \quad (\text{II-24})$$

Ou les $\langle i | M | j \rangle$ représentent les composantes de la matrice du moment dipolaire i et j sont l'état initial et final respectivement, f_i est la fonction de distribution de Fermi de l'ième état et E_i est l'énergie de l'électron de l'ième état.

Le produit $|\langle i | M | j \rangle|^2 f_i (1 - f_j) = PV_c$ est l'élément de matrice.

Représentant la probabilité de transition entre les états i de la bande de valence et les états, de la bande de conduction.

La conservation de l'énergie au cours des transitions est représentée par la fonction de Dirac.

$$\delta(E_f - E_i - h\omega)$$

Les parties réelles et imaginaires ne sont pas indépendantes, elles sont liées entre elles par les relations de Kramers-Kronig [21,22].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (\text{II-25})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (\text{II-26})$$

Dans ces équations. La dispersion dans l'espace (variation avec k) est négligée, car pour la plupart des phénomènes optiques, la longueur d'onde de la lumière est grande comparée aux dimensions du système. Ces résultats ne sont valables également qu'en absence de champ magnétique. Dans le cas d'un milieu isotrope ou d'un cristal cubique ε se réduit à un scalaire. La réponse du système à une onde plane électromagnétique peut alors être décrite à l'aide d'un indice de réfraction scalaire complexe.

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (\text{II-27})$$

Ces deux grandeurs sont liées par la relation : $\varepsilon = N^2$

$$\text{Avec :} \quad \varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad (\text{II-28})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk \quad (\text{II-29})$$

Les grandeurs $n(\omega)$ et $k(\omega)$ sont appelées respectivement l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction. Elles sont définies par les relations suivantes [23,24] :

$$n(\omega) = \left(\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-30})$$

$$k(\omega) = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} - \frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-31})$$

Correspond à l'énergie par unité de temps de volume de la risée par le flux énergétique il est défini par l'équation suivante :

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (\text{II-32})$$

α est relié à ε_2 par la relation :

$$\alpha = \frac{\varepsilon_2 \omega}{C_n} \quad (\text{II-33})$$

Ou C_n est la vitesse de la lumière dans le vide.

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

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

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

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

Ou $\alpha = \frac{\omega k}{c}$ coefficient d'absorption.

II- 7 L'indice de réfraction :

L'optimisation des composantes optoélectroniques nécessite une connaissance précise de l'indice de réfraction des matériaux semi-conducteurs. L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau possède à ralentir et à dévier la lumière.

Cet indice de réfraction (souvent noté n) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($c = 299792 \text{ Km/s}$) et la vitesse de la lumière dans le matériau .

Plusieurs approches ont été envisagées pour corréler le gap énergétique des semi-conducteurs à leur indice de réfraction. L'estimation de ce paramètre est importante pour les guides d'ondes optiques et dans les structures optoélectroniques : comme les diodes laser à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [25].

A : La formule de moss :

Moss était le premier à trouver une relation entre l'indice de réfraction entre l'indice de réfraction n et le gap d'énergie E_g basé sur le modèle atomiques [26] :

$$E_g n^4 = k \quad \text{Donc} \quad n = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \quad (\text{II-36})$$

Ou E_g : est le gap d'énergie.

k : une constante égale à 108 (eV).

n : l'indice de réfraction.

B : L'expression proposée par Ravindra et ses collaborateurs :

Ravindra et ses collaborateurs donnent une relation linéaire entre n et E_g donné par [27] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{II-37})$$

Ou $\alpha = 4,084$ et $\beta = -0.62 \text{ eV}^{-1}$

C : La relation empirique de Hervé et Vandamme :

Hervé et vandamme ont proposé un modèle basé sur la théorie des oscillations classiques pour

$\omega \ll \omega_0$ [28]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{II-38})$$

Avec $A = 13.6 \text{ (eV)}$, $B = 3.4 \text{ (eV)}$.

ω_0 est la fréquence de résonance ultra violet.

II-8-1 calcul de la constante diélectrique :

En haute fréquence le constant diélectrique est donné par [29] :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (\text{II-39})$$

n : L'indice de réfraction.

Le model de Harisson « bonde orbital model » est utilisé pour investir la dépendance en composition de la constante diélectrique statique ϵ_0 utilisant la relation qui lie la constante diélectrique statique ϵ_0 à la constante diélectrique en haute fréquence ϵ_∞ donnée par [30] :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty + 1} = 1 + \mathfrak{G} \quad (\text{II-40})$$

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

$$\mathfrak{G} = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{II-41})$$

α_p la polarité, et déterminée en utilisant la définition de vogl [31] :

$$\alpha_p = -\frac{V_a(3)}{V_s(3)} \quad (\text{II-42})$$

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

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

α_c : est la covalence du matériau définie comme :

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{II-43})$$

II-8-2 L'expression proposée par Adachi :

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

E_g [13] :

$$\epsilon_\infty = 11.26 - 1.42E_g \quad (\text{II-44})$$

$$\epsilon_0 = 18.52 - 3.08E_g \quad (\text{II-45})$$

Références

- [1] B. Chalmers, Structure et Propriétés des Solides, Ed Masson, Paris, New York, 65, (1987).
- [2] S. Adachi, J. Appl. Phys. **61**, 4869, (1987).
- [3] H. Saheb, Mémoire de magister, université de Tébessa, Algérie, (2012).
- [4] D. Sénéchal, physique subatomique, Université de Sherbrooke 79, (2010)
- [5] S. Ouendadji, Thèse de doctorat, Université de Annaba, Algérie, (2010).
- [6] H. Mathieu, physique des Semi-conducteurs et des Composants Électroniques, 4 Ed. Masson 21, 23, 24, 25, 33, 419, 420, (1998).
- [7] G. Debionne, la lumière, club d'astronomie, (2010).
- [8] H.Mekahlia, Mémoire de master, Université de Tébessa (Algeria), (2016).
- [9] C. Kittel, physique de l'état solide, Ed. Dunod Université, (1983).
- [10] R. Mouici, Mémoire de magister, université de Tébessa, Algérie, (2012).
- [11] F. Abelés, Optical Properties of Solids, North-Holland, Publishing Company, (1972), 3, 24, 25, 26.
- [12] Y. Farge, M. Fontana, Perturbations électroniques et vibrationnelles localisées dans les solides ioniques. Ed Masson & Cie Editeurs, paris, (1974), 24, 25.
- [13] [9]. Adachi S. Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors .Department of Electronic Engineering.Gumma University, Japon, (2005).
- [14] N. Le Sech, "Photocathodes à base de nanotubes de carbone sur substrats semi- conducteurs de type III-V Application aux amplificateurs hyperfréquence", Thèse doctorat, école polytechnique, 2010.
- [15] B.N. Brahmi, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen, (2013).
- [16] A. Aouina, Mémoire de Magister en physique, Univ Mentouri Constantine, (2007)
- [17] J.S. Tell, Phys. Rev. **104** (1956), 1760.
- [18] R.De.L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. **12**, (1926), 547.

