



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Computationnelle

Par :

**Mme SEKKAL-HADDOUCHE Asma Farah
Ep HAMIMED**

Sur le thème

**Étude Numérique des propriétés Optoélectroniques des alliages
semi-conducteur ternaire cubiques à base de Strontium.**

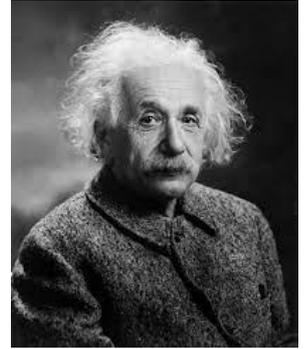
Soutenue publiquement le 19/06/2021 devant le jury composé de :

| | | |
|-----------------------------|--------------------------------------|-----------|
| Mr BEKHECHI Smaine | Professeur à l'Université de Tlemcen | Président |
| Mr BRAHMI Badr-Eddine Nabil | MCA à l'Université de Tlemcen | Encadreur |
| Mr KARAOUZENE Lotfi Ibrahim | MCB à l'Université de Tlemcen | Examineur |

*Laboratoire Automatique Tlemcen (LAT)
Tlemcen - Algérie*

" N'essayez pas de devenir un homme qui a du succès. Essayez de devenir un homme qui a de la valeur. "

Albert Einstein (1879-1955)



Dédicace

Toutes les lettres ne sauraient trouver les mots qu'il faut... Tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude, l'amour, le respect, la reconnaissance... Aussi, c'est tout simplement que

Je dédie ce travail :

A l'âme de « Yara »

Que j'aurai tant aimé que tu sois présente

A ma grande mère bien aimée « Zohra » et à mes très chers parents « Boucif » et « Fouzia »

Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous. Vous avez su m'inculquer le sens de la responsabilité, de la confiance en soi face aux difficultés de la vie. Vos conseils ont toujours guidé mes pas vers la réussite. Vous n'avez cessé de me soutenir moralement ainsi que matériellement et de m'encourager durant toutes les années de mes études. Je vous dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serai demain et je ferai toujours de mon mieux pour rester votre fierté et ne jamais vous décevoir.

A mon très cher trésor « Ilyes »

Mon petit frère, tu es ma joie, mon bonheur, le soleil qui illumine ma vie. J'espère que mon mémoire sera pour toi une source de fierté et qu'il sera un exemple à suivre. Que Dieu te garde et te protège pour moi. Je t'aime plus que tout au monde.

A mon très cher mari « Yassine »

Quand je t'ai connu, j'ai trouvé mon âme sœur et la lumière de mon chemin. Tes sacrifices, ton soutien, ta gentillesse sans égal m'ont permis de réussir mes études. Sans ton aide, tes conseils et tes encouragements ce travail n'aurait vu le jour. Que dieu réunisse nos chemins pour un long commun serein et que ce travail soit témoignage de ma reconnaissance et de mon sincère amour et attachement.

A ma très chère belle famille

Je ne pourrais jamais exprimer le respect que j'ai pour vous. J'implore Dieu, tout puissant, de vous accorder une bonne santé, une longue vie et beaucoup de bonheur.

A toute ma famille

Que j'aime tellement

A mes amis et collègues

A tout ceux qui m'ont donné la force de continuer

Afin de n'oublier personne, je remercie infiniment tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin durant la réalisation de ce travail.

Asma Farah

Remerciements

Que dieu soit loué pour innombrables faveurs, en particulier celle de la connaissance qui illumine nos esprits.

*J'exprime tout d'abord mes sincères remerciements à monsieur **BRAHMI Badr-Eddine Nabil**, Maître de conférences au département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen, et membre du laboratoire Physique Théorique, pour la proposition de ce sujet et pour m'avoir soutenue tout au long de cette période de mémoire de master, qu'il trouve ici l'expression de toute ma reconnaissance pour la confiance qu'il m'a honorée en acceptant la direction de ce mémoire et a fait preuve de patience à mon égard. Je le remercie d'être si généreux et joyeux, disponible et encourageant à tout moment, soucieux pour ses étudiants. J'espère que l'avenir nous offrira de nouvelles opportunités de collaborations scientifiques fructueuses.*

*Un merci bien particulier adressé Mademoiselle **ZAIR Asma**, Doctorante au département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen, pour ses remarques, son dévouement, ses encouragements, sa disponibilité et le soutien qu'elle a prodigué au cours de l'élaboration de ce travail.*

*Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Monsieur **BEKHECHI Smaïne** Professeur au département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Tlemcen, qui nous a fait un grand honneur de présider le jury de cette soutenance. Qu'il accepte l'expression de mon entière reconnaissance.*

*Je remercie également Monsieur **KARAOUZENE Lotfi Ibrahim** Maître de conférences à l'université de Tlemcen pour l'honneur qu'il m'a fait d'accepter d'examiner ce travail. Qu'il trouve ici l'expression de ma respectueuse gratitude.*

Enfin je remercie tous ceux qui ont apporté leur contribution de près ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.

Asma Farah

Tableau des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction Générale | 6 |
| Références | 9 |
| Chapitre I : Généralités sur les matériaux | 10 |
| I. Types de matériaux | 12 |
| II. Liaisons chimiques | 17 |
| II.1. Liaison ionique | 17 |
| II.2. Liaison covalente | 17 |
| II.3. Liaison métallique | 18 |
| III. Quelques propriétés physiques des matériaux | 20 |
| III.1. Propriétés électroniques | 20 |
| III.2. Propriétés magnétiques | 21 |
| III.3. Propriétés optiques | 22 |
| IV. Milieux matériels | 23 |
| IV.1. Conducteurs | 23 |
| IV.2. Isolants | 23 |
| V. Conclusion | 24 |
| Références | 25 |
| Chapitre II : Semi-conducteurs | 26 |
| I. Alliage semi-conducteur | 28 |
| I.1. Classification des alliages semi-conducteurs | 28 |
| I.2. Approximation de cristal virtuel linéaire (VCA) | 28 |
| I.3. Procédure de calcul de la propriété physique | 28 |
| II. Notion de bandes d'énergie | 29 |
| III. Types de semi-conducteurs | 30 |
| III.1. Semi-conducteur intrinsèque | 30 |
| III.2. Semi-conducteur extrinsèque | 31 |
| IV. Propriétés électroniques | 33 |
| IV.1. Gap directe et gap indirecte | 33 |
| IV.2. Transition inter bandes | 33 |
| IV.3. Structure de bandes | 35 |

| | |
|--|-----------|
| V. Propriétés optiques | 36 |
| V.1. Absorption des photons | 36 |
| V.2. Emission spontanée de photons | 36 |
| V.3. Emission stimulée | 36 |
| VI. Semi-conducteurs II-VI | 37 |
| VI.1. Propriétés structurales des semi-conducteurs II-VI | 37 |
| VI.2. Propriétés optoélectroniques | 38 |
| VII. Autres types de semi-conducteurs | 40 |
| VII.1. Semi-conducteurs III-V | 40 |
| VII.2. Semi-conducteurs IV-IV | 40 |
| VIII. Méthodes de calculs | 41 |
| VIII.1. Théorie de la fonctionnelle de la densité | 41 |
| VIII.2. Approche Becke Johnson modified | 41 |
| IX. Code WIEN2K | 42 |
| X. Conclusion | 43 |
| Références | 44 |
| Chapitre III : Résultats et discussions | 46 |
| I. Propriétés structurales | 48 |
| II. Propriétés électroniques | 51 |
| III. Propriétés optiques | 54 |
| III.1. Fonction diélectrique complexe $\epsilon(\omega)$ | 56 |
| III.2. Conductivité optique $\sigma(\omega)$ | 59 |
| III.3. Coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ | 60 |
| III.4. Indice de réfraction $n(\omega)$ | 62 |
| III.5. Coefficient de réflexion $R(\omega)$ | 63 |
| IV. Interprétations des résultats | 66 |
| V. Conclusion | 68 |
| Références | 69 |
| Conclusion générale | 70 |
| Annexe | 73 |

Liste des figures

| | |
|---|-----------|
| Figure I.1 : Les grandes familles de matériaux | 12 |
| Figure I.2 : Différentes possibilités d'obtention des matériaux composites | 14 |
| Figure I.3 : Distribution du module de Young pour les différentes classes des matériaux | 16 |
| Figure I.4 : Mise en évidence d'une liaison ionique (cas de Fluorure de Lithium) | 17 |
| Figure I.5 : Représentation de la liaison covalente entre deux atomes de chlore (a) Avant la liaison, (b) les deux atomes à l'état lié | 18 |
| Figure I.6 : Liaison métallique du sodium : des ions positifs baignent dans un alliage d'électrons délocalisés | 19 |
| Figure I.7 : Courbe de première magnétisation et boucle d'hystérésis d'un matériau ferromagnétique | 22 |
| Figure I.8 : Principaux types d'interactions entre un rayonnement lumineux monochromatique et une lame de matière solide | 23 |
| Figure II.1 : Position des bandes d'énergie pour un métal, un semi-conducteur et un isolant | 30 |
| Figure II.2 : Présentation schématique du silicium dopé n. | 31 |
| Figure II.3 : Présentation schématique du silicium dopé p | 32 |
| Figure II.4 : Absorption optique en fonction de l'énergie des phonons. | 34 |
| Figure II.5 : Transitions inter bandes (a) gap directe (b) gap indirecte | 35 |
| Figure II.6 : Structures cristallographiques des composés semi-conducteurs II.VI | 38 |
| Figure II.7 : Représentation simple de la structure de bande d'un semi-conducteur massif | 39 |
| Figure II.8 : Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semiconducteurs. | 40 |
| Figure II.9: Organigramme de code Wien2k | 43 |
| Figure III.1 : Représentation de la structure (a) $\text{SrS}_{0.75}\text{Se}_{0.25}$, (b) $\text{SrS}_{0.50}\text{Se}_{0.50}$ et (c) $\text{SrS}_{0.25}\text{Se}_{0.75}$ | 50 |
| Figure III.2 : Variation du paramètre de maille a_0 et du module de compression B en fonction de la concentration x. | 50 |
| Figure III.3 : Première zone de Brillouin d'un réseau de FCC. | 51 |

| | |
|--|-----------|
| Figure III.4 : Variation de l'énergie de gap (Γ) en fonction de la concentration x. | 52 |
| Figure III .5 : Structure de Bande calculée à gauche par GGA-PBE à droite par Tb-mBJ | 53 |
| Figure III.6 : Fonction diélectrique partie réelle : (a) par GGA-PBE, (b) par Tb-mBJ et imaginaire (c) par GGA-PBE, (d) par Tb-mBJ. | 57 |
| Figure III.7 : Conductivité optique partie réelle :(a) pour GGA-PBE, (b) pour Tb-mBJ et imaginaire : (c) pour GGA-PBE, (d) pour Tb-mBJ. | 59 |
| Figure III.8 : Absorption : (a) par GGA-PBE et (b) par Tb-mBJ | 61 |
| Figure III.9 : Indice de réfraction : (a) pour GGA-PBE, (b) pour Tb-mBJ | 62 |
| Figure III.10 : Réflexion : (a) pour GGA-PBE, (b) pour Tb-mBJ | 63 |
| Figure III.11 : Variation des calculs des propriétés optiques en fonction de la concentration x de $\text{SrS}_{1-x}\text{Se}_x$ | 65 |

Liste des tableaux

| | |
|---|-----------|
| Tableau 1.1 : Quelques propriétés usuelles des grandes familles de matériaux | 13 |
| Tableau I.2 : Exemples des liaisons chimiques | 19 |
| Tableau II.1 : Extrait du tableau périodique des éléments chimiques | 38 |
| Tableau III.1 : Paramètre de maille a_0 , le module de compression B et la dérivée du module de compressibilité B' | 49 |
| Tableau III.2 : Calculs des énergies de gaps pour l'alliage $\text{SrS}_x\text{Se}_{1-x}$ | 52 |
| Tableau III.3 : Valeurs des pics d'énergie, fonction diélectrique, indice de réfraction, indice de réflexion, coefficient d'absorption et conductivité optique | 55 |
| Tableau III.4 : Valeurs de courbure pour les paramètres structuraux, électronique et optiques l'alliage $\text{SrS}_{1-x}\text{Se}_x$ | 64 |

Introduction Générale

Introduction Générale

L'homme se sert de matériaux depuis qu'il construit son habitat, ses outils, ses armes et ses bijoux. Sa capacité à créer des matériaux utiles, plus efficaces pour les tâches journalières constitue depuis toujours un avantage social important et une source de puissance et de son contrôle environnemental. C'est pourquoi, de tout temps, les hommes qui savaient créer des matériaux nouveaux à partir de matières banales bénéficient d'un grand prestige. Pourtant on considère généralement que la science des matériaux ne date que du début du XX^e siècle.[1]

Dans l'ensemble des matériaux, il y a deux classes : les conducteurs et les isolants (diélectriques). Cependant, vers 1833, Mr Faraday a remarqué qu'il existait des matériaux ne pouvant être classés dans aucune de ces deux catégories : les semi-conducteurs. Ces derniers ont des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. [2]

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.[2]

Les semi-conducteurs binaires composés des éléments du groupe *II* et *VI* ont généralement un large gap, cristallisent dans les structures, zinc-blende et rocksalte. Ces composés ont un impact technologique dans différentes applications en optoélectroniques et sont capables de fonctionner à température élevée. [3]

Dans l'alliage ternaire (semi-conducteurs *II-VI*) de la forme $AB_{1-x}C_x$, il est adéquat de savoir comment varie une propriété physique lorsque l'on passe d'un composé *AB* à un autre composé *AC* en faisant varier la concentration de l'élément *C* dans cet alliage, en effet plusieurs propriétés dépendent de cette variation. Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optiques, électroniques, structurales, etc....) des alliages ternaires, tel que l'approche du cristal virtuel (*VCA*) [4-5].

Les méthodes numériques remplacent progressivement les méthodes analytiques. Nous pouvons maintenant partir du premier principe de l'informatique quantique pour calculer avec précision les propriétés électroniques et structurelles des solides. Le développement de la technologie de simulation informatique a conduit à des recherches intéressantes dans le

domaine de la matière condensée, car il est désormais possible d'expliquer et de prédire les propriétés des solides qui ne pouvaient pas être testées auparavant.