- [19] F. Bassani, G. Pastori, Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Pergamon Press, Oxford, (1973).
- [20] C. Ambrosch-Draxl, R. Abt, *The Calculation of Optical Properties Within WIEN97*, ICTP Lecture Notes 1998, unpublished; S. Sharma, C. Ambrosch-Draxl, M.A. Khan, P. Blaha, S. Auluck, *Phys. Rev. B* **60**, (1999), 8610
- [21] C. A. Draxl, R. Abt, ICTP lecture notes, unpublished, (1998).
- [22] P. Y. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties*. Berlin: Springer-Verlag, (1999), 233.
- [23] A. Delin, A. O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M. S. Brooks, T. Gasche, et al. *Phys. Rev. B* **54** (1996), 1673.
- [24] M. Dressel, G. Gruner, *Electrodynamics of Solids: Optical Properties of Electrons in Matter*. UK: Cambridge University Press, (2002).
- [25] F. Mezrag, N Bouarissa, M Boucenna and L Hannachi *Phys. Scr.* **82**, (2010), 035702.
- [26] V. P Gupta et N. M. Ravindra 1980 *Phys. Stat. Sol. B* **100**, 715,(1980).
- [27] N. M. Ravindra, S. Auluck et V. K. Srivastava, *Phys. Stat. Sol. B***93**, k155, (1979).
- [28] P. J. L. Herve et L. K. J. Vandamme, *Infrared. Phys. Techno*, **35**, 609, (1994).
- [29] F. Mezrag, *Mémoire de magister, université de M'sila, Algérie*, (2003).
- [30] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, *Semiconductors*, **32**, 947, (1998).
- [31] P. Vogl, *J. Phys. C***11**, 251, (1978).

Chapitre III

Résultats et discussion

Chapitre III
Résultats et discussions

III-1 Introduction :

Les semi-conducteurs présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés. Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes [1]. La fabrication de nombreux dispositifs électroniques et dispositifs de détection étaient des composés semi-conducteurs II-VI cristallisés dans la structure du mélange de zinc soumis à substitution et stabilité notamment en raison de ses applications potentielles dans la réalisation et le développement de dispositifs optiques comme appareils émetteurs de lumière blanche [2,3], éléments de cellules solaires, ou des divans conductrices transparentes ailettes de tampons (films) [4].

Il existe plusieurs méthodes qui sont utilisées pour calculer les propriétés des solides. Dans ce travail nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empirique locale (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui introduit l'effet du désordre compositionnel, et combinée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM), elle est utilisée pour étudier les propriétés optiques et diélectriques telle que l'indice de réfraction, les constantes diélectriques, en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ [5].

Le pseudo potentiel est défini comme étant une superposition des pseudos potentiels atomiques de la forme:

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

Avec:

$V_L(\vec{r})$ et $V_{NL}(\vec{r})$ sont respectivement la partie locale et la partie non locale du pseudo potentiel. Dans ce travail, on a pris en considération que la partie locale où la partie non locale est omise, donc la formule (III-1) prend la forme suivante:

$$V_p(\vec{r}) = \sum_G S(G) V_a(G) \exp(iGr) \quad (\text{III.2})$$

$S(G)$ est le facteur de structure et les $V(G)$ sont les paramètres du pseudo potentiel ou les facteurs de formes.

On détermine les paramètres du pseudo potentiel empirique par la méthode non linéaire des moindres carrées [6], dans laquelle tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie calculés par la méthode des pseudo potentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement. Il est donné par [7]:

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

δ doit être minimal.

Où:

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

E_{ij}^{exp} et E_{ij}^{cal} sont respectivement, les énergies mesurées et celles calculées entre le i ème état au vecteur d'onde $k = k_i$ et le j ème état au vecteur d'onde $k = k_j$ dans les m paires choisies (i,j) , n étant le nombre des paramètres du pseudo potentiel empirique.

Les valeurs du départ des facteurs de forme sont améliorées par itération jusqu'à minimiser le δ [8].

Les facteurs de forme du pseudo potentiel local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semi-conducteurs $MgTe$ et $ZnTe$ dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau III-1.

Tableau III-1: Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semi-conducteurs $MgTe$ et $ZnTe$ dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en (A°).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
ZnTe	-0.2889	0.0	0.05143	0.016334	0.1422	-0.1261	11.5343 (u. a)
							6.1037 (A°)
MgTe	-0.3302	0.2038	-0.0285	0.2085	0.0	0.03194	11.9998 (u. a)
							6.350 (A°)

III-2- Etude des gaps énergétiques :

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

Tableau III-2: Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$ pour les concentrations $x= 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0 .

Matériau	E_g (eV)
ZnTe	2.39087 2.38, 2.57 ^{a, b}
$Mg_{0.1}Zn_{0.9}Te$	2.49175 ^{**} 2.38734 ^{**}
$Mg_{0.3}Zn_{0.7}Te$	2.69350 ^{**} 2.53401 ^{**}
$Mg_{0.5}Zn_{0.5}Te$	2.87565 ^{**} 2.72124 ^{**}
$Mg_{0.7}Zn_{0.3}Te$	2.80510 ^{**} 2.86087 ^{**}
$Mg_{0.9}Zn_{0.1}Te$	2.73455 ^{**} 2.77107 ^{**}
MgTe	2.69928 2.5 ^a

* Nos calculs sans désordre.

** Nos calculs avec désordre.

(a):Ref [10].

(b): Ref [11].

A partir du tableau (III.2) on observe que, les résultats obtenus des gaps d'énergies fondamentaux sont en bon accord avec ceux trouvés par l'expérience pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$.

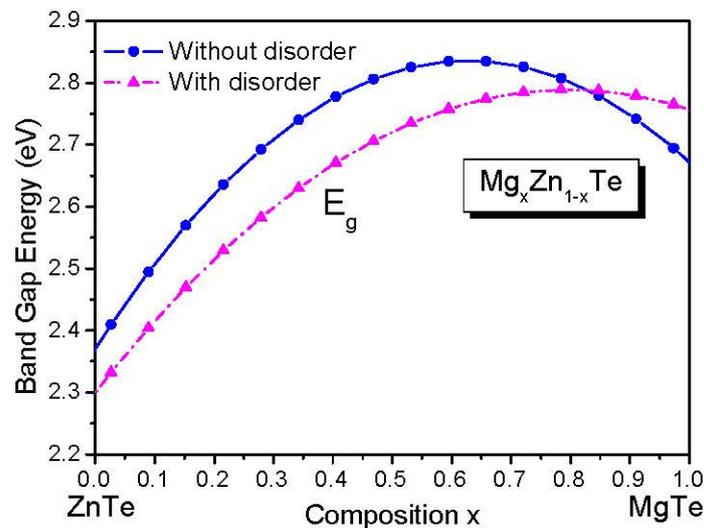


Figure III-1: La variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel

La figure III-1 représente la variation des gaps fondamentaux E_g en fonction de la concentration x de Magnésium de l'alliage ternaire $Mg_xZn_{1-x}Te$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. On remarque que, les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage augmente non linéairement en fonction de la concentration x de Magnésium jusqu'à $x = 0.5$, après ils diminuent pour les concentrations $x > 0.5$, et l'effet de désordre est clair et il fait diminuer le gap d'énergie fondamental jusqu'à la concentration $x = 0.7$, après il augmente pour les concentrations $x > 0.7$.