Dans ce travail, nous effectuerons d'abord des recherches bibliographiques sur les matériaux en général, puis sur les semi-conducteurs afin de gagner une bonne position dans ce domaine. En second temps on va faire une étude numérique des propriétés structurales, électroniques et optiques. Pour contribuer à une meilleure compréhension des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs de type *II-VI* on va utiliser le code *WIEN2k* avec l'approximation du gradient généralisé de *Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE-GGA)* et la correction *Tb-mBJ (The Tran and Blaha modified Becke-Johnson potential)*. Enfin on fera une application sur les matériaux ternaire à base de Strontium pour montrer clairement l'efficacité de ce travail où on va le comparer à d'autres résultats, on termine notre travail par une conclusion générale et des perspectives.

Références

- [1] *HISTOIRE DE LA SCIENCE DES MATÉRIAUX* :
http://documents.irevues.inist.fr/bitstream/handle/2042/33878/ANM_2002_159.pdf?seq
- [2] GHEFIR, S. A. (2013). *Etude ab initio des propriétés structurales et électroniques des semi-conducteurs III-V à base de Phosphore (AlP, InP)* (Doctoral dissertation, Université Tlemcen).
- [3] BELGOUMRI, G. (2019). *Etude théorique des propriétés électroniques et optiques des alliages semiconducteurs binaires et/ou ternaires* (Doctoral dissertation, Université Batna).
- [4] AID, A. (2019). *Etude de quelques propriétés physiques de L'alliage $BxIn1-xSb$ en utilisant les méthodes de premiers principes* (Doctoral dissertation, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila).
- [5] M. Jaros, Rep. Prog. Phys. 48,1091 (1985)

Chapitre I

Généralités sur les matériaux

*C*hapitre I *Généralités sur les matériaux*

Toute la matière autour de nous est composée d'atomes et de molécules. Leurs propriétés s'expliquent par leur disposition et leurs relations. Pendant longtemps, les physiciens ont distingué les états solide, liquide et gazeux en fonction de l'apparition directe des corps autour de nous. La classification actuelle est basée sur la structure atomique du matériau et ne considère que deux états principaux : l'état désordonné et l'état ordonné.[1]

Dans un état désordonné, les atomes ou molécules qui composent une substance sont disposés de manière sensiblement aléatoire. Les gaz et liquides de l'ancienne classification entrent naturellement dans cette catégorie, mais les solides amorphes (comme le verre ou certains polymères) peuvent également être considérés comme des liquides à très haute viscosité. Au contraire, à l'état ordonné ou cristallin, les éléments constitutifs (atomes, ions ou molécules) sont régulièrement répartis dans trois directions dans l'espace. Ces matériaux sont parfois appelés « vrais solides ». La plupart des objets autour de nous entrent dans cette catégorie.[1]

I. Types de matériaux

Un matériau est tout produit (naturel ou artificiel) qui peut être utilisé pour fabriquer des objets. C'est aussi toute substance ou matière qui peut être mise en forme. Il peut être d'origine naturelle, tels que :

- Minéraux : ils sont extraits du sol (eau, sol, sable, etc.)
- Matière organique d'origine végétale (bois, coton, lin, etc.)
- Matière organique animale d'origine (laine, viande, lait, cornes ...)

Où d'origine artificielle : ils n'existent pas dans la nature. Il faut donc transformer des matériaux naturels en nouveaux matériaux. C'est ce qu'on appelle les matériaux de synthèse.

- Métaux extraits de minéraux (Cuivre (*Cu*), Zinc (*Zn*), Argent (*Ag*), Aluminium (*Al*), Plomb (*Pb*)...)
- Alliages fabriqués par mélange de plusieurs métaux (Bronze, Laiton, Zamak ...)
- Les plastiques que l'on crée à partir d'éléments naturels comme le bois, le charbon et le pétrole ... (PVC, Caoutchouc, Polystyrène, Polyamide, Nylon ...) [2]

Ces matériaux peuvent être regroupés en grandes familles selon l'organigramme suivant :

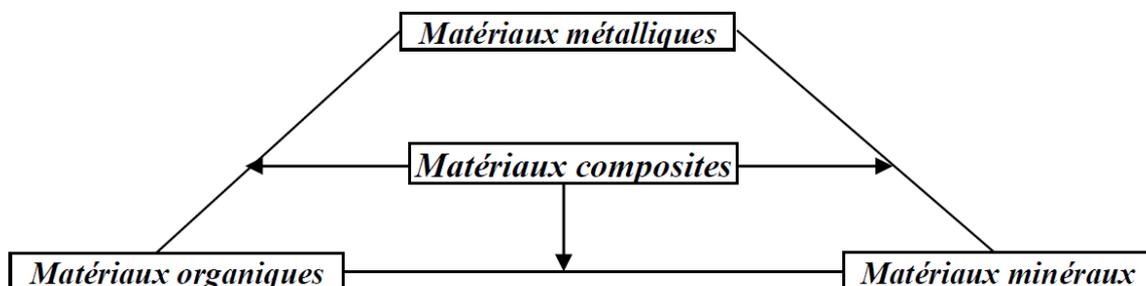


Figure I.1 : Les grandes familles de matériaux [2]

A l'usage, le choix des matériaux dépend de plusieurs critères :

- Propriétés mécaniques : limite élastique, dureté, élasticité, ténacité, ductilité, etc.
- Propriétés physiques et chimiques : densité, point de fusion, conductivité électrique et conductivité thermique, comportement à la corrosion, vieillissement, etc.
- Caractéristiques d'usinage : usinabilité, soudabilité, trempabilité, etc.
- Caractéristiques économiques : prix, disponibilité, expérience de l'industrie.

Le classement entre grandes familles de matériaux repose en grande partie sur le type de liaison entre les atomes. Il faut le considérer comme indicatif, le passage d'une catégorie à l'autre pouvant se faire en fonction de la composition chimique et des conditions de mise en œuvre (exemple des verres métalliques). Le tableau (I.1) donne une indication des principales propriétés usuelles des polymères, des céramiques et des alliages métalliques.[2]

Tableau 1.1 : Quelques propriétés usuelles des grandes familles de matériaux

| Famille de matériaux | Métaux | Polymères et Élastomères | Céramiques et Verres |
|---|---------------------|---------------------------------|---|
| Densité | Elevée | Faible | Faible |
| Rigidité (Module d'Young) | Elevée | Faible | Elevée |
| Coefficient de dilatation thermique | Moyen | Elevé | Faible |
| Dureté | Elevée | Faible à élever (fibres) | Elevée |
| Ductilité (Déformation à la rupture) | Élevée (plasticité) | Élevée sauf à l'état vitreux | Faible et aléatoire |
| Conductivité électrique, thermique | Élevée | Faible (isolants) | Électrique : faible Thermique : élevée |
| Résistance à la corrosion | Faible | En général élevée | Élevée |
| Température max d'utilisation | Élevée | Faible (toujours < 200°C) | Très élevée |
| Mise en forme | Facile | Très facile (moulage) | Difficile (frittage) |

Les matériaux composites réalisent généralement une combinaison de ces différentes propriétés et sont optimisés en fonction du matériau considéré. La figure (I.2) montre quelques possibilités ou combinaisons d'obtention de matériaux composites.[2]

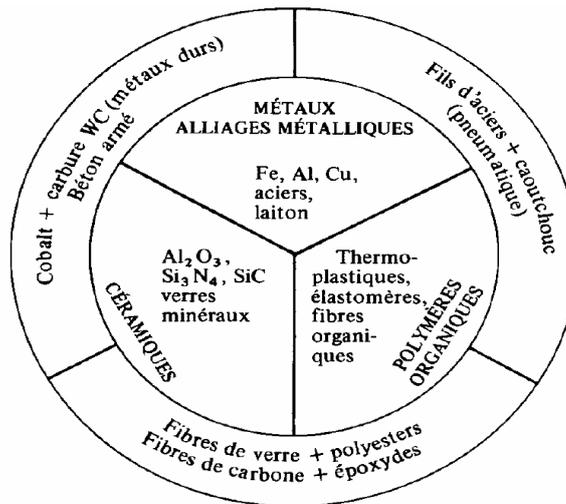


Figure I.2 : Différentes possibilités d'obtention des matériaux composites.[2]

- Métal et son alliage (liaison métallique)
- Polymère organique (liaison covalente et liaison secondaire)
- Céramique (liaison ionique et liaison covalente)

Cette classification peut être vérifiée à l'aide du tableau périodique des éléments (tableau de *Mendeleïev*, voir Annexe).[3]

La plupart des éléments (à gauche et au centre de la peinture de *Mendeleïev*) sont en métal (environ 70 types). Le côté droit du tableau périodique est occupé par des non-métaux (tels que l'Oxygène (*O*)). Dans le domaine intermédiaire entre les métaux et les non-métaux, de nombreux éléments (comme le Carbone (*C*) et le Silicium (*Si*)) échappent à cette classification simple.

La plupart des métaux sont des solides atomiques à température ambiante. Les métaux les plus couramment utilisés sont le Fer (*Fe*), l'Aluminium (*Al*) et le Cuivre (*Cu*). Généralement, les alliages métalliques sont des combinaisons de deux ou plusieurs métaux, comme le laiton (alliage de Cuivre (*Cu*) et de Zinc (*Zn*)), mais ils peuvent également contenir des éléments non métalliques. Dans ce type d'alliage, par exemple, la plupart des aciers (alliage Fer-Carbone) [3].

- Les métaux et leurs alliages : Ils sont généralement de bons conducteurs de chaleur et d'électricité, et sont opaques à la lumière visible qu'ils réfléchissent. Ils sont généralement durs, rigides et plastiquement déformables. Un grand nombre de métaux ont une température de fusion (T_m) très élevée.

- Les polymères organiques : Ils sont des composés constitués de molécules qui forment généralement de longues chaînes d'atomes de Carbone, ces atomes de Carbone sont des éléments fixes, comme l'Hydrogène (H) ou le Chlore (Cl), ou des groupes atomiques (comme le radical méthyle (CH_3)). D'autres éléments, tels que le Soufre (S), l'Azote (N), le Silicium (Si), etc., peuvent également être liés à la composition de la chaîne.

Les polymères organiques (plexiglas, caoutchouc, etc.) ont des propriétés physiques très différentes. Ce sont presque toujours des isolants électriques et thermiques. Ils sont légers et faciles à concevoir. Contrairement aux métaux, les polymères ne peuvent pas résister à des températures supérieures à $200^\circ C$ dans la plupart des cas. [3]

- Les céramiques : Ils sont généralement des matériaux inorganiques associés à un nombre limité d'éléments métalliques (Mg , Al , Ti , ...) et non métalliques (le plus courant est l'Oxygène). A l'origine, le terme céramique désignait des Oxydes (de Silice (SiO_2), d'Alumine (Al_2O_3)) etc. Cette classification est étendue pour inclure d'autres combinaisons d'atomes, comme le Carbure de Tungstène (WC) ou le Nitrure de Silicium (Si_3N_4).

Les matériaux céramiques sont principalement connus pour leur résistance au feu, c'est-à-dire pour leur haute résistance mécanique et thermique, mais l'utilisation de la céramique n'est en aucun cas limitée à ce type d'application. Les céramiques sont généralement des matériaux très durs et elles sont largement utilisées comme abrasifs. La plupart des céramiques sont des isolants électriques et des isolants thermiques, mais parmi ces matériaux, nous avons trouvé les meilleurs conducteurs thermiques, comme le Diamant. Un grand nombre de céramiques ont également des applications importantes dans les équipements électriques et les produits électroniques. Le verre minéral est une combinaison d'Oxydes (SiO_2^+ , Na_2O^+ , CaO^+ ...) à structure amorphe et appartient également à la catégorie des céramiques. [3].

Ces trois types de matériaux peuvent être combinés pour former un matériau composite. Ils sont composés de deux ou plusieurs matériaux différents qui combinent de manière synergique leurs propriétés spécifiques.

C'est le cas des résines époxy (polymères) renforcées de fibres de verre, formant des matériaux composites légers à haute résistance mécanique. Le béton est un agglomérat de ciment et de gravier, un autre exemple de matériaux composites [3].

Il est pratique de subdiviser les matériaux en trois catégories principales, principalement basées sur les caractéristiques des atomes, la structure et les propriétés, mais avec un certain degré d'arbitraire. Par conséquent, le Diamant, qui peut être considéré comme un polymère tridimensionnel, est un matériau organique car il est composé d'atomes de Carbone. Cependant, sa dureté et ses propriétés mécaniques facilitent la fixation sur la céramique, de même, la conductivité n'est plus une protection des métaux, car certains Oxydes (VO_2 , $YBa_2Cu_3O_7$) et certains polymères organiques sont conducteurs d'électricité.

Par conséquent, toute classification de matériaux présente un certain degré d'arbitraire : il n'y a pas d'interruption dans la continuité entre ces trois types de matériaux. D'autres classifications basées sur des propriétés spécifiques du matériau (par exemple, la semi-conductivité) peuvent également être raisonnables [3].

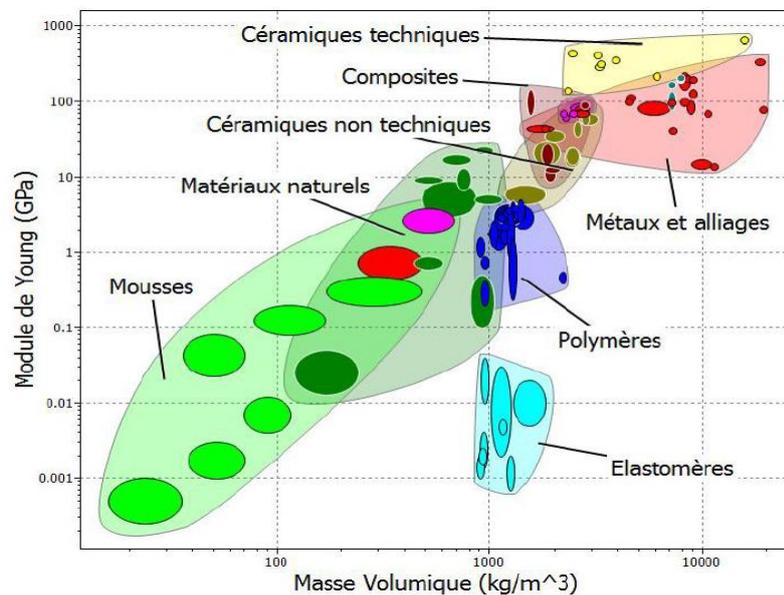


Figure I.3 : Distribution du module de Young pour les différentes classes des matériaux.[4]

II. Liaisons chimiques

II.1. Liaison ionique

Elle est caractérisée par l'échange d'électrons entre deux atomes. Au fur et à mesure que la couche externe d'atomes qui deviennent des ions se sature, la liaison est forte. Cette liaison implique principalement des éléments avec peu d'électrons dans leur coquille (c'est-à-dire les colonnes 1 et 2 du tableau périodique) et des éléments avec une couche externe presque saturée (colonnes 16 et 17 du même période). Par exemple, le Sodium (*Na*) a la structure électronique suivante : $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$. Il devient l'ion (Na^+). De plus, le Chlore (*Cl*) a la structure électronique suivante : $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$, et devient donc des ions (Cl^-), obtenant ainsi un composé stable *NaCl*. La liaison est forte car elle peut stabiliser la structure électronique de l'atome en saturant la coquille électronique externe de l'atome. [5]

Par exemple, $K^+ + Cl^-$ réagit pour produire du *KCl*, qui libère 374 (kJ/mol) d'énergie.

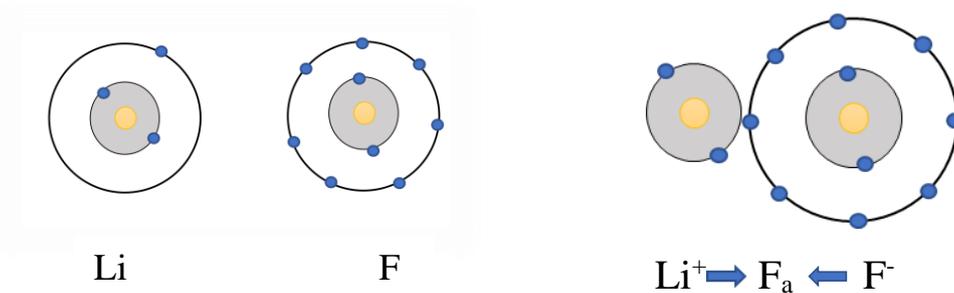


Figure I.4 : Mise en évidence d'une liaison ionique (cas de Fluorure de Lithium).[5]

Les matériaux formés à l'aide de liaisons ioniques présentent les caractéristiques suivantes : mauvaise conductivité thermique, transparence, fragilité et point de fusion élevé.[5]

II.2. Liaison covalente

Une liaison covalente est une liaison chimique dans laquelle deux atomes partagent deux électrons de l'une de ses couches externes (un pour chaque électron ou deux électrons du même atome), formant une paire d'électrons qui lie les deux atomes. C'est l'une des forces qui créent une attraction mutuelle entre les atomes.

Par conséquent, c'est parce que deux paires d'électrons ou plus sont composées de deux atomes et que la couche électronique externe de ces atomes est incomplète.[2]

Exemple : un élément avec sept électrons sur la coquille n'a pas un électron pour compléter la

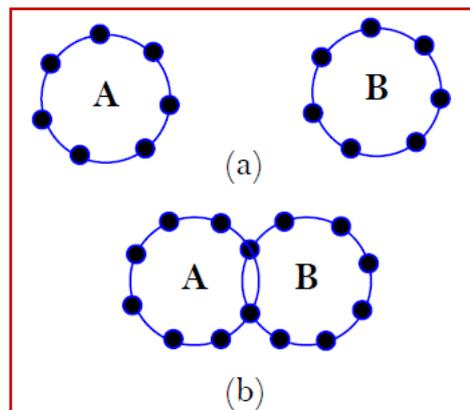


Figure I.5 : Représentation de la liaison covalente entre deux atomes de chlore
(a) Avant la liaison, (b) les deux atomes à l'état lié.[2]

coquille. Lorsque les atomes d'un élément de cette colonne sont proches du même atome, chacun d'eux rassemble un électron avec des électrons voisins [2].

Ce partage permet d'établir des liaisons fortes car la coquille de chaque atome contient huit électrons. La figure (I.5) illustre cette liaison dans le cas du Chlore. Les électrons impliqués dans la liaison covalente sont situés dans l'espace. Dans la direction reliant le centre de l'atome, la probabilité de leur apparition est très élevée [2].

II.3. Liaison métallique

Les liaisons métalliques agissent dans les métaux (objets simples ou alliages) entre les atomes qui composent ces objets. L'atome perd des électrons de valence (électrons de la dernière coquille) et devient le noyau qui forme la chaîne principale de la structure cristalline métallique. Ces noyaux occupent les positions habituelles des sommets du réseau, du centre de la face, du centre du cube, etc.

Les électrons de valence libérés des atomes métalliques et rassemblés entre tous les noyaux forment un "gaz électronique" négatif, qui se diffuse dans tout le métal. Le cœur de l'atome est en fait immergé dans un "bain d'électrons". Ceux-ci se déplacent constamment de manière complètement désordonnée.

La liaison est caractérisée par l'agrégation d'électrons de valence, qui ne sont plus situés entre des atomes (liaisons covalentes) ou des ions (liaisons ioniques), mais sont répartis dans tout le réseau ionique [2].

Exemple : Le Sodium (Na) a un électron de valence. Afin de garder la couche d'électrons intacte, chaque atome de Sodium perd son électron de valence ; en fait, aucun d'eux n'abandonne la possibilité de céder ou de partager cet électron avec l'un de leurs voisins. Par conséquent, tous les électrons de valence sont rassemblés, de sorte que le cristal de Sodium métallique peut être illustré graphiquement par le réseau d'ions (Na^+) baigné dans un nuage d'électrons libre qui n'est plus dans l'espace figure (I.6). Ensuite, l'ion (Na^+) a une coque complète et la structure électronique est stable [2].

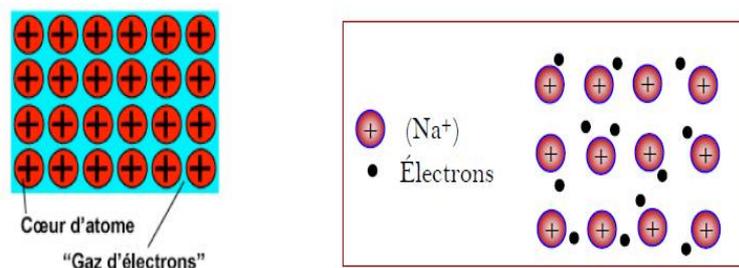


Figure I.6 : Liaison métallique du sodium : des ions positifs baignent dans un alliage d'électrons délocalisés.[2]

Par conséquent, les métaux sont essentiellement formés d'éléments avec peu d'électrons de valence, et les éléments avec les propriétés métalliques les plus fortes sont des éléments avec un seul électron de valence [2].

L'arrangement cristallin des matériaux métalliques est produit par l'attraction et la répulsion entre les ions positifs et les nuages d'électrons délocalisés. La structure cristalline résultante est très compacte. La mobilité des électrons permet d'expliquer la conductivité électrique et la conductivité thermique élevées des métaux [2].

Le tableau (I.2) donne des exemples typiques des liaisons interatomiques de certaines substances chimiques, nous nous concentrons ici sur les liaisons les plus courantes [5].

Tableau I.2 : Exemples des liaisons chimiques [5].

| Liaison | Matériaux | Caractéristiques |
|-------------------|------------------------------------|--|
| Ionique | $NaCl$, Al_2O_3 | Mauvaise conductivité électrique, fragile, transparente, haute point de fusion |
| Covalente | Si , diamant | Mauvaise conductivité électrique, très grande dureté, haut point de fusion |
| Métallique | Na , Al , Cu , Fe , W | Bonne conductivité électrique et thermique, facilement déformable, opaque |

III. Quelques propriétés physiques des matériaux

III.1. Propriétés électroniques

La conductivité du matériau dépend de la mobilité des électrons (ou ions) contenus dans le champ électrique externe appliqué. Cette mobilité dépend de la structure électronique et donc de la nature des atomes qui composent le matériau, puisque seuls les électrons d'énergie supérieure au niveau de *Fermi* peuvent participer à la conduction, la conductivité des matériaux métalliques (conducteurs) est forte et la conductivité des matériaux organiques et inorganiques (diélectriques) est faible voire inexistante [6].

a) Résistivité électrique

La résistivité électrique ρ ($\Omega \cdot m$) du matériau ou l'inverse de la conductivité σ ($\Omega^{-1} \cdot m^{-1}$), reflète la mobilité des électrons conducteurs, générant ainsi une densité de courant J (ampères/m²) dans le champ électrique E (volt/m) :

$$E = \rho \cdot J = J/\sigma \quad (\text{I.1})$$

Elle détermine la résistance électrique R (Ω) d'un conducteur de longueur l et de section S :

$$R = \rho \cdot \left(\frac{l}{S}\right) \quad (\text{I.2})$$

La résistivité est extrêmement sensible à la pureté et à la composition. De même, lorsque la température de *Debye* du solide considéré est supérieure à 0.2 fois, la résistivité électrique augmente linéairement avec la température en raison de l'augmentation de l'impact entre électrons et ions et de l'augmentation du nombre de défauts de réseau. Lorsque la température baisse, la résistivité tend vers une limite finie, à l'exception de quelques matériaux qui deviennent supraconducteurs : en dessous de la température dite critique, leur résistivité s'annule en raison du mouvement coordonné des électrons. Les valeurs de résistivité couvrent plusieurs ordres de grandeur, de 10^{-8} ($\Omega \cdot m$) pour les métaux à 10^{17} ($\Omega \cdot m$) pour les polymères. Par convention, la conductivité du cuivre recuit de haute pureté ($0.580 \cdot 10^8$ ($\Omega^{-1} \cdot m^{-1}$)) est égale à la valeur de référence de 100% *IACS* (*International Annealed Copper Standard*).[6]

b) Ferroélectricité et piézoélectricité

En raison de la structure dans laquelle les centres de gravité des charges négatives et positives ne se chevauchent pas dans la cellule de la batterie comme le Titanate de Baryum ($BaTiO_3$), les matériaux ferroélectriques ont une polarisation naturelle et permanente. Par conséquent, dans le cristal, les dipôles électriques formés pointent dans la même direction dans le même

domaine ferroélectrique, et ces derniers sont séparés les uns des autres par des parois. En l'absence de champ électrique externe, la direction de polarisation de ces domaines est aléatoire et la polarisation finale est nulle. Sous le champ, les domaines dont l'orientation dipolaire est proche du champ magnétique imposé s'étendent au détriment de la migration des parois aux dépens de leurs voisins, parce que ces matériaux ferroélectriques ont une constante diélectrique élevée, bien qu'ils aient un facteur de perte élevé en raison d'une grande hystérésis de polarisation, ils sont encore souvent utilisés dans les condensateurs.[6]

III.2. Propriétés magnétiques

Comme toute charge électrique en mouvement, les électrons en autorotation (spin) et en orbite autour du noyau génèrent un champ magnétique autour d'eux. Au contraire, l'application d'un champ magnétique externe H (A/m) au matériau interagit avec le champ magnétique électronique et une induction magnétique B (en Teslas, $1T = 1Wb/m^2$) d'intensité proportionnelle à H est générée dans le matériel : $B = \mu \cdot H$, où μ (Wb/ (A•m)) est la perméabilité magnétique du matériau considéré.[6]

En se référant à la perméabilité magnétique du vide $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Wb/ (A}\cdot\text{m)}$, nous définissons la perméabilité magnétique relative $\mu_r = \mu/\mu_0 = (1 + \chi)$, où χ est la susceptibilité magnétique [6] :

- $\mu_r \leq 1$ (pour les matériaux diamagnétiques);
- $\mu_r \geq 1$ (pour les matériaux paramagnétiques);
- $\mu_r \gg 1$ (pour les matériaux ferromagnétiques).

Sous un champ magnétique (similaire à l'effet d'un champ électrique sur les matériaux ferroélectriques), le domaine d'orientation proche du champ externe est augmenté par la migration de la paroi de Bloch : cela fait augmenter l'induction B , jusqu'à l'induction de saturation B_s (voir figure I.7). Si le champ magnétique externe est annulé, une induction rémanente B_r restant existe toujours.

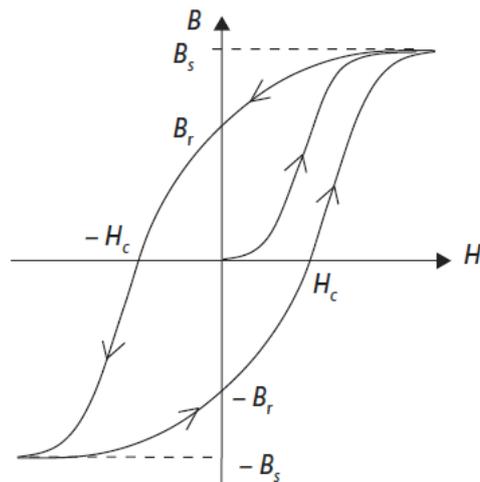


Figure I.7 : Courbe de première magnétisation et boucle d'hystérésis d'un matériau ferromagnétique.[6]

III.3. Propriétés optiques

L'interaction entre le matériau et le rayonnement électromagnétique (par exemple la lumière visible) (longueur d'onde comprise entre 0.38 et 0.78 (μm)) dépend essentiellement de la structure électronique de l'atome d'intérêt. Les électrons dans les éléments métalliques absorbent tous les rayonnements électromagnétiques incidents (des ondes radio aux rayons ultraviolets proches) et entrent dans l'état excité de la bande de conduction (énergie plus élevée) dans un état utilisable. La plupart d'entre eux reviennent à leur état d'origine en réémettant le même rayonnement (lumière diffusée et réfléchi) que le rayonnement incident. Cette interaction se produit complètement à une profondeur de pénétration ne dépassant pas 0.1 (μm). Par conséquent, seul le film métallique de faible épaisseur peut être pénétré par les photons les plus énergétiques, c'est-à-dire qu'il est partiellement transparent.[6]

Le rayonnement incident peut être partiellement diffusé et / ou partiellement réfléchi sur la surface, partiellement absorbé (et dissipé dans le matériau sous forme de chaleur), partiellement diffracté (si le matériau est cristallin), partiellement réfracté et éventuellement transmis (voir figure I.8).[6]

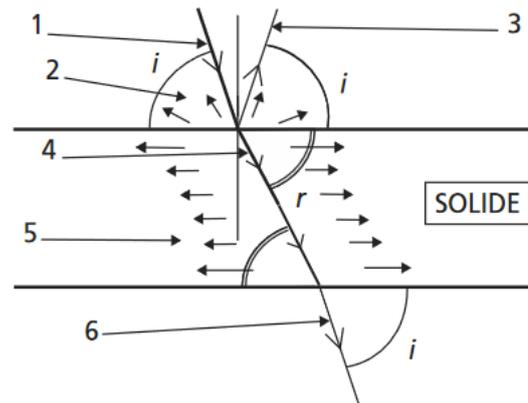


Figure I.8 : Principaux types d'interactions entre un rayonnement lumineux monochromatique et une lame de matière solide : 1) rayonnement incident ; 2) rayonnement diffusé ; 3) rayonnement réfléchi. 4) rayonnement réfracté ; 5) rayonnement absorbé ; 6) rayonnement transmis. i : angle d'incidence; r : angle de réfraction.[6]

IV. Milieux matériels

Selon les caractéristiques électriques, les matériaux peuvent être divisés en trois types : les conducteurs isolés et les semi-conducteurs [8].