Les expressions analytiques des gaps fondamentaux E_g avec et sans désordre des alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$ sont données par les relations suivantes :

$$E_g = 2.3714545 + 1.4799872 x - 1.1787063 x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 5})$$

$$E_g = 2.3003339 + 1.2258871 x - 0.7688208 x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 6})$$

III-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'énergie et les constantes optiques (l'indice de réfraction n) et les constantes diélectriques (la constante diélectrique statique ϵ_0 et la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞) sont des paramètres importants [12, 13, 14].

III-3- 1 L'indice de réfraction:

La connaissance du gap d'énergie nous a permis de calculer l'indice de réfraction n et de voir sa dépendance en fonction de la concentration x suivant plusieurs modèles qui ont été envisagées pour apporter le gap énergétique du semi-conducteur 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 lasers à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques [14].

Les valeurs de l'indice de réfraction n obtenues en employant les relations de Moss, de Ravindra et ses collaborateurs, et de Hervé et ses collaborateurs, respectivement, sont 2.59, 2.60 et 2.55 pour $ZnTe$; 2.51, 2.41 et 2.44 pour $MgTe$. Les valeurs connues de n pour $ZnTe$ et $MgTe$ citées dans les références [14, 15, 16, 17,18] sont 2.7, 2.88, 2.70, et 2.7 pour le composé $ZnTe$; 2.65, 2.51, 2.12 et 2.75 pour le composé $MgTe$. Noter que pour $ZnTe$, le décalage de l'accord entre les résultats et les données connues est dans les intervalles [4.07%-06%-4.07%-4.07% -4.07%], [3.7%-9.72%-3.7%-

3.7%] et [5.55%-11.45%-5.55%-5.55%] en employant les relations de Moss, de Ravindra et ses collaborateurs, et de Hervé et ses collaborateurs respectivement. Pour $MgTe$, les résultats sont conformes aux données connues à moins de [5.28%-0%-15%-18.39%], [9.05%-3.98%-13.67%] et de [8.6%-2.78%- 15.09%] en employant les relations (II-36), (II-37) et (II-38) respectivement.

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

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

La figure III-2 représente la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations avec et sans désordre.

Dans cette figure, nous observons que les courbes sont presque identiques et ces variations sont non linéaires. Pour l'effet du désordre, on constate que cet effet fait augmenter ce paramètre. Cette augmentation est importante pour les faibles concentrations et elle devient moins importante pour la concentration supérieure à $x=0.6$ en allant du composé $ZnTe$ ($x=0$) vers le composé $MgTe$ ($x=1$). Une autre remarque importante est que, dans le cas sans désordre on remarque que l'indice de réfraction n diminue avec l'augmentation de la concentration x de magnésium jusqu' au point de concentration égal à ($x=0.5$), puis il commence à augmenter jusqu' à ce que la concentration soit égal à ($x=1$).

Dans le cas avec désordre on remarque que l'indice de réfraction n diminue avec l'augmentation de la concentration x de magnésium jusqu' au point de concentration égal à ($x=0.7$), puis il commence à augmenter jusqu' à ce que la concentration soit égal à ($x=1$).

La figure III-3 montre la comparaison de la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$. On remarque qu'il y a une diminution non linéaire de l'indice de réfraction n avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium jusqu' à la concentration $x=0.7$, puis il augmente ensuite jusqu' au point de concentration ($x=1$) pour les trois relations.

On signale une constatation particulière pour la variation de l'indice de réfraction n pour des concentrations supérieure à $x=0.15$ de Magnésium. À premier vue, il y avait une corrélation avec moss et Hervé.

Tableau III-3: L'indice de réfraction n calculé par les différentes relations et les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semi-conducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.

Matériau	E_g (eV)		n			
	Cal.	Autres	Moss	Ravindra	Hervé	Autres
ZnTe	2.39087	2.38, 2.57 ^{a, b}	2.59248915	2.6016606	2.55256092	2.70 ^(1,2) 2.88 ⁽³⁾ 2.70 ⁽⁴⁾ 2.7 ⁽⁵⁾
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	2.49175 [*] 2.38734 ^{***}	-	2.56584225 ^{**} 2.593448 ^{***}	2.53911686 [*] 2.6038516 ^{***}	2.51561362 [*] 2.5538804 ^{***}	-
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	2.69350 [*] 2.53401 ^{***}	-	2.51638248 ^{**} 2.55507599 ^{***}	2.41402938 [*] 2.5129133 ^{***}	2.4456728 [*] 2.50053643 ^{***}	-
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	2.87565 [*] 2.72124 ^{***}	-	2.47555131 ^{**} 2.50994583 ^{***}	2.301097 [*] 2.3968331 ^{***}	2.38670259 [*] 2.43644741 ^{***}	-
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	2.80510 [*] 2.86087 ^{***}	-	2.49097159 ^{**} 2.47874215 ^{***}	2.34483676 [*] 2.3102597 ^{***}	2.40909635 [*] 2.39134827 ^{***}	-
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	2.73455 [*] 2.77107 ^{***}	-	2.50688443 ^{**} 2.49858606 ^{***}	2.38857652 [*] 2.3659405 ^{***}	2.4320501 [*] 2.42010007 ^{***}	-
MgTe	2.69928	2.5 ^a	2.51503455	2.4104464	2.44374312	2.65 ^(1,2) 2.51 ⁽³⁾ 2.12 ⁽⁴⁾

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

(1) : Ref [14].

(2) : Ref [15].

(3) : Ref [16].

(4) : Ref [17].

(5) : Ref [18].