IV.1. Conducteurs

Ce sont principalement des métaux que l'on retrouve dans la catégorie des matériaux conducteurs. À l'exception du mercure liquide, tous les métaux sont solides à température ambiante.

Ils conduisent généralement très bien la chaleur et l'électricité. Ils peuvent être réduits en barres et en lignes, et certains peuvent être magnétisés. Après polissage, ils ont un lustre spécial appelé lustre métallique. Les alliages sont des mélanges liquides de deux ou plusieurs métaux et leurs propriétés sont complètement différentes de celles des métaux qui les composent [9].

IV.2. Isolants

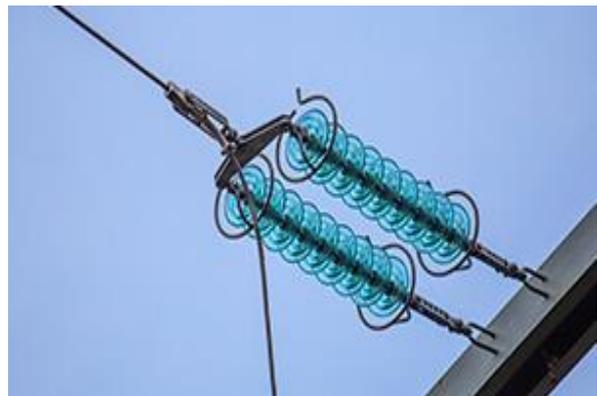
Dans les équipements électriques, les moyens de sécurisation sont très importantes et les isolants en font partie. Contrairement aux conducteurs, ils empêcheront le courant de passer entre deux parties conductrices. Les isolateurs sont utilisés pour protéger l'appareil et assurer la distribution et la transmission sûres du courant. Les conducteurs peuvent déplacer des électrons. Ce mouvement d'électrons génère du courant électrique. Au contraire, la résistance (*Ohm*) de l'isolant est proche de l'infini et la conductivité est nulle [10].

Il existe de nombreux matériaux isolants. Il s'agit notamment du Plastique, du Verre, du Caoutchouc, du Papier, du Bois sec, de la Porcelaine, du Carton, etc. La plupart du temps, l'air et l'eau sont également des isolants [10].

Lorsqu'il est installé entre deux plaques conductrices, l'isolant est utilisé pour stocker le champ électrique dans le condensateur et ses utilisations sont infinies. Il peut être utilisé pour l'installation domestique et les applications industrielles [10].

V. Conclusion :

Dans ce chapitre on a donné des notions de base sur les matériaux en général et leurs propriétés, on a aussi cité quelques définitions sur les liaisons chimiques, et on a donné quelques notions sur les matériaux conducteurs et isolants. Le chapitre suivant va être consacré aux matériaux semi-conducteurs. Ces derniers ont acquis une importance considérable dans notre société. Ils sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques qui entrent dans les dispositifs informatiques, télécommunications, télévision, automobile, appareils électroménagers, etc.



Références

- [1] Cours.<http://campus.cerimes.fr/odontologie/enseignement/chap1/site/html/1.html#1>.
- [2] HIDOURI Abdelmoumen, (2017), *Cours de Caractérisation Des Matériaux* (génie mécanique).
- [3] Jean P.Mercier, Gérald Zambelli, Wilfried Kurz,(2002), *Introduction à la science des matériaux* (3^{ème} édition).
- [4] MAY Abdelghani, 2017, *Cours : Science des Matériaux*.
- [5] BEN NASSER Mohamed, Mr HSSIN Hichem, (2015), *Propriétés des matériaux* (chapitre 2).
- [6] Michel DUPEUX, *Aide-mémoire, Science des matériaux*, Ed Dunod Université (2^{ème} édition (2008)).
- [7] M.Abd-Lefdil, (2018) , *Cours de Physique des Matériaux SMP Semestre S5*.
- [8] Salmi, Z., & Rahali, S. (2020). *Dépendanceentempératuredesconstantesélastiqu esetparamètresmécaniquesDu Semi-conducteur GaAs* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).
- [9] *LES MATERIAUX CONDUCTEURS DE L'ELECTRICITE*.
<http://www.epsic.ch/pagesperso/maccaudo/Materiaux/Theorie/ManuelMateriaux/MetauxFerreux.htm>.
- [10] <https://fr.eni.com/particuliers/node/933>.
- [11] Universalis, Encyclopædia. « *SEMICONDUCTEURS* ». Encyclopædia Universalis, <https://www.universalis.fr/encyclopedie/semiconducteurs/>.

Chapitre II
Semi-conducteurs

C *hapitre II*

Semi-conducteurs

Pendant très longtemps, les scientifiques ont cru qu'avec la conductivité électrique directe, les matériaux se décomposent en deux couches de conductivité et de diélectrique. Cependant, vers 1830, on a découvert des matériaux aux propriétés qui ne permettent aucune classification.

A l'état pur, ces matériaux sont à la fois de mauvais conducteurs d'électricité et de mauvais isolants : leur capacité électrique, notamment leur résistivité, varie fortement sous l'influence de facteurs environnementaux latéraux. À l'extérieur, quand il y a de la lumière, etc...En occupant une position intermédiaire entre le conducteur et l'isolant, ces matériaux ont été appelés « semi-conducteurs ».

La composition du semi-conducteur offre une accessibilité aux propriétés et à l'optique que les semi-conducteurs purs ne font pas.

Un semi-conducteur est un cristal dont la propriété conductrice est un intermédiaire entre un isolant et un conducteur, et ils changent radicalement sous les nuances des facteurs environnementaux, de la présence d'impuretés et de la lumière.

I. Alliages semi-conducteurs

Compte tenu de l'application des alliages semi-conducteurs dans le domaine de l'optoélectronique, il convient de les mentionner en particulier. L'élaboration de ces alliages se fait à partir de composés binaires, en fait, leur composition est différente selon qu'ils contiennent respectivement deux, trois ou quatre éléments, ils peuvent être binaires, ternaires ou quaternaires [13].

I.1. Classification des alliages semi-conducteurs

Les alliages semi-conducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants sous la forme $A^N B^{8-N}$: [3]



I.2. L'approximation du cristal virtuel linéaire (VCA)

La VCA suppose que l'alliage est grossièrement représenté par un réseau périodique à un seul atome (virtuel) avec un potentiel atomique moyen [1]. On suppose que le semi-conducteur est uniforme, mais il sera inévitablement affecté par les fluctuations provoquées par le composant x . Ces fluctuations sont généralement considérées comme des perturbations obtenues par le calcul du second ordre de la méthode VCA [2]

I.3. Procédure de calcul de la propriété physique

Le cristal ternaire $AB_{1-x}C_x$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules AB avec une fraction $(1-x)$ [4], la valeur moyenne de la propriété physique F étant.

$$F(x) = xF_{AC} + (1-x)F_{AB} \quad (\text{II.1})$$

Les expériences révèlent que la constante du réseau $a(x)$ de l'alliage ternaire est donnée par les concentrations moyennes de leurs composés binaires. Cette constante suit la loi de Vegard [2].

$$a(x) = xa_{AC} + (1-x)a_{AB} \quad (\text{II.2})$$

a_{AC} : est la constante de réseau du composé AC .

a_{AB} : est la constante de réseau du composé AB .

Par contre le gap énergétique $E_g(x)$ de l'alliage ternaire est donnée par

$$E_g = \overline{E_g(x)} + bx(1 - x) \quad (\text{II.3})$$

$$\overline{E_g(x)} = x E_{AC} + (1 - x)E_{AB} \quad (\text{II.4})$$

Avec E_{AC} est le gap du composé AC.

E_{AB} est le gap du composé AB.

Pour les faibles écarts d'énergie, le paramètre de courbure b est généralement positif. Il convient de souligner qu'aucun nouvel état ne se formera dans l'alliage, mais que le niveau d'énergie se déplacera continuellement à mesure que la composition x changera. [5]

II. Notion de bandes d'énergie

La théorie des bandes d'énergie est un modèle quantique en physique du solide, qui détermine l'énergie possible des électrons dans un solide et aide à comprendre le concept de conductivité électrique. Cela vient de la théorie des orbitales moléculaires. Dans les solides, les niveaux d'énergie admissibles sont limités à une bande dont la largeur est d'environ un électron-volts, en fonction du chevauchement du cristal et des orbitales atomiques. Le solide a une structure de bande d'énergie. Une distinction est faite entre les bandes d'énergie autorisées et les bandes d'énergie interdites. La bande d'énergie est remplie selon la loi statistique de *Fermi* : elle montre qu'à 0 K, les électrons occupent tous les niveaux d'énergie inférieurs au niveau de *Fermi* ou au niveau de *Fermi*. Sa valeur est la caractéristique du cristal considéré [8]

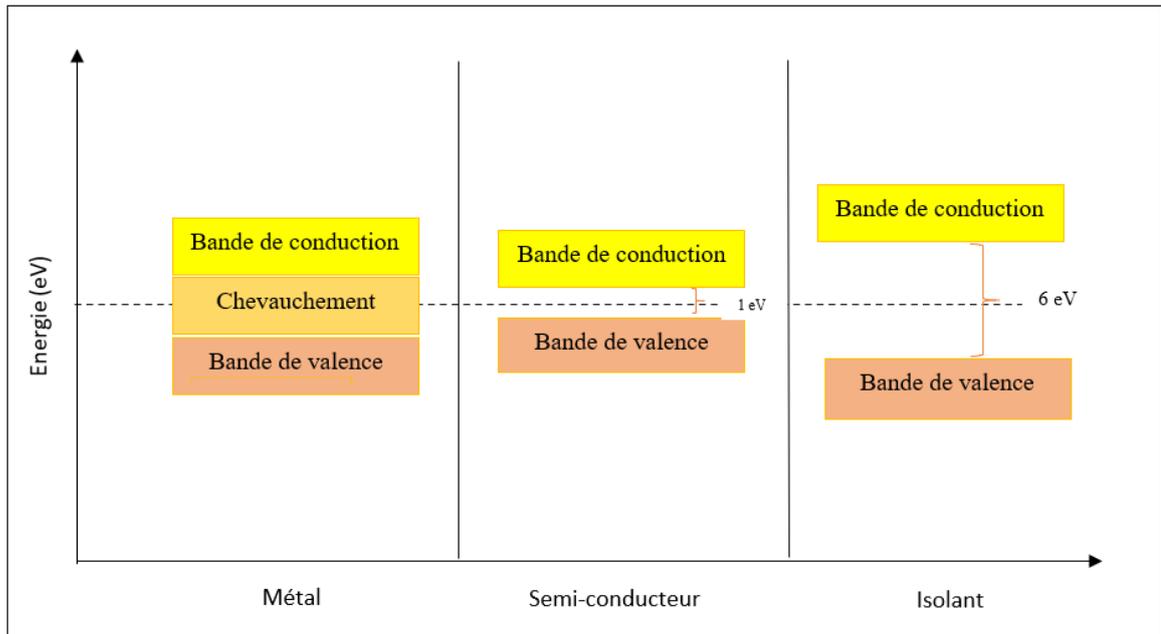


Figure II.1 : Position des bandes d'énergie pour un métal, un semi-conducteur et un isolant.[9]

III. Types de semi-conducteur

III.1. Semi-conducteur intrinsèque

Les semi-conducteurs absolument purs, c'est-à-dire les semi-conducteurs sans aucune impureté à l'intérieur du réseau cristallin, sont appelés semi-conducteurs intrinsèques. La caractéristique fondamentale d'un semi-conducteur pur est que le nombre d'électrons libres et de trous libres est absolument égal à n'importe quelle température. Ces porteurs de charge sont générés thermiquement ou optiquement (absorption de photons - le processus de base des cellules photovoltaïques). [10] La concentration d'électrons libres (nombre par unité de volume) n est égale au p de trous libres, ce que l'on appelle la densité intrinsèque des porteurs.

$$n = n_i = p$$

On peut montrer que :

$$n_i = AT^{3/2} \exp\left(\frac{-E_g}{2kT}\right) \quad (\text{II.5})$$

Avec : T : La Température, E_g : Bandgap, k : Constante de Boltzmann, A : constante.