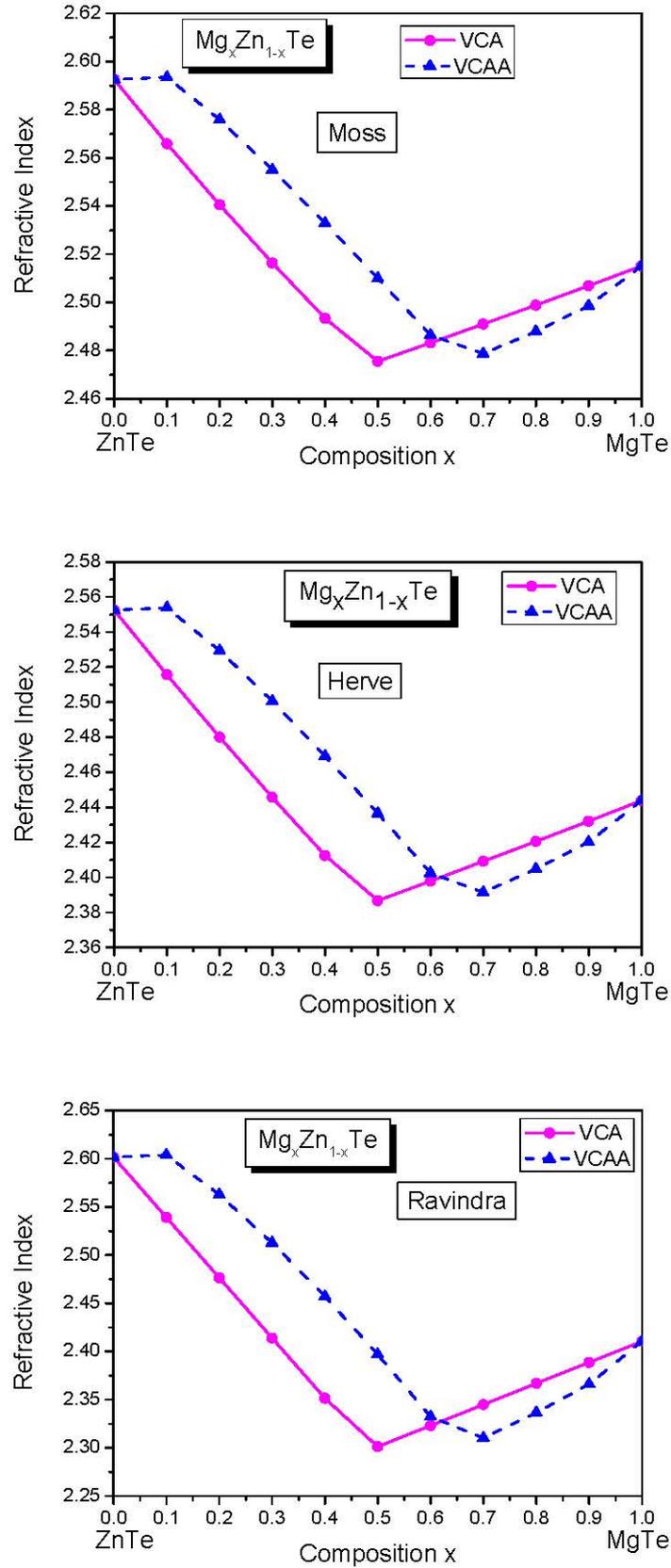


Figure III-2: La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculé par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

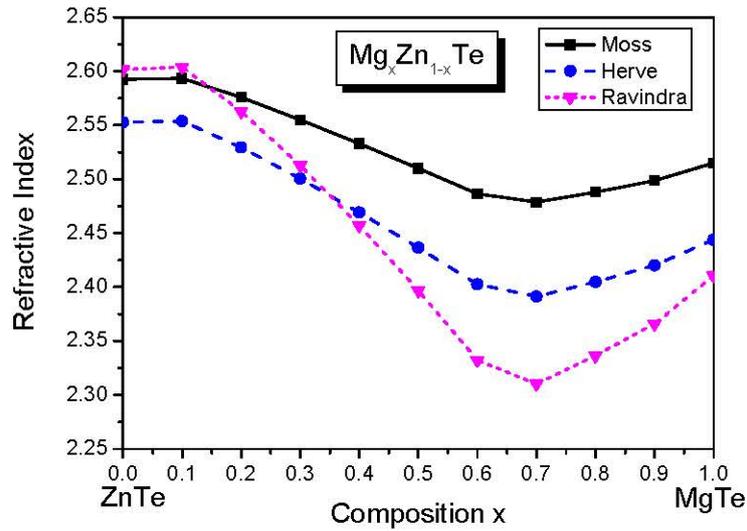


Figure III-3: Comparaison de la variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Magnésium, calculé avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Les expressions analytiques de ces courbes pour les trois modèles avec et sans désordre sont comme suite :

Moss:

$$n = 2.5953827 - 0.3557345x + 0.2821871x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 7})$$

$$n = 2.6139611 - 0.3011178x + 0.1893655x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 8})$$

Ravindra :

$$n = 2.6136982 - 0.9175921x + 0.7307979x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 9})$$

$$n = 2.657793 - 0.76005x + 0.4766689x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 10})$$

Hervé :

$$n = 2.5573108 - 0.5051124x + 0.4010462x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 11})$$

$$n = 2.5831574 - 0.4252292x + 0.2671942x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 12})$$

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

Nous observons que la valeur du bowing pour l'indice de réfraction n calculée avec la relation de Ravindra est la plus grande comparativement avec les valeurs du bowing pour l'indice de réfraction n calculées avec les deux autres relations.

III-3- 2- Les constantes diélectriques:

III-3- 2- 1-La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} :

D'après la relation (II-39) qui est présenté dans le chapitre II on peut calculer la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} pour les trois modèles (Moss, Hervé et Ravindra) en fonction de la concentration x de Magnésium dans l'intervalle [0-1] des alliages semi-conducteurs ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$. Le tableau (III-4) présente les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel. Les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en employant les relations de Moss, de Ravindra et ses collaborateurs, et de Hervé et ses collaborateurs, respectivement, sont 6.72, 6.76, 6.51, pour $ZnTe$; 6.32, 5.81, 5.97 pour $MgTe$. Noter que pour $ZnTe$, le décalage de l'accord entre nos résultats et les données connues est dans les intervalles [8.38% - 6.66% -3.22%- 1.20%- 7.69%], [9.03% - 6.11% - 3.84% - 1.80% 7.14%] et [5% - 9.58%- 0%- 1.95%- 10.57%] en employant les relations de Moss, Ravindra et ces collaborateurs, Hervé et Vandamme respectivement. Pour $MgTe$, nos résultats sont conformes aux données connues de [8.58% - 40.44% - 26.40% et 40.44%], [70.88% - 29.11% - 16.20% et 29.11%] et [75.58% - 32.66% - 19.40% et 32.66]. Donc nos résultats sont en bon accord avec les autres travaux disponibles. Il est clair d'après ces comparaisons que l'accord est bon entre les résultats obtenus et les données connues (voir tableau (III-4)).

La figure III-4 représente la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations avec et sans désordre.

Dans cette figure, nous observons que les courbes sont presque identiques et ces variations sont non linéaires. On remarque également que l'effet du désordre augmente la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} vers une concentration ($x=0.6$) puis l'inverse par la suite 'jusqu' à ($x=1$) en allant du composé $ZnTe$ ($x=0$) vers le composé $MgTe$ ($x=1$), une autre remarque importante qu'on peut soulever lorsqu'on ne tient pas compte de l'effet de désordre que la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} diminue non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium jusqu' au point de concentration égal à ($x=0.5$) puis il commence à augmenter jusqu' à ce que la concentration attint à ($x=1$). Et lorsque on prend en considération l'effet de désordre on remarque que la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} diminue avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium jusqu' au point de concentration égal à ($x=0.7$) puis il commence à augmenter jusqu' à ce que la concentration soit égal à ($x=1$).

Pour la figure III-5, qui représente la comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$. On remarque qu'il y a une diminution non linéaire de la constante

diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} avec l'augmentation de la concentration x de magnésium jusqu' à ($x=0.7$), puis il augmente ensuite jusqu' au point de concentration ($x=1$) pour les trois relations.

On signale une constatation particulière pour la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} pour des concentrations supérieures à $x=0.15$ de Magnésium. À première vue, il y avait une corrélation avec Moss et Hervé.

Tableau III-4: La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.

Matériau	E_g (eV)	ϵ_{∞}				
	Cal.	Moss	Ravindra	Hervé	Adachi	Autres
ZnTe	2.39087	6.72100002	6.76863788	6.51556727	7.8649646	6.2 ⁽¹⁾ 7.2 ⁽¹⁾ 6.51 ⁽²⁾ 6.64 ⁽³⁾ 7.28 ⁽⁴⁾
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	2.49175* 2.38734***	6.58354648* 6.72597251***	6.44711443* 6.78004299***	6.32831189* 6.52230507***	7.72171926* 7.86998262***	-
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	2.69350* 2.53401***	6.33218081* 6.52841333***	5.82753785* 6.31473312***	5.98131543* 6.25268243***	7.43522858* 7.66170459***	-
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	2.87565* 2.72124***	6.12835429* 6.29982806***	5.2950474* 5.74480881***	5.69634927* 5.93627597***	7.176577* 7.3958435***	-
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	2.80510* 2.86087***	6.20493946* 6.14416267***	5.49825943* 5.33729986***	5.80374524* 5.71854653***	7.27675516* 7.19756253***	-
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	2.73455* 2.77107***	6.28446954* 6.24293229***	5.70529779* 5.59767454***	5.91486767* 5.85688433***	7.37693332* 7.32508957***	-
MgTe	2.69928	6.32539876	5.81025185	5.97188042	7.4270224	3.4 ⁽¹⁾ 4.5 ⁽¹⁾ 5 ⁽²⁾ 4.5 ⁽⁵⁾

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

(1) : Ref [18].

(2) : Ref [19].

(3) : Ref [20].

(4) : Ref [21].

(5) : Ref [22].

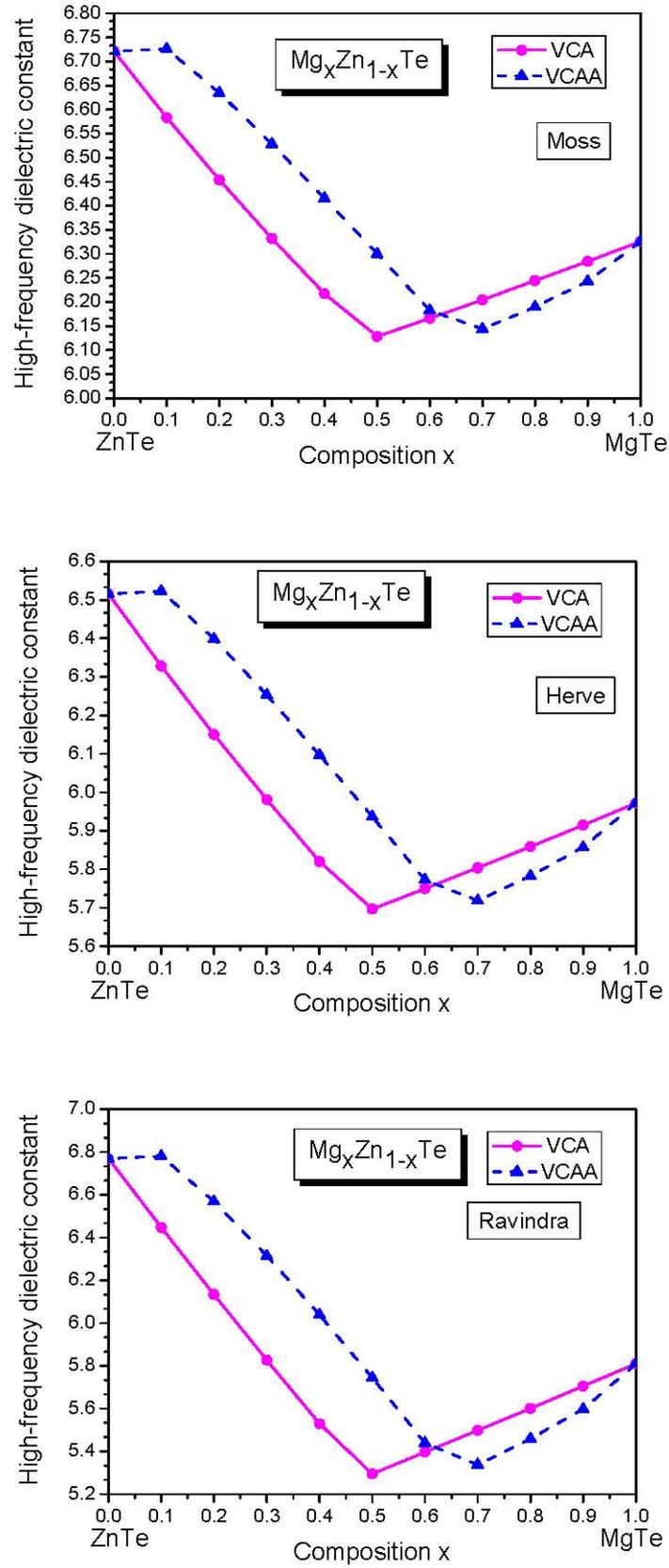


Figure III-4: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

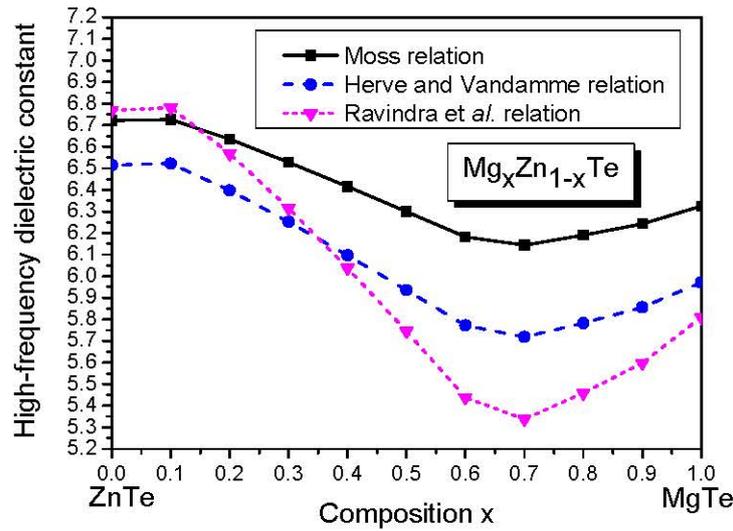


Figure III-5: Comparaison de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée par les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Les expressions analytiques de ces courbes pour les trois modèles avec et sans désordre sont comme suite :

Moss:

$$\epsilon_{\infty} = 6.7338187 - 1.8014167x + 1.4278755x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 13})$$

$$\epsilon_{\infty} = 6.8294273 - 1.5315185x + 0.9637175x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 14})$$

Ravindra :

$$\epsilon_{\infty} = 6.8160013 - 4.4920611x + 3.5695697x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 15})$$

$$\epsilon_{\infty} = 7.0415958 - 3.7630047x + 2.3627814x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 16})$$

Hervé :

$$\epsilon_{\infty} = 6.535353 - 2.4921588x + 1.976435x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III- 17})$$

$$\epsilon_{\infty} = 6.6659265 - 2.1113158x + 1.3277482x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III- 18})$$

Nous notons que la valeur du bowing pour la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée avec la relation de Ravindra est la plus grande comparativement avec les valeurs du bowing pour la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée avec les deux autres relations. On observe aussi que, les paramètres de courbure (Bowling) en utilisant les différentes relations sont positifs et ils diminuent lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre mais ces diminutions sont faibles.