On peut voir d'après l'expression ci-dessus que n_i est étroitement lié à la température. En conséquence, en raison de l'augmentation rapide du nombre de paires électron-trou, la

résistivité du semi-conducteur intrinsèque diminue rapidement avec l'augmentation de la température. A température ambiante (300 K), la densité intrinsèque du support Silicium est $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$. On peut la considérer comme très petite comparée au nombre d'atomes dans un cristal de Silicium (égal à $5 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$). [10]

III.2. Semi-conducteur extrinsèque

En introduisant des impuretés bien définies (de manière bien contrôlée) dans des semi-conducteurs intrinsèques, des semi-conducteurs extrinsèques ou des semi-conducteurs dopés peuvent être obtenus. Le but de ce processus est de modifier les caractéristiques électriques des semi-conducteurs, ce qui est l'étape la plus fondamentale dans la création de dispositifs électroniques. [10]

a) Semi-conducteur de type n

Supposons que nous utilisons des éléments de la colonne 5 du tableau périodique par exemple, le Phosphore (P) ou l'Arsenic (As) pour doper les cristaux de Silicium. Les atomes d'impuretés sont placés dans le réseau en remplaçant les atomes d'origine, comme le montre la figure (II.2) :

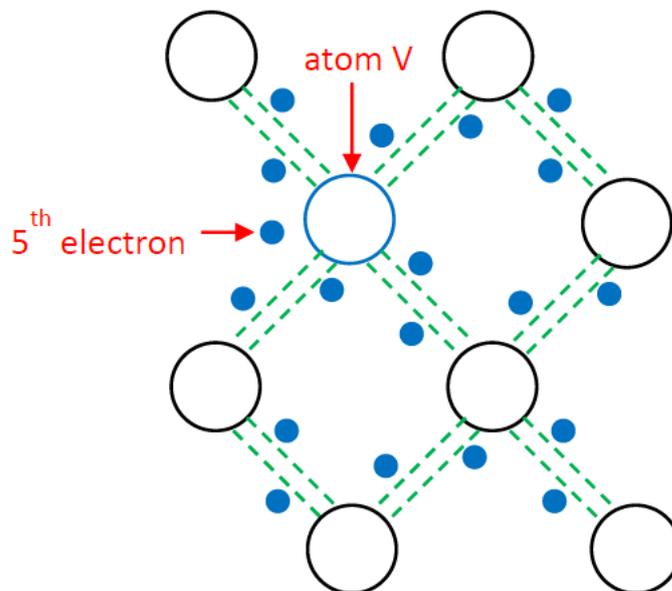


Figure II.2 : Présentation schématique du Silicium dopé n. [10]

Les éléments de la cinquième colonne sont essentiellement pentavalents, ce qui signifie qu'il y a cinq électrons dans sa coquille. Quatre d'entre eux sont utilisés pour fournir des liaisons covalentes avec les quatre autres atomes de Silicium adjacents. Le cinquième électron ne participe pas à la condensation du cristal, sa connexion avec l'atome d'origine est très faible et l'apport d'énergie (principalement thermique) est suffisamment faible pour le rendre libre, ce qui signifie qu'il peut favoriser la conduction de charge. Une fois les électrons libérés, les atomes d'impuretés appelés donneurs deviennent des ions fixes chargés positivement. [10] Dans une large plage de température (150 K à 600 K), le nombre d'électrons libres est bien supérieur au nombre de trous libres. Par conséquent, ces électrons libres sont appelés porteurs majoritaires et les trous sont appelés porteurs minoritaires. Les semi-conducteurs ainsi dopés sont appelés "type n".

b) Semi-conducteur de type p

Considérons maintenant le dopage du Silicium avec des atomes dans la colonne 3 du tableau périodique par exemple, le Bore (B). Là encore, on place les atomes dopants dans le réseau pour remplacer les atomes d'origine, comme le montre la figure (II.3) :

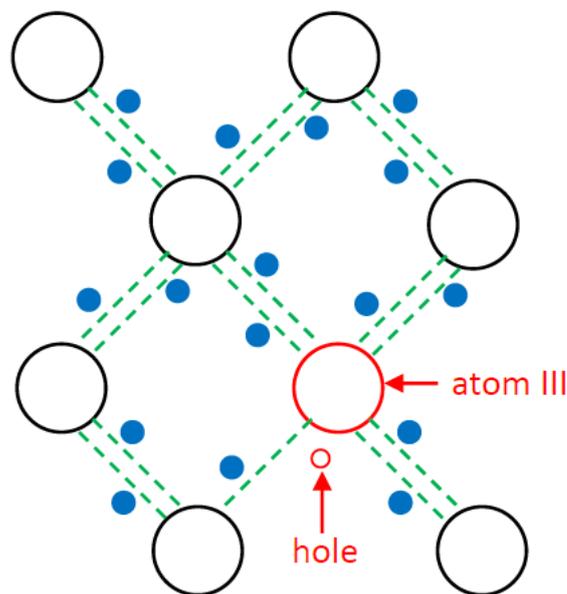


Figure II.3 : Présentation schématique du silicium dopé p. [10]

Lorsqu'il y a trois électrons périphériques sur sa coquille, l'élément (trivalent) de la colonne 3 du tableau périodique ne peut satisfaire que trois liaisons covalentes avec ses quatre atomes adjacents. Le quatrième lien est incomplet et il y a des lacunes. L'apport d'énergie

extrêmement faible permet aux électrons de valence de combler le vide et ainsi de se déplacer. On vient de créer un trou qui peut participer à la conduction, et les atomes d'impuretés étiquetés comme accepteurs deviennent des ions négatifs fixes.

Identique aux matériaux de type n , mais la situation inverse est que dans une large plage de températures, le nombre de trous libres est beaucoup plus grand que le nombre d'électrons libres. Par conséquent, ces trous sont appelés porteurs majoritaires et les électrons sont appelés porteurs minoritaires. De tels semi-conducteurs dopés sont appelés «de type p » [10].

IV. Propriétés Electroniques

IV.1. Gap direct et gap indirect

Pour les cristaux semi-conducteurs, la valeur maximale de la bande de valence et la valeur minimale de la bande de conduction sont caractérisées par l'énergie E et le vecteur d'onde k .

L'écart est défini comme la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence [11 -3].

La structure de bande montre deux types de base de semi-conducteurs :

- a) Les semi-conducteurs à gap direct : si la valeur maximale de la bande de valence et la valeur minimale de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k .
- b) Les semi-conducteurs à gap indirect : si la valeur maximale de la bande de valence et la valeur minimale de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k .

La différence entre le semi-conducteur à gap direct et le semi-conducteur à gap indirect est très importante, en particulier dans le processus de rayonnement, par rapport au semi-conducteur à gap direct, le processus d'absorption ou d'émission dans le semi-conducteur à gap direct est beaucoup plus important [12 -3].

IV.2. Transition inter bandes

La conductivité intrinsèque et la concentration intrinsèque des porteurs sont essentiellement contrôlées par le rapport $E_g / k_B T$. Lorsque le rapport est important, la concentration intrinsèque de porteurs est de faible conductivité [13].

La valeur optimale de E_g est obtenue par absorption de la lumière. Le seuil d'absorption de la lumière se poursuit. À la fréquence ω_g , on détermine la largeur de bande interdite $E_g = \hbar \omega_g$ sur

les figures (II.4 (a)) et (II.5 (a)). Dans le processus d'absorption directe, les photons sont absorbés par le cristal et des électrons et des trous sont générés. Dans le processus d'absorption indirecte des figures (II.4 (b)) et (II.5 (b)), la largeur minimale de la bande interdite comprend des électrons et des trous, et ces électrons et trous sont séparés par un vecteur d'onde k_c non négligeable. Dans ce cas, la largeur de la bande de transition directe correspondant à la valeur minimale, il est interdit de ne pas remplir la condition de conservation du vecteur d'onde, car dans le domaine énergétique, le vecteur d'onde du photon peut être négligé par rapport à k_c . Si toute fois un phonon de vecteur d'onde K et de fréquence Q est créé par ce processus, alors nous avons :

$$k(\text{photon}) = k_c + K \approx 0 ; \hbar\omega = E_g + \hbar\Omega \quad (\text{II.6})$$

Que stipule la loi de protection. L'énergie des phonons, $\hbar\Omega$, est généralement bien inférieure à E_g : même avec de grands vecteurs d'onde, les phonons sont également une source bon marché d'impulsion dans les cristaux, car l'énergie des phonons est très petite ($\sim 0,01-0,03$ eV) en ce qui concerne à la bande interdite. Si la température est suffisamment élevée pour que les phonons nécessaires puissent déjà être utilisés [13].

La largeur de la bande interdite peut également être évaluée en fonction de l'effet de la température sur la conductivité ou la concentration de porteurs dans la région intrinsèque. Seule la mesure optique peut déterminer si la transition est simple.

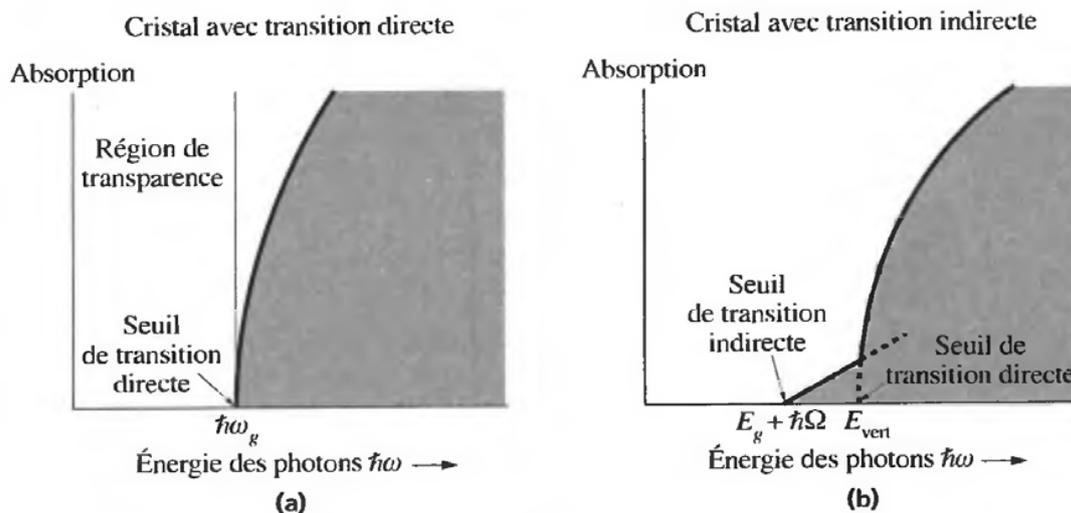


Figure II.4 : Absorption optique en fonction de l'énergie des photons.[13]

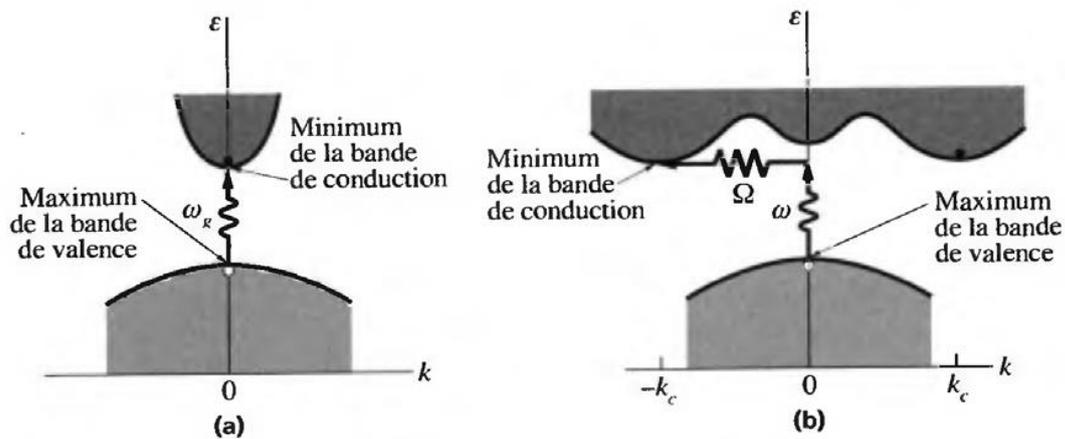


Figure II.5 : Transitions inter bandes (a) gap directe (b) gap indirecte.[13]

IV.3. Structure de bandes

Dans un atome, les électrons subissent le potentiel de *Coulomb* généré par le noyau et le nuage d'électrons composé d'autres électrons. Il ne peut occuper que des états quantiques bien définis et différents les uns des autres. Ces états sont caractérisés par des niveaux d'énergie bien définis et des fonctions d'onde associées. Chaque système quantique est caractérisé par la fonction d'onde ψ , qui est la solution de l'équation de *Schrödinger* :

$$\frac{2m}{\hbar}(E - V)\Psi = 0 \quad (\text{II.7})$$

Dans le cas des atomes isolés, il n'y a que des solutions à l'équation de *Schrödinger* pour les valeurs d'énergie discrètes $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$. Dans un solide cristallin, les noyaux sont disposés dans un réseau régulier, les orbitales sont remplacées par des ondes de *Bloch* et les couches sont remplacées par des bandes d'énergie admissibles séparées par d'autres bandes interdites. La bande peut avoir un grand nombre de niveaux d'énergie proportionnels au nombre d'atomes dans le cristal. Sur la base d'hypothèses simplifiées, plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour déterminer la structure de bande dans les semi-conducteurs. Parmi eux, nous pouvons citer :

- La méthode *CLOA*, également connue sous le nom de méthode des liaisons fortes, implique la formation de fonctions d'onde cristalline sous la forme de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques.
- La méthode *OPW* (onde plan orthogonale) consiste à développer la fonction d'onde du cristal à partir de la fonction d'onde d'électrons libres [11].

V. Propriétés optiques

V.1. Absorption des photons

Les photons induisent des transitions électroniques entre les états quantiques des matériaux semi-conducteurs. Par conséquent, l'absorption de photons d'énergie appropriée peut déplacer des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Pour les semi-conducteurs purs, cela n'est possible que si l'énergie du photon est supérieure à l'écart. Cependant, pour un vrai semi-conducteur, lorsqu'il existe un état d'énergie local dans la bande interdite entre la bande de valence et la bande de conduction, une transition d'énergie plus faible peut être observée. Ces états peuvent provenir de défauts dans le semi-conducteur, d'impuretés ou de la surface du matériau. Ils ont la particularité d'être dans l'espace.

Lors de la collision des photons et des électrons, il y a bien sûr conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Ceci nous amène à considérer deux cas : le semi-conducteur à gap direct et le semi-conducteur à gap indirect [14].

V.2. Émission spontanée de photons

Lorsque les électrons et les trous se recombinent, des photons peuvent être émis. Ce processus est communément appelé luminescence et est utilisé pour fabriquer des sources lumineuses ou caractériser des matériaux. Pour les semi-conducteurs, l'émission de photons générée par l'extinction d'électrons ni dans la bande de conduction et la formation de trous dans la bande de valence est appelée émission de rayonnement [14].

V.3. Émission stimulée

Dans certaines conditions, le photon incident peut produire un deuxième photon avec la même énergie, la même phase, la même polarisation et le même sens de propagation. Il s'agit d'un phénomène d'émission stimulée. *Einstein* a prédit ce mécanisme en 1917, qui est à la base du fonctionnement du laser, dont le premier a été réalisé en 1960. La raison du zoom avant est que, à partir du photon initial, nous obtenons deux photons dans le chemin final. Cependant, la possibilité d'émission stimulée de photons est très faible, donc à moins que dans des conditions spéciales, l'amplification n'est généralement effectuée dans le milieu. [14]

VI. Les semi-conducteurs *II-VI*

Le semi-conducteur *II-VI* est un composé formé à partir d'éléments des groupes *II* et *VI* du tableau périodique de *Mendeleïev* (tableau (II.1)). Grâce à certaines de ses caractéristiques, les composés *II-VI* forment une classe de matériaux semi-conducteurs qui peuvent être les mêmes que les semi-conducteurs *III-V* (*GaN-InP*). Jusqu'à présent, leur développement est principalement lié à la demande de détection et d'imagerie infrarouge dans les fenêtres de transmission atmosphérique de 8 à 12 (μm) et de 3 à 5 (μm), et récemment il en est de même pour les longueurs d'onde correspondant à la transmission optique [15-29]. La majorité des semi-conducteurs *II-VI* ont un écart d'énergie important qui donne la possibilité de fabriquer des sources laser et des filtres fonctionnant dans le domaine des courtes longueurs d'onde (bleu et proche ultraviolet) peut être envisagée.

Les semi-conducteurs *II-VI* sont directement espacés [16-29] et ont une bande interdite suffisamment élevée. Ces caractéristiques les rendent particulièrement intéressés par la production de dispositifs optoélectroniques fonctionnant dans les régions proche ultraviolette et visible du spectre. L'une des particularités des semi-conducteurs *II-VI* est la possibilité d'incorporer des atomes magnétiques impliquant un spin. La très forte interaction entre ces spins locaux et les porteurs de charge (électrons dans la bande de conduction, trous dans la bande de valence) rendra les semi-conducteurs d'excellentes propriétés magnéto-optiques, comme le *DMS* (semi-conducteur magnétique dilué). Leur nom est dû au fait qu'une petite partie des ions magnétiques est incorporée dans le composé semi-conducteur pendant le traitement.

Le *DMS* est utilisé dans ce que l'on appelle la « spintronique » ou la spintronique, qui utilise à la fois les caractéristiques des matériaux semi-conducteurs et les caractéristiques des matériaux magnétiques [17-29].

VI.1. Propriétés structurales des semi-conducteurs *II-VI* :

Les semi-conducteurs *II-VI* cristallisent dans une structure zinc blende ou une structure wurtzite (voir figure II.6). Les deux sont caractérisées par la disposition tétraédrique des atomes et sont stables à température ambiante [18-29]. La différence entre la phase wurtzite (*WZ*) et la phase zinc blende (*ZB*) réside dans l'ordre d'empilement des couches atomiques. Les plans hexagonaux sont empilés dans le plan [111] dans la phase *ZB* dans l'ordre de la phase *ABCABC* (figure II.6 (c)), et dans le plan de la phase *WZ* selon l'axe [0001] dans l'ordre de la phase *ABAB* (figure II. 6 (d)) [19-29].

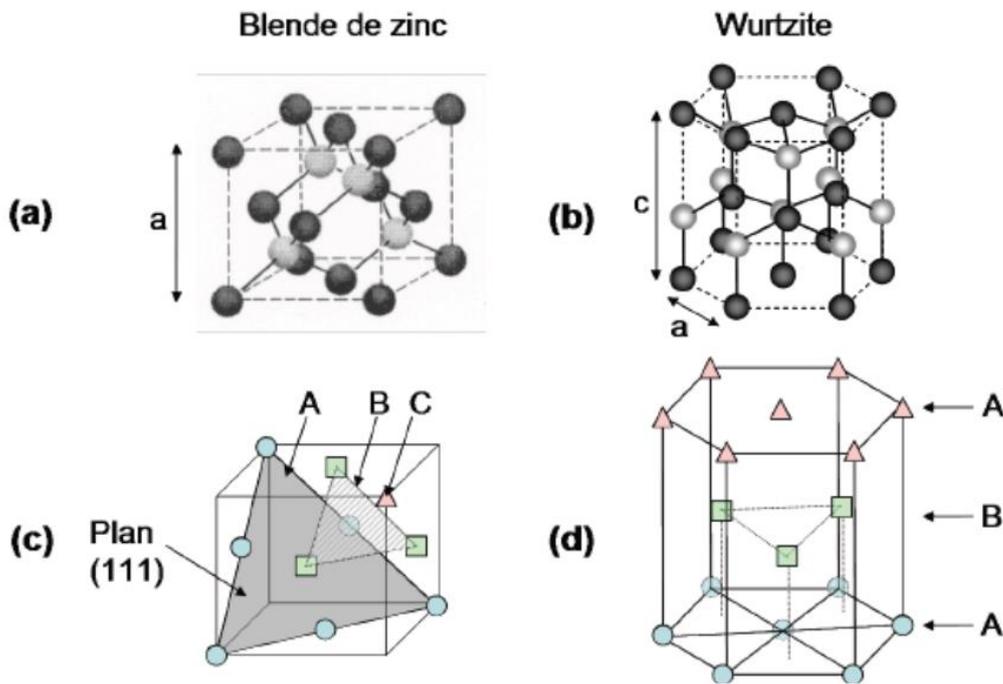


Figure II.6 : Structures cristallographiques des composés semi-conducteurs II.VI : (a) blende de zinc, (b) wurtzite. Empilement de couches atomiques, (c) ABCABC en zinc blende, (d) ABAB en wurtzite.

Tableau II.1 : Extrait du tableau périodique des éléments chimiques.

| II | III | IV | V | VI |
|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| | B ⁵ | C ⁶ | N ⁷ | O ⁸ |
| | Al ¹³ | Si ¹⁴ | P ¹⁵ | S ¹⁶ |
| Zn ³⁰ | Ga ³¹ | Ge ³² | As ³³ | Se ³⁴ |
| Cd ⁴⁸ | In ⁴⁹ | Sn ⁵⁰ | Sb ⁵¹ | Te ⁵² |
| Hg ⁸⁰ | Tl ⁸¹ | Pb ⁸² | Bi ⁸³ | Po ⁸² |

VI.2. Propriétés optoélectroniques

Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont étroitement liées à leur structure électronique. La structure électronique des semi-conducteurs présente une décomposition énergétique de la bande d'énergie électronique. Pour expliquer l'existence de ces bandes d'énergie, il faut revenir sur le couplage entre deux atomes. Par exemple, considérons deux atomes identiques, chacun avec quatre électrons de valence, comme un atome de silicium. Le couplage de ces atomes rassemble leurs électrons de valence pour

former des orbitales de type s et p (liaison et anti-liaison) (voir figure II.8). Lors de la formation des cristaux, l'interaction d'un grand nombre d'atomes (entre ces orbitales (s , p_x , p_y , p_z)) produit des bandes d'énergie (voir figure II.7). Par conséquent, la bande de valence se compose essentiellement de la bande de conduction de l'orbite p combinée et de l'orbite s anti-combinée.

Une bande interdite apparaît entre ces deux bandes de fréquences, et sa largeur d'énergie est de E_g , également connue sous le nom d'intervalle de semi-conducteur [11].

a) Structure de bandes des semi-conducteurs II-VI

La valeur extrême de la structure de bande semi-conductrice II-VI se situe au centre de la *zone de Brillouin* [20-11]. La bande de conduction (BC) du semi-conducteur II-VI est causée par les orbitales s des atomes de la colonne II, et la bande de valence (BV) est causée par les orbitales p des atomes de la colonne VI [21-11]. Considérant que le spin convertit la symétrie Γ_1 de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin en Γ_6 , il est dégénéré deux fois, et la bande de valence Γ_5 se transforme en Γ_7 et Γ_8 , qui sont respectivement dégénérées deux et quatre fois. Les deux bandes de fréquences Γ_7 et Γ_8 sont séparées par l'énergie Δ_{so} (voir figure II.7) [22], et enfin les bandes de fréquences Γ_6 et Γ_8 , qui bordent la bande de fréquences interdite. Pour la bande de valence Γ_8 , elle est constituée de deux bandes de courbures différentes, il y a donc deux masses effectives : une lourde et une légère. La bande de forte courbure est celle des trous dits légers (lh : light holes), l'autre est celle des trous lourds (hh : heavy-holes).

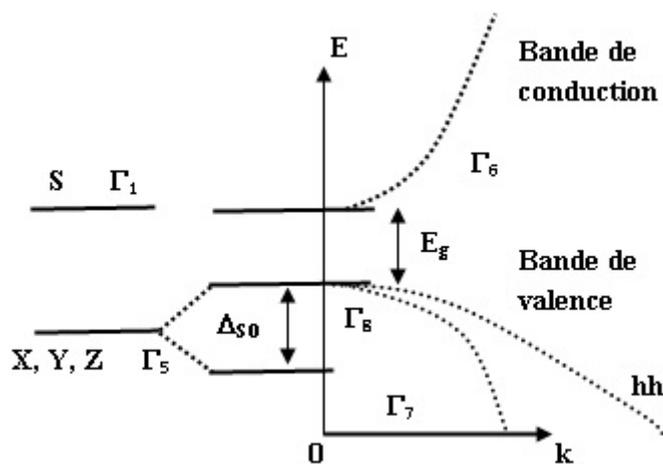


Figure II.7 : Représentation simple de la structure de bande d'un semi-conducteur massif (en fonction du vecteur d'onde k et en ne tenant compte que des niveaux s et p).

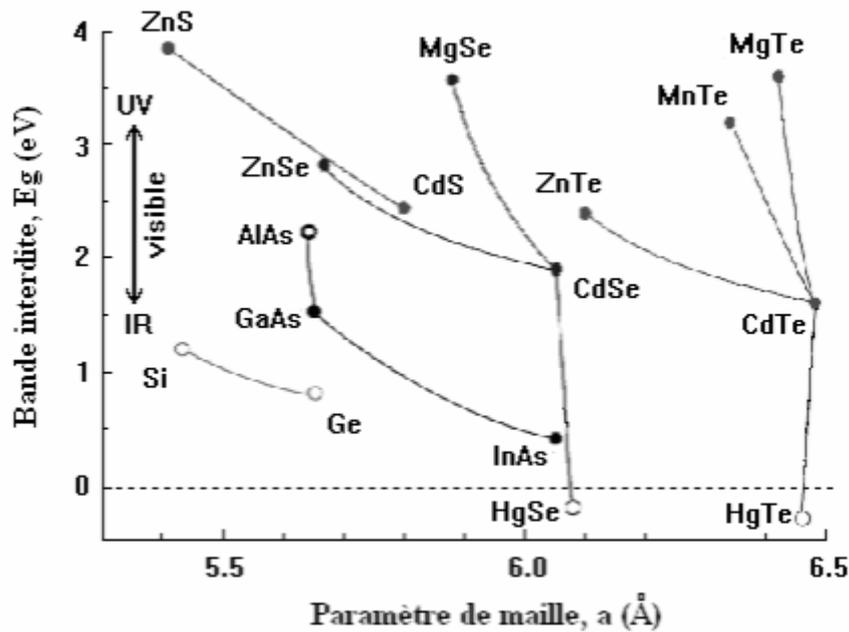


Figure II.8 : Bande interdite en fonction du paramètre de maille cubique pour différents semi-conducteurs.[22]

VII. Autres types de semi-conducteurs

VII.1. Semi-conducteurs III-V

Le matériau semi-conducteur III-V est un matériau composé d'éléments de la III^{ème} colonne et de la V^{ème} colonne. Ces composés sont généralement stables dans la structure de la blende de zinc. Les semi-conducteurs III-V ont beaucoup retenu l'attention en raison de leurs caractéristiques [23-30] :

- Ils sont robustes.
- Haute conductivité thermique.
- Leur point de fusion est très élevé.
- Il existe une bande interdite directe ou indirecte entre eux.

VII.2. Semi-conducteurs IV-IV

Les semi-conducteurs IV-IV sont l'un des matériaux les plus intéressants en physique du solide. Beaucoup se trouvent dans des structures de sel gemme et les transformations structurelles sont courantes. Les composés les plus étudiés dans ce groupe sont le *PbTe*, le *PbSe*, le *PbS*, le *SnTe* et le *GeTe*. L'espace de ces matériaux est généralement inférieur à 0.5(eV), ils conviennent donc parfaitement aux détecteurs laser et infrarouge et à d'autres équipements. Malgré leur structure cristalline simple, certains d'entre eux présentent encore

des propriétés ferroélectriques, paraélectriques et supraconductrices. De plus, par rapport au "classique", la déviation énergétique de certains alliages de ces composés, la localisation des niveaux d'impuretés, les niveaux de dopage élevés constatés, la constante diélectrique statique et la dépendance en température de certaines structures électroniques semblent anormaux. Le « comportement » des semi-conducteurs de diamant et de sphalérite. [25]

VIII. Méthodes de calculs

La description des propriétés physiques (électronique, optique, propriétés structurales) des cristaux ou des systèmes moléculaires est basée sur les lois de la mécanique quantique. Le problème est de savoir comment dériver les propriétés photoélectriques et structurelles de l'interaction entre particules (ion + électron) à partir de la mécanique moderne [26].

VIII.1. Théorie de la fonctionnelle de la densité

La méthode de calcul *Ab initio* tente de prédire les propriétés des matériaux en résolvant des équations de mécanique quantique sans utiliser de variables ajustables. Dans la méthode *Ab initio*, la Théorie Fonctionnelle de la Densité (*DFT*) proposée par *Hohenberg* et *Kohn* consiste à reconstruire le problème quantique à N corps en un problème impliquant uniquement la densité électronique. Aujourd'hui, la *DFT* constitue l'une des méthodes les plus utilisées pour le calcul quantique des structures électroniques solides, car la réduction des problèmes qu'elle pose permet au calcul d'accéder à l'état fondamental d'un système contenant un grand nombre d'atomes. Électronique [27]

Plusieurs approximations sont à l'origine du succès de la *DFT* :

- Approximation de *Born-Oppenheimer*
- Approximation de *Hartree-Fock*
- Théorèmes de *Hohenberg* et *Kohn*
- Approche de *Kohn* et *Sham*
- Approximation de la Densité locale (*LDA*)
- Approximation du Gradient généralisé (*GGA*)
- Méthodes des ondes planes augmentées linéarités (*FP-LAPW*)

VIII.2. Approche de *Becke-Johnson modified (mBJ)*

mBJ ou *Becke-Johnson modifié* est une nouvelle méthode très efficace pour calculer les propriétés optiques et électroniques. Le résultat de cette méthode est très proche du résultat expérimental. Le potentiel d'échange est donné par l'équation suivante [26] :

$$V_{x\sigma}(r) = c(V_{x\sigma}(r) + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{10t_{\sigma}(r)}{3\rho(r)}} - \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{10t_{\sigma}(r)}{3\rho_{\sigma}(r)}}) \quad (\text{II.8})$$

Où : $t_{\sigma}(r)$ représente la densité de l'énergie cinétique

$V_{x\sigma}$ représente le potentiel de *Becke-Rousul*

IX. Code WIEN2K

Le code *WIEN2K* est un ensemble de programmes écrits en Fortran 90 liés à un script C-SHELL. Il effectue des calculs de mécanique quantique sur les solides périodiques. Il est basé sur la méthode des ondes planes améliorées par linéarisation du potentiel complet et utilise la méthode de l'orbite locale [FP- (L) APW + lo]. Cette méthode vise à résoudre l'équation de *Kohn-Sham* de la Théorie de la Densité Fonctionnelle (*DFT*). Ce qui suit est un diagramme itératif du processus d'auto-cohérence utilisé pour résoudre l'équation de *Kohn-Sham* [24].