Ainsi on note que, la valeur du bowing de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculée avec la relation de Moss avec désordre est très faible comparativement avec ceux calculées avec les deux autres relations.

III-3-2-2- La constante diélectrique statique ϵ_0 :

Pour calculer la constante diélectrique statique ϵ_0 , nous avons utilisé le model de Harrison qui relie la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ avec la constante diélectrique statique ϵ_0 (eq. II- 40).

Le tableau III-7 regroupe nos calculs concernant les valeurs de la constante diélectrique statique ϵ_0 avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs $ZnTe$, $MgTe$ et leurs alliages ternaires $Mg_xZn_{1-x}Te$ et d'autres résultats disponibles.

Le décalage de l'accord entre nos résultats et les autres calculs pour le composé binaire $ZnTe$ en utilisant les relations de Moss, de Ravindra et de Hervé, est respectivement, dans les intervalles [18.56% - 5.42% - 0.5%], [19.24% - 6.02% - 1.14%] et [15.85% - 3.21% - 1.72%], et pour le composé binaire $ZnTe$, les intervalles sont [5.36% - 1.49% - 1.46%], [2.42% - 1.32% - 1.29%] et [2.49% - 1.38% - 1.34%] pour le composé binaire $MgTe$.

La figure III-6 représente La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de Magnésium, calculée par les différentes relations avec et sans désordre de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Dans cette figure, nous observons que les courbes sont presque identiques et la constante diélectrique statique ϵ_0 augmente non linéairement en fonction de la concentration x de Magnésium, pour les trois modèles. On constate aussi, que l'effet du désordre fait diminuer la constante diélectrique statique ϵ_0 en allant du composé $ZnTe$ ($x=0$) vers le composé $MgTe$ ($x=1$), mais cet effet est très faible et on peut le négligé pour les concentrations inférieur à $x=0.4$.

La figure III-7 représente la comparaison de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$. Nous observons le même comportement de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 pour les trois modèles et cette variation est presque négligeable pour les concentrations de Magnésium inférieur à $x=0.3$ pour les modèles de Moss et de Hervé et pour les concentrations de Magnésium inférieur à $x=0.4$ pour le modèle de Ravindra.

La figure III-8 représente la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium, calculées par les différentes relations avec désordre de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$. D'après cette figure on peut noter que la

variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium est plus importante que celle de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ qui est presque négligeable.

Tableau III-5: La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec les différentes relations des composés binaires semi-conducteurs MgTe, ZnTe et leurs alliages.

Matériau	E _g (eV)	ϵ_0				
	Cal.	Moss	Ravindra	Hervé	Adachi	Autres
ZnTe	2.39087	8.75818001	8.80604727	8.55175802	11.1561204	7.384 ⁽¹⁾ 8.3 ⁽²⁾ 8.7 ⁽²⁾
Mg _{0.1} Zn _{0.9} Te	2.49175 [*] 2.38734 ^{***}	8.75432383 [*] 8.76019565 ^{***}	8.61481941 [*] 8.81450565 ^{***}	8.4933415 [*] 8.55562605 ^{***}	10.8454192 [*] 11.1670046 ^{***}	-
Mg _{0.3} Zn _{0.7} Te	2.69350 [*] 2.53401 ^{***}	9.05300505 [*] 8.78291909 ^{***}	8.49875081 [*] 8.5620152 ^{***}	8.66764622 [*] 8.49786682 ^{***}	10.2240169 [*] 10.7152466 ^{***}	-
Mg _{0.5} Zn _{0.5} Te	2.87565 [*] 2.72124 ^{***}	9.83506994 [*] 9.12741886 ^{***}	8.80224745 [*] 8.50947636 ^{***}	9.29963154 [*] 8.7226504 ^{***}	9.662998 [*] 10.1385901 ^{***}	-
Mg _{0.7} Zn _{0.3} Te	2.80510 [*] 2.86087 ^{***}	11.6526123 [*] 10.1427843 ^{***}	10.6077751 [*] 9.11019683 ^{***}	11.0594405 [*] 9.5980995 ^{***}	9.88028584 [*] 9.7085159 ^{***}	-
Mg _{0.9} Zn _{0.1} Te	2.73455 [*] 2.77107 ^{***}	14.7788044 [*] 12.9395216 ^{***}	13.6832827 [*] 11.8758545 ^{***}	14.0796908 [*] 12.3031457 ^{***}	10.0975737 [*] 9.98512387 ^{***}	-
MgTe	2.69928	17.2219935	16.0812078	16.439132	10.2062176	4.704 ⁽¹⁾ 6.9 ⁽²⁾ 7.0 ⁽²⁾

* Nos calculs sans désordre.

*** Nos calculs avec désordre.

(1) : Ref [23].

(2) : Ref [18].

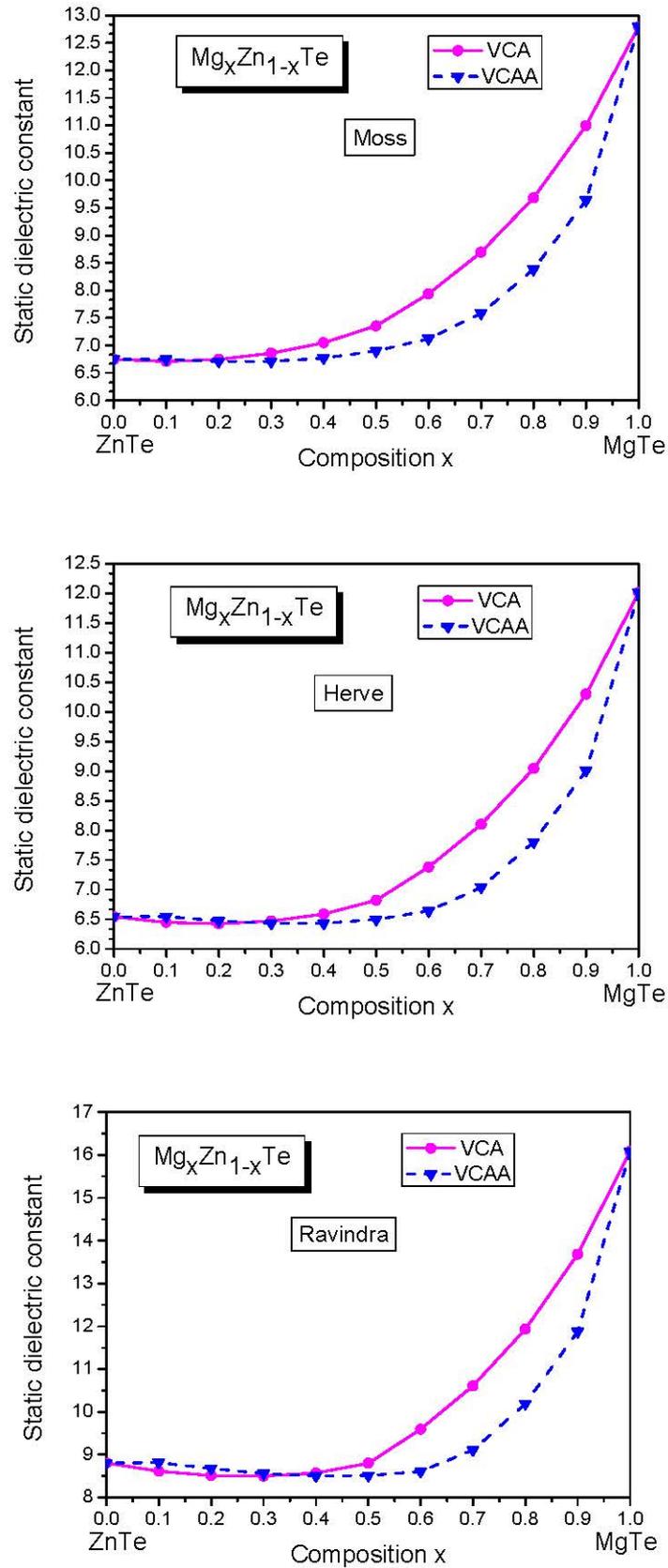


Figure III-6: La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de Magnésium, calculée par les différentes relations: sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