Le code a été élaboré initialement par *P.Blaho*, *K.Schwarz* de l'Institut de Chimie des Matériaux de l'Université Technique de Vienne (*Autriche*). Puis il a été amélioré par d'autres collaborateurs. La première version publique du code a été réalisée en 1990. Ensuite, les prochaines versions étaient *WIEN93*, *WIEN97* et *WIEN2k*. [28].

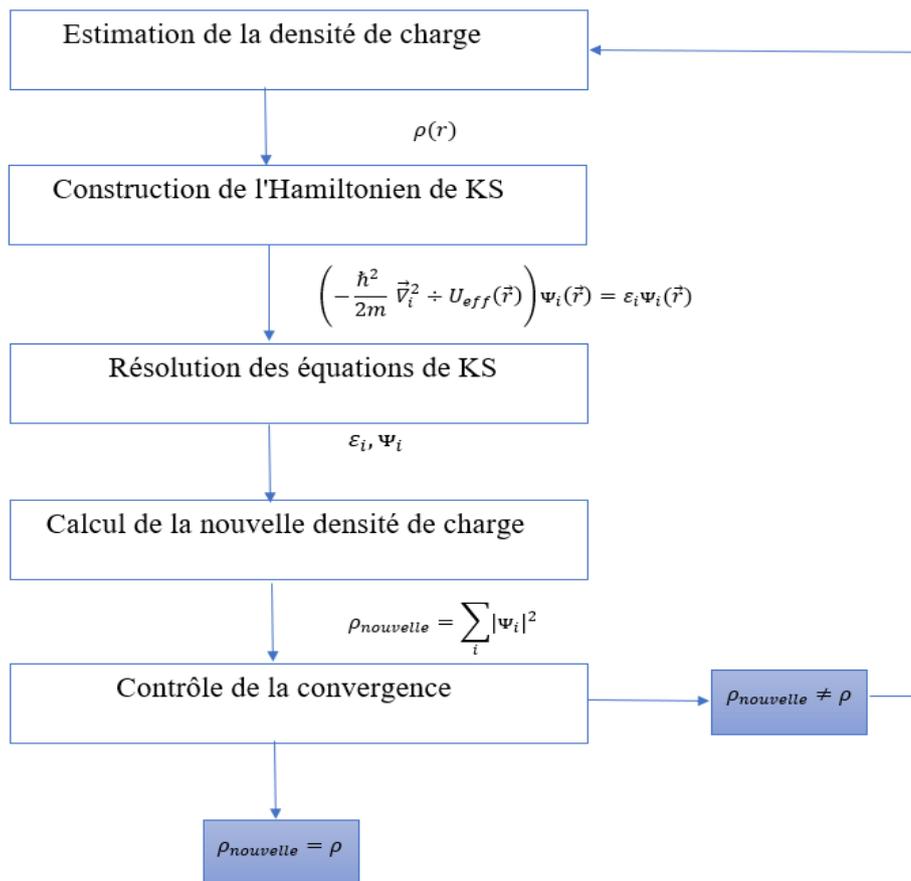


Figure II.9: Organigramme de code Wien2k

X. Conclusion

La technologie des semi-conducteurs a connu la plus forte croissance industrielle, au cours des deux dernières décennies, c'est toujours un outil important pour le développement économique dans les temps modernes, les semi-conducteurs ont de multiples caractéristiques en vue de multiples applications techniques peut être utilisé dans une variété d'applications, en particulier sur le terrain optoélectronique. L'importance de comprendre les propriétés de ces matériaux pour les évaluer dans leur domaine d'application. Dans ce chapitre, nous avons regroupé certaines propriétés générales du matériau dans un groupe semi-conducteur. La connaissance de ces attributs est la détermination de la structure électronique et atomique de ces semi-conducteurs. Dans le chapitre suivant nous allons étudier les propriétés structurales et optoélectroniques de l'alliage à base de *Strontium* (*Sr*) dans la phase zinc-blende nous utiliserons une correction par le potentiel *Tb-mBJ*. Ce dernier est emprunté dans le cadre de la Théorie Fonctionnelle de la Densité (*DFT*) avec l'approximation du gradient généralisé (*GGA*).

Références

- [1] J. Mycielsky and A. M.W. Itowski, *Phys.Stat.Sol.(b)* 134 (1986) 13
- [2] L. Vegard, *Z. Phys.* 5 (1921) 17
- [3] REFICE, F. Z. (2016). *Etude théorique des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs* (Doctoral dissertation, Université Mohamed Boudiaf, M'sila).
- [4] J. E. Bernard and A. Zunger, *Phys. Rev.* B36, 3199 (1987).
- [5] BAAZIZ, H. (2005). *Etude des propriétés électroniques et structurales des alliages semi-conducteurs penternaire $G_{x}IN_{1-x}PySBzAS_{1-y}z$* (Doctoral dissertation, Batna, Université El Hadj Lakhder. Faculté des Sciences).
- [6] Dimitri GALAYKO, 2005, Cours 7. *Introduction des composants a semiconducteur.*
- [7] *Physique des semi-conducteurs : Fondamentaux - Introduction.* http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_M05_C02/co/Grain_OPI_fr_M05_C02_1.html.
- [8] Futura. « *Théorie des bandes* ». Futura, <https://www.futura-sciences.com/sciences/definitions/chimie-theorie-bandes-5040/>.
- [9] *Chimie du solide.* http://public.iutenligne.net/chimie/valls/chimie-du-solide/propri_semiconducteurs_1.htm.
- [10] Thomas ZIMMER, *Semi-conducteurs et jonction p-n*, Université de Bordeaux, France.
- [11] B.N. BRAHMI, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013)
- [12] A. AOUINA, Mémoire de Magister en physique, Univ Mentouri Constantine (2017)
- [13] C. KITTEL, « *physique de l'état solide* », Ed. Dunod Université (7ème édition (1998)).
- [14] Christian NGO, Hélène NGO, 2012, *Physique des semi-conducteurs* Dunod(4^{ème} edition (2012))
- [15] A. HREIBI, « *Hybridation de fibres optiques et de nanoparticules semiconductrices Application aux sources lumineuses* », Thèse de Doctorat, Université de Limoges, (2012).
- [16] P. FALLER, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg (1993).
- [17] R. BOUZERAR, « *Théorie pour les systèmes désordonnés de spins localisés en interaction avec des porteurs itinérants : Les semi-conducteurs magnétiques dilués* », Thèse de Doctorat, Université De Picardie, 2008.
- [18] P. BARANSKI, V. KLOTEHKOV, I. POTYKERITCH, « *Electronique des semi-conducteurs* », Ed. Mir Moscow, 1978.
- [19] A. TAABOUCHE, « *Contribution à l'étude structurale et microstructurale de films ZnO obtenus par ablation laser* », Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, (2010).
- [20] A.S. POVARENYKH, "*Crystal chemical classification of materials*", éd. New York-London (1972).

- [21] P. RIBLET, thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg (1995).
- [22] F. TINJOUX, Thèse de doctorat, université Joseph Fourier, Grenoble I (2003).
- [23] Melouka BOUANANI, *Prédiction des propriétés structurales et électroniques de phosphore d'indium dopé en manganèse*. Mémoire de Master .Université Dr Moulay Tahar de Saida. (2017).
- [24] BENATMANE Khaled, *'Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V '*, thèse de Magister, Université Elhadj Lakhdar Batna ;2011.
- [25] COHEN, Marvin L., et James R. Chelikowsky. « *IV–VI Semiconductors* ». *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, édité par Marvin L. Cohen et James R. Chelikowsky, Springer, (1988), p. 172-88. Springer Link, doi:10.1007/978-3-642-97080-1_11.
- [26] ZAIR, A. *Modélisation et simulation des propriétés optoélectroniques d'alliage à base de nitrures* (Doctoral dissertation, 02-02-2020).
- [27] Virginie TRINITE-QUEQUET, 2006, *Etude ab initio et simulation à l'Echelle atomique des transitions de phase du titane*.
- [28] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka J. Luitz (2016)
- [29] BENSTAALI, W. *ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES ET MAGNETIQUES DES COMPOSES ZnX/CdX DOPES PAR DES METAUX DE TRANSITION* (Doctoral dissertation, Université de Mostaganem-Abdelhamid Ibn Badis, (2014)).
- [30] AID, A. (2019). *Etude de quelques propriétés physiques de L'alliage BxIn1-xSb en utilisant les méthodes de premiers principes* (Doctoral dissertation, Université Mohamed BOUDIAF de M'Sila).

Chapitre III
Résultats Et Discussion

C *hapitre III*

RESULTATS ET DISCUSSION

Le progrès scientifique est étroitement lié au développement de la physique. Les semi-conducteurs utilisent leurs caractéristiques pour produire certains dispositifs électroniques et optoélectroniques [1]. Actuellement, les alliages multicomposants ont fait l'objet d'une grande attention en raison de leur utilisation comme substrats, revêtements et éléments actifs dans les dispositifs photoniques des dispositifs photoniques à grande vitesse [2-3] et dans d'autres applications [4]. Les caractéristiques de fonctionnement de l'appareil dépendent des caractéristiques électroniques des matériaux constitutifs. Ces propriétés peuvent être améliorées grâce à l'utilisation d'alliages multicomposants, et peuvent conduire à de nouveaux matériaux semi-conducteurs avec des écarts d'énergie couvrant la bande spectrale [5].

Ces dernières années, en raison de l'application des semi-conducteurs *II-VI* et de leurs alliages dans les dispositifs photovoltaïques (tels que l'optique électronique et les cristaux photoélectriques) et leurs applications dans les diodes électroluminescentes récemment réalisées, les gens ont suscité un grand intérêt [6].

Nous étudierons dans ce chapitre les propriétés optoélectroniques de l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$ en phase zinc-blende, nous utiliserons le potentiel $Tb-mBJ$ pour la correction. Lorsque la concentration x varie de 0 à 1, ce dernier emprunte le gradient approché *Perdew-Burke-Ernzerhof* (*PBE-GGA*) dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (*DFT*) En conséquence, nous avons utilisé le code *WIEN2k* [7].

I. Propriétés structurales

Nous avons traité les états Sr ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2$), S ($1s^2 2s^2 2p^6$), Se ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$). Les calculs sont performés par le paramètre de convergence $RMT\ kmax=8$ qui correspond à l'énergie de stabilité. D'autres valeurs de paramètres sont $Gmax=10$ (le maximum des ondes planes utilisées). $R_{MT}=2.5$ a.u. Le processus de l'itération est répété jusqu'à ce que l'énergie totale converge pour une précision de 10^{-6} Ry. L'énergie qui sépare les états de valence des états de cœur, a été choisie égale à -6 Ry.

L'énergie totale du système autour de la structure dont la valeur d'équilibre change est calculée. La structure optimisée est assouplie par l'algorithme basé sur la force de *Hellmann-Feynman*. Les paramètres de la maille, le module de compression et sa première dérivée sont déduits à l'aide de l'équation de *Murnaghan*[8].

$$E(V) = E_0(V) + \frac{B_0 V}{B'} \left[\frac{1}{(B'-1)} \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} + 1 \right] \quad (III.1)$$

Avec

E : l'énergie totale du système.

B' : La dérivée première du B_0 .

E_0 : L'énergie de l'état fondamentale.

V : volume de maille.

B_0 : représente le module de compression.

V_0 : Volume initial de maille

Le module de compressibilité est évalué au minimum de la courbe $E(V)$ par la relation suivante [8] :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \quad (III.2)$$

Tableau III.1 : Le paramètre de maille a_0 , le module de compression B et la dérivée de la pression B'

| x (Se) | Méthode | $a_0(\text{Å})$ | B(GPa) | B' |
|--|-------------------------|-----------------------|----------------------|--------|
| SrS | PBE-GGA | 6.0606 | 47.5296 | 4.6205 |
| | Exp | 6.024 ^[15] | 58 ^[15] | |
| | Autres calculs (LDA) | 5.905 ^[15] | 57.7 ^[15] | |
| SrS_{0.75}Se_{0.25} | PBE-GGA | 6.1240 | 45.9526 | 4.3799 |
| | Autres calculs (LDA) | 5.962 ^[15] | 55.7 ^[15] | |
| SrS_{0.50}Se_{0.50} | PBE-GGA | 6.1837 | 43.7490 | 4.4865 |
| | Autres calculs (LDA) | 6.018 ^[15] | 53.6 ^[15] | |
| SrS_{0.25}Se_{0.75} | PBE-GGA | 6.2443 | 41.9197 | 4.1659 |
| | Autres calculs (LDA) | 6.071 ^[15] | 51.5 ^[15] | |
| SrSe | PBE-GGA | 6.3061 | 40.8841 | 3.9049 |
| | Exp | 6.236 ^[15] | 45 ^[15] | |
| | Autres calculs (LDA) | 6.124 ^[15] | 49.8 ^[15] | |