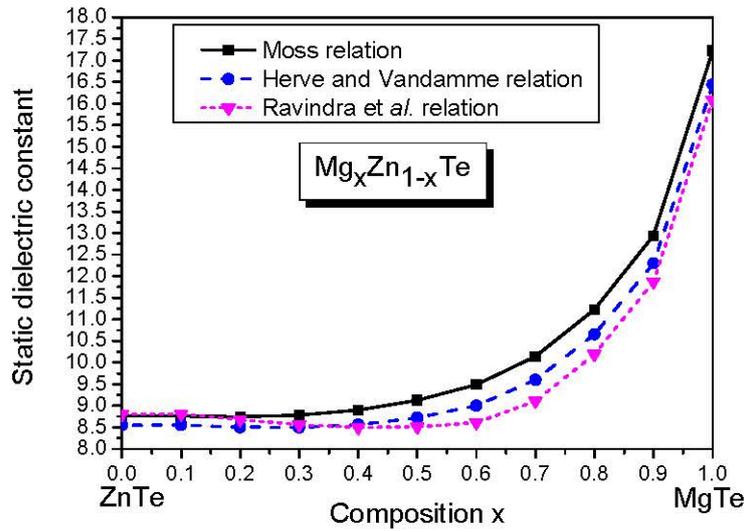


Figure III-7: Comparaison de la variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium, calculée avec les différentes relations de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

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

Moss:

$$\epsilon_0 = 9.0662213 - 4.6610085x + 12.4156157 x^2 \quad (VCA) \quad (III- 19)$$

$$\epsilon_0 = 9.465022 - 8.7558742x + 15.1017195 x^2 \quad (VCAA) \quad (III- 20)$$

Ravindra :

$$\epsilon_0 = 9.1646296 - 7.4901425x + 14.047824 x^2 \quad (VCA) \quad (III- 21)$$

$$\epsilon_0 = 9.6561213 - 10.6123796x + 15.5552754 x^2 \quad (VCAA) \quad (III- 22)$$

Hervé :

$$\epsilon_0 = 8.8623645 - 5.3044399 x + 12.5040261 x^2 \quad (VCA) \quad (III- 23)$$

$$\epsilon_0 = 9.2772102 - 9.0224428x + 14.7962411 x^2 \quad (VCAA) \quad (III- 24)$$

On note que l'effet de désordre compositionnel augmente la valeur du bowing pour la constante diélectrique statique ϵ_0 calculé avec les trois relations.

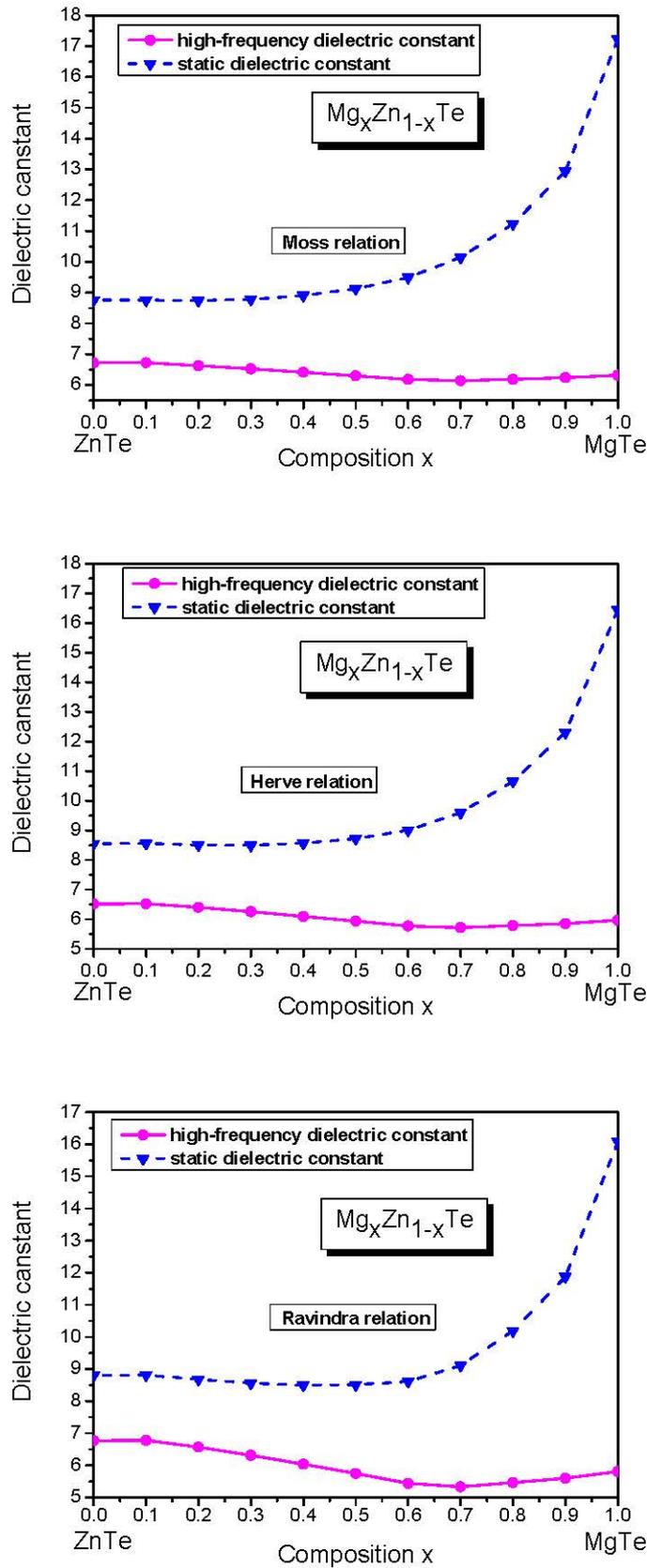


Figure III-8: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de Magnésium, calculées par les différentes relations avec désordre de l'alliage $Mg_xZn_{1-x}Te$.

Les expressions analytiques de la variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium sont données par les relations suivantes :

$$\epsilon_{\infty} = 6.8294273 - 1.5315185x + 0.9637175x^2 \quad (\text{Moss}) \quad (\text{III- 25})$$

$$\epsilon_{\infty} = 7.0415958 - 3.7630047x + 2.3627814x^2 \quad (\text{Ravindra}) \quad \text{III- 26}$$

$$\epsilon_{\infty} = 6.6659265 - 2.1113158x + 1.3277482x^2 \quad (\text{Hervé}) \quad (\text{III- 27})$$

$$\epsilon_{\infty} = 7.9935258 - 1.7407597x + 1.0917256x^2 \quad (\text{Adachi}) \quad (\text{III- 28})$$

$$\epsilon_0 = 9.465022 - 8.7558742x + 15.1017195x^2 \quad (\text{Moss}) \quad (\text{III- 29})$$

$$\epsilon_0 = 9.6561213 - 10.6123796x + 15.5552754x^2 \quad (\text{Ravindra}) \quad (\text{III- 30})$$

$$\epsilon_0 = 9.2772102 - 9.0224428x + 14.7962411x^2 \quad (\text{Hervé}) \quad (\text{III- 31})$$

$$\epsilon_0 = 11.4349716 - 3.7757324x + 2.3679682x^2 \quad (\text{Adachi}) \quad (\text{III- 32})$$

On remarque que le paramètre de courbure de la variation de la constante statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium calculée par la relation de Adachi est trop faible comparativement à celle calculée par les trois relations (Moss, Ravindra et Hervé).

Références :

- [1] K.S.A. Butcher et T.L. Tansley, *Superlattices and Microstructures* 38, (2005), 1.
- [2] V. Tomashyk, P. Feychuk, L. Shcherbak, *Ternary Alloys Based on II–VI Semiconductor Compounds*, second ed, CRC Press, New York, (2014).
- [3] M.C. Tamargo, *II–VI semiconductors materials and their applications optoelectronic properties of semiconductors and superlattices*, Taylor and Francis, vol 12, (2002).
- [4] I. Hernandez-Calderon, in: M.C.Tamargo (Ed.), *II-VI Semiconductor Materials and their Applications*, Taylor and Francis, New York, (2002), 113.
- [5] F. Mezrag, mémoire de magister, université de M'Sila (Algérie) , (2003).
- [6] T. Kobayasi and H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci, Tokyo University* 2, (1993) ,7.
- [7] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* 17 ,(1984) ,6287.
- [8] N. Bouarissa and M. Boucenna, *Phys. Scr.* 79, (2009) ,15701.
- [9] S. C. Jain. M. Willander. J. Narayan and R. Van. Overstraeten, *J. App. Phys.*, (2000), 87, 965.
- [10] S. Adachi, *Proprieties of semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons , (2009).
- [11] S. Kasap, P. Capper (Eds), *Springer hand book of electronic and photonic material*, Springer Science, (2017).
- [12] L. Hannachi, thèse de doctorat, université de Sétif 1 ,(Algérie), (2010).
- [13] F. Abelés, *optical Properties of Solids*, North-Holland, Pblishing Company, (1972).
- [14] R. R. Reddy, M. Ravi Kumar, T.VR. Rao, *Infrared Phys*, No.1, (1993), 34, 103.
- [15] T. S. Moss, G. J. Burrell and B. Ellis, *Semiconductor Opto-Electronics*, (Butterworths, London (1973).
- [16] M. A. Salem, *Chinese J. Phys.* **41**, (2003), 288.
- [17] R.R. Reddy, Y. Nazeer Aharnmed, P. Abdul Azeem, K. Rama Gopal, B. Sasikala Devi and T.V.R. Rao, *Def. Sci. J.* **53** ,(2003) ,239.
- [18] Sadao Adachi, *Handbook on physical Properties of semiconductors, II-VI Compound Semiconductors*, Kluwer Academic Publishers, New York,(2004).
- [19] S Mnasri, S Abdi-Ben Nasrallah, N Sfina, N Bouarissa and M Said, *Semicond. Sci. Technol.* **24** ,(2009) ,095008.
- [20] M. Romcevic, N. Romcevic, *J. Alloys Compounds* **416**, (2006), 64.
- [21] D. T. F. Marple, *J. Appl. Phys.* **35**, (1964),539.
- [22] E. Oh, C. Parks, I. Miotkowski, M. Dean Sciacca, A. J. Mayur, and A. K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **48** ,(1993) ,15040.
- [23] Guo Lei, Hu Ge, Feng Wen-Jiang, Zhang Sheng-Tao, *Acta Phys. -Chim. Sin.* **29** ,(2013) ,929.

Conclusion générale

Conclusion générale

Notre travail consiste à étudier les propriétés optiques et diélectriques des composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ et leurs alliages ternaires $Mg_x Zn_{1-x}Te$, cristallisée dans la structure zinc-blende tel que : le gap d'énergie E_g , l'indice de réfraction n , la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 .

Dans nos calculs, nous avons utilisé la méthode de pseudopotentiel empirique locale (E.P.M), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) avec et sans tenir compte l'effet du désordre compositionnel, et combinées avec le modèle des orbitales liées de Harrison (bond-orbital model).

La dépendance de la concentration x de Magnésium, sur les propriétés optiques et diélectriques des alliages ternaires $Mg_x Zn_{1-x}Te$ et ces composés binaires $ZnTe$, $MgTe$ a été étudiée sur toute la gamme de la composition [0-1].

Les résultats acquis, nous ont permis de tirer les conclusions suivantes :

- Le gap d'énergie fondamental de l'alliage augmente non linéairement en fonction de la concentration x de Magnésium jusqu'à $x = 0.5$, après ils diminuent pour les concentrations $x > 0.5$, et l'effet de désordre est clair et il fait diminuer le gap d'énergie fondamental jusqu'à la concentration $x = 0.7$, après il augmente pour les concentrations supérieures à $x = 0.7$.
- L'indice de réfraction n et la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ diminuent non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium jusqu'au point de concentration égal à ($x=0.7$), puis il commence à augmenter jusqu'à ce que la concentration soit égal à ($x=1$) pour les trois relations de Moss, de Ravindra et de Hervé et l'effet du désordre fait augmenter ces deux paramètres. Cette augmentation est importante pour les faibles concentrations et elle devient moins importante pour la concentration supérieure à $x=0.6$.
- La constante diélectrique statique ϵ_0 augmente non linéairement avec l'augmentation de la concentration x de Magnésium pour les trois modèles (Moss, Ravindra et Hervé) et l'effet du désordre fait diminuer la constante diélectrique statique ϵ_0 en allant du composé $ZnTe$ ($x=0$) vers le composé $MgTe$ ($x=1$), mais cet effet est très faible et on peut le négliger pour les concentrations inférieures à $x=0.4$.

- La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration x de Magnésium est plus importante que celle de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ qui est presque négligeable.

En générale, nos résultats pour les composés binaires $ZnTe$ et $MgTe$ sont en accord raisonnable avec les ressources disponibles des données expérimentales et théoriques. Pour les quantités physiques des alliages ternaires semi-conducteurs $Mg_x Zn_{1-x}Te$ d'intérêt, lorsque les données ne sont pas disponibles dans la littérature, nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de références pour les futurs travaux.