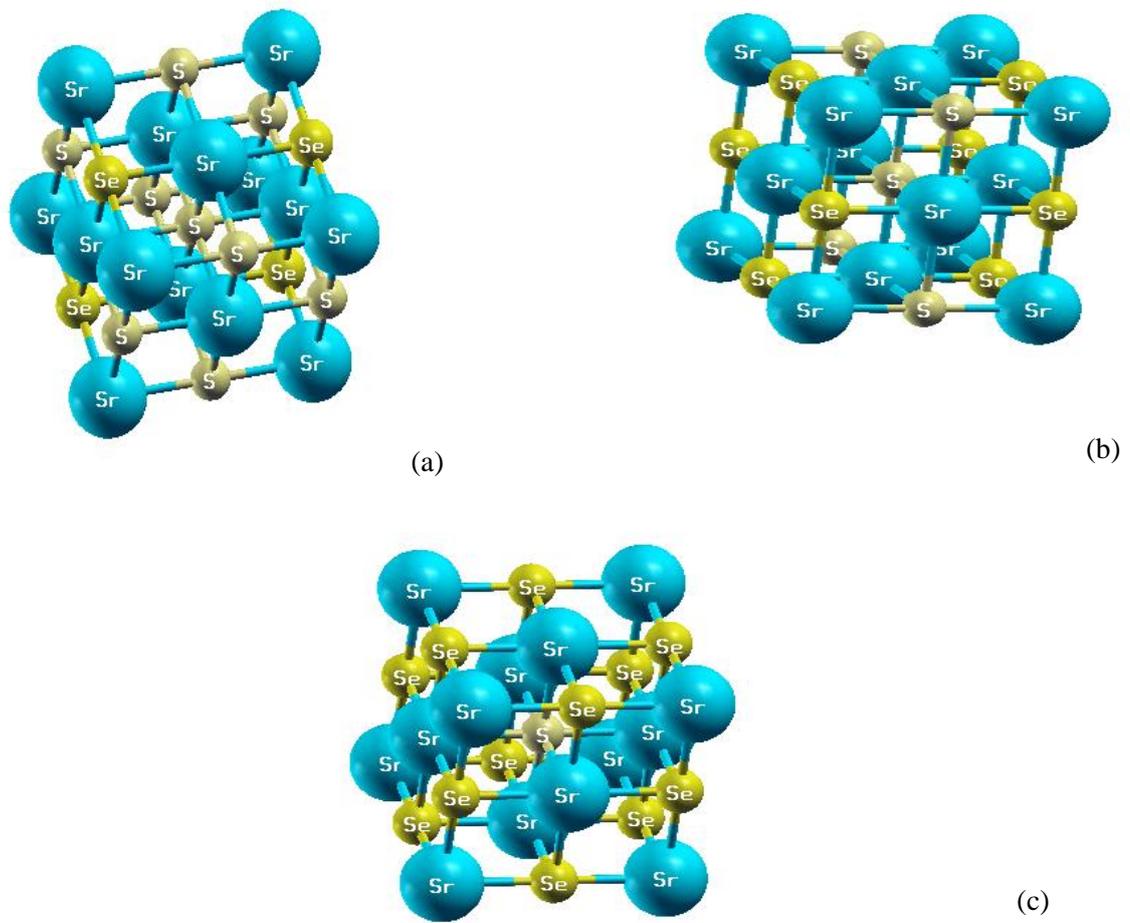


Figure III.1 : Représentation de la structure (a) $\text{SrS}_{0.75}\text{Se}_{0.25}$, (b) $\text{SrS}_{0.50}\text{Se}_{0.50}$ et (c) $\text{SrS}_{0.25}\text{Se}_{0.75}$

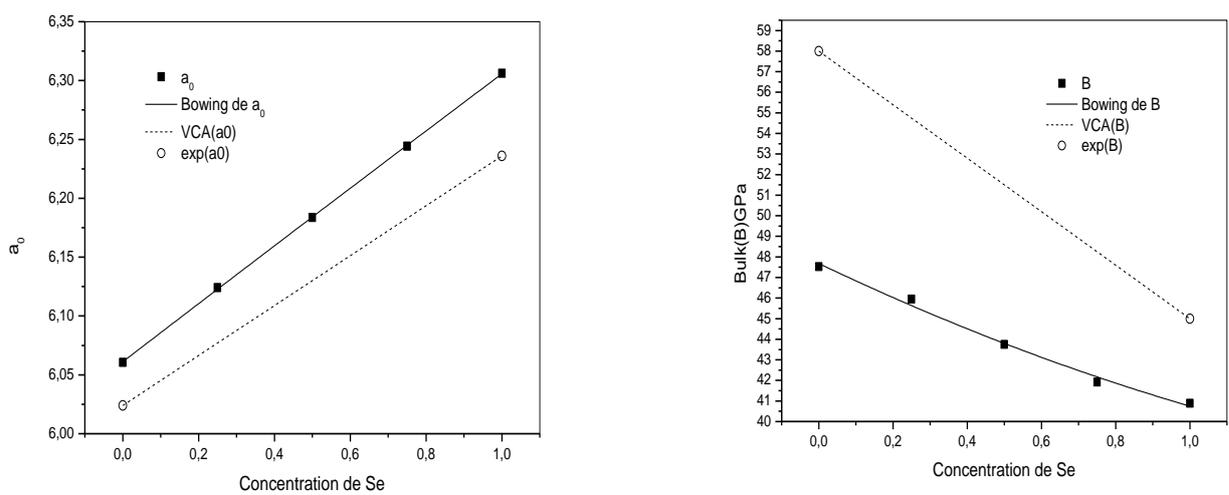


Figure III.2 : Variation du paramètre de maille a_0 et du module de compression B en fonction de la concentration x

II. Propriétés électroniques

En physique du solide, les électrons d'un solide ne peuvent obtenir des valeurs d'énergie que dans un certain intervalle, et ces valeurs d'énergie sont séparées par une « bande » interdite. Ce fait conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure de bandes. Les bandes d'énergie donnent les énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes sont représentés sur la *zone de Brillouin* de chaque solide. La première *zone de Brillouin* d'un réseau *FCC* est illustré dans la figure (III.3) où nous avons noté les points de haute symétrie par les lettres Γ , X, L, W, [9]

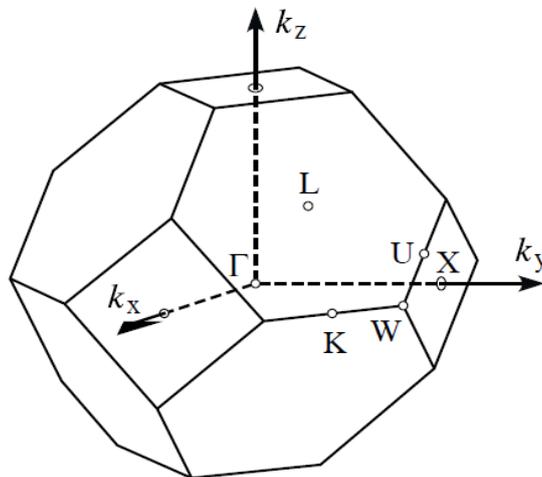
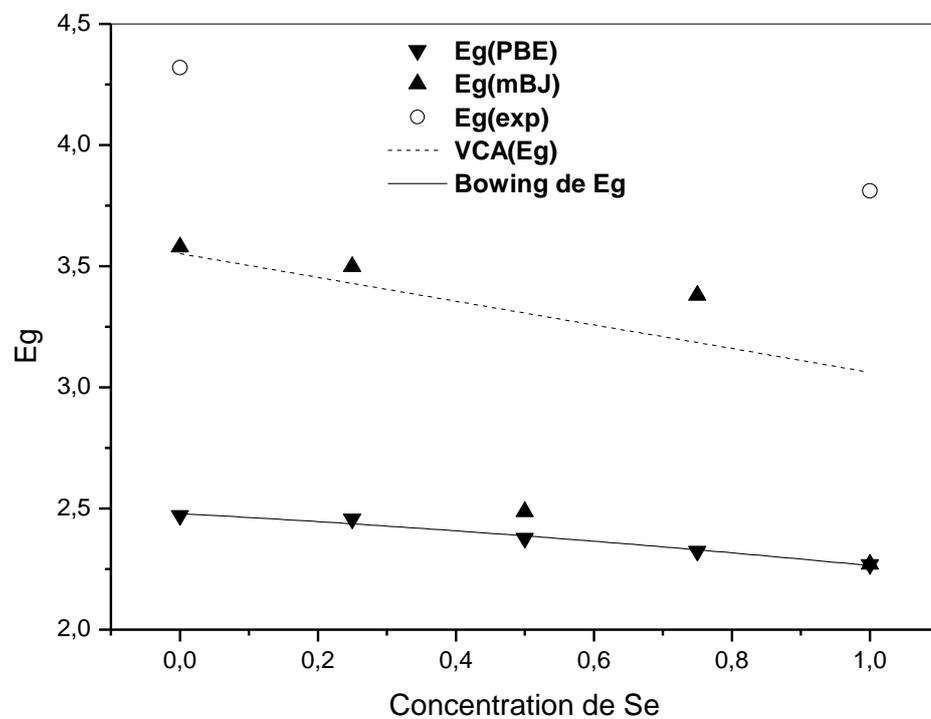
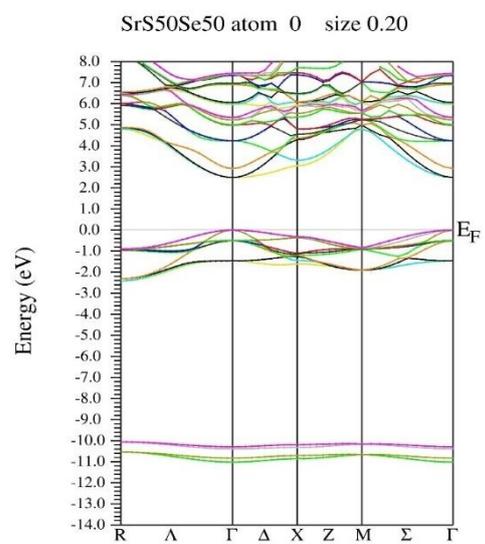
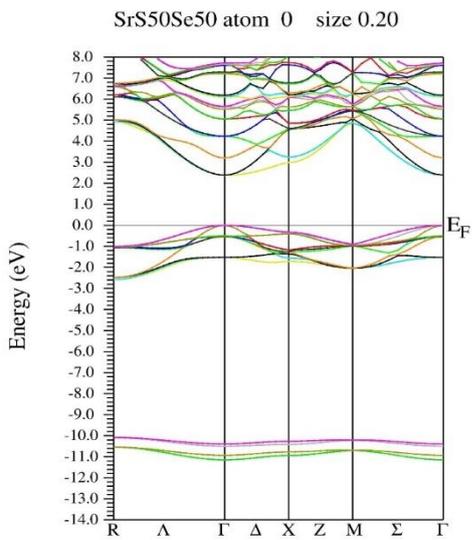
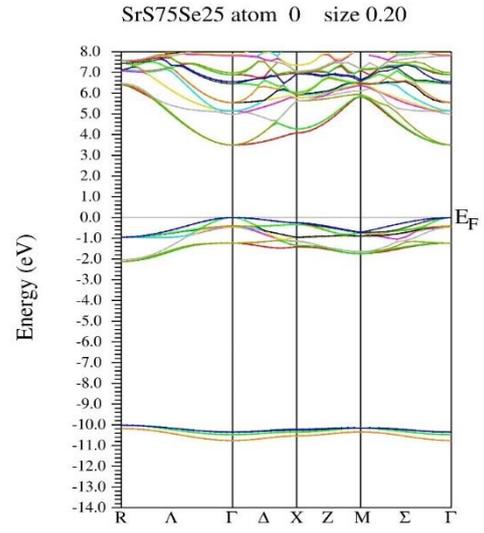
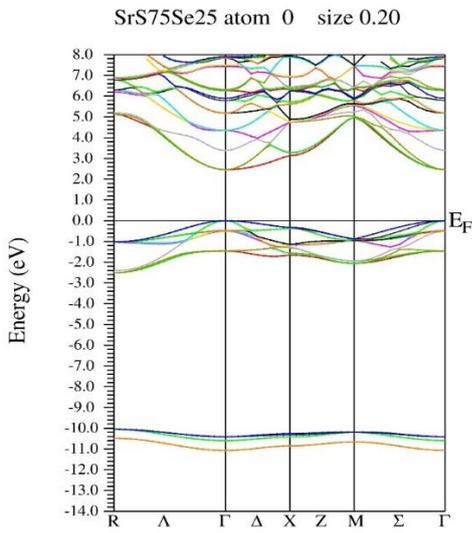
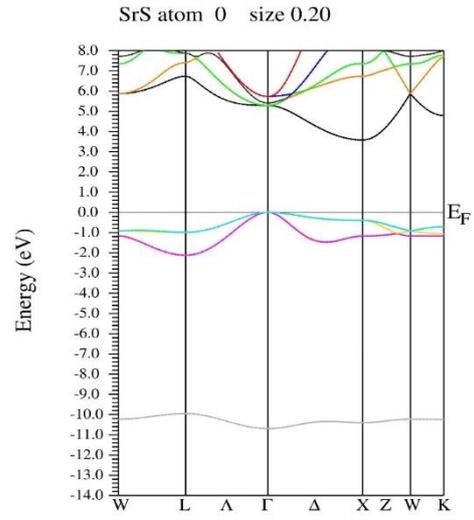
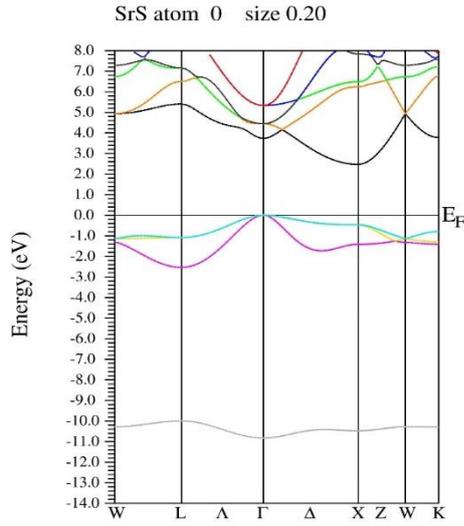


Figure III.3 : Première zone de Brillouin d'un réseau de FCC [9]

Tableau III.2 : Calculs des énergies de gaps pour l'alliage SrS_xSe_{1-x}

| $x(\text{Se})$ | $E_{g\Gamma-\Gamma}$ | | $E_{g\Gamma-x}$ | | Expérimental | Autres calculs (EV-GGA) |
|--|----------------------|--------|-----------------|---------|--------------|----------------------------|
| | PBE- GGA | Tb-mBJ | PBE- GGA | Tb-mBJ | | |
| SrS | | | 2.47071 | 3.579 | 4.32 | 3.389 ^[15] |
| SrS_{0.75}Se_{0.25} | 2.45663 | 3.498 | | | | 3.317 ^[15] |
| SrS_{0.50}Se_{0.50} | 2.37687 | 2.487 | | | | 3.218 ^[15] |
| SrS_{0.25}Se_{0.75} | 2.32337 | 3.38 | | | | 3.121 ^[15] |
| SrSe | | | 2.26906 | 2.27093 | 3.81 | 3.065 ^[15] |

**Figure III.4** : Variation de l'énergie de gap (Γ) en fonction de la concentration x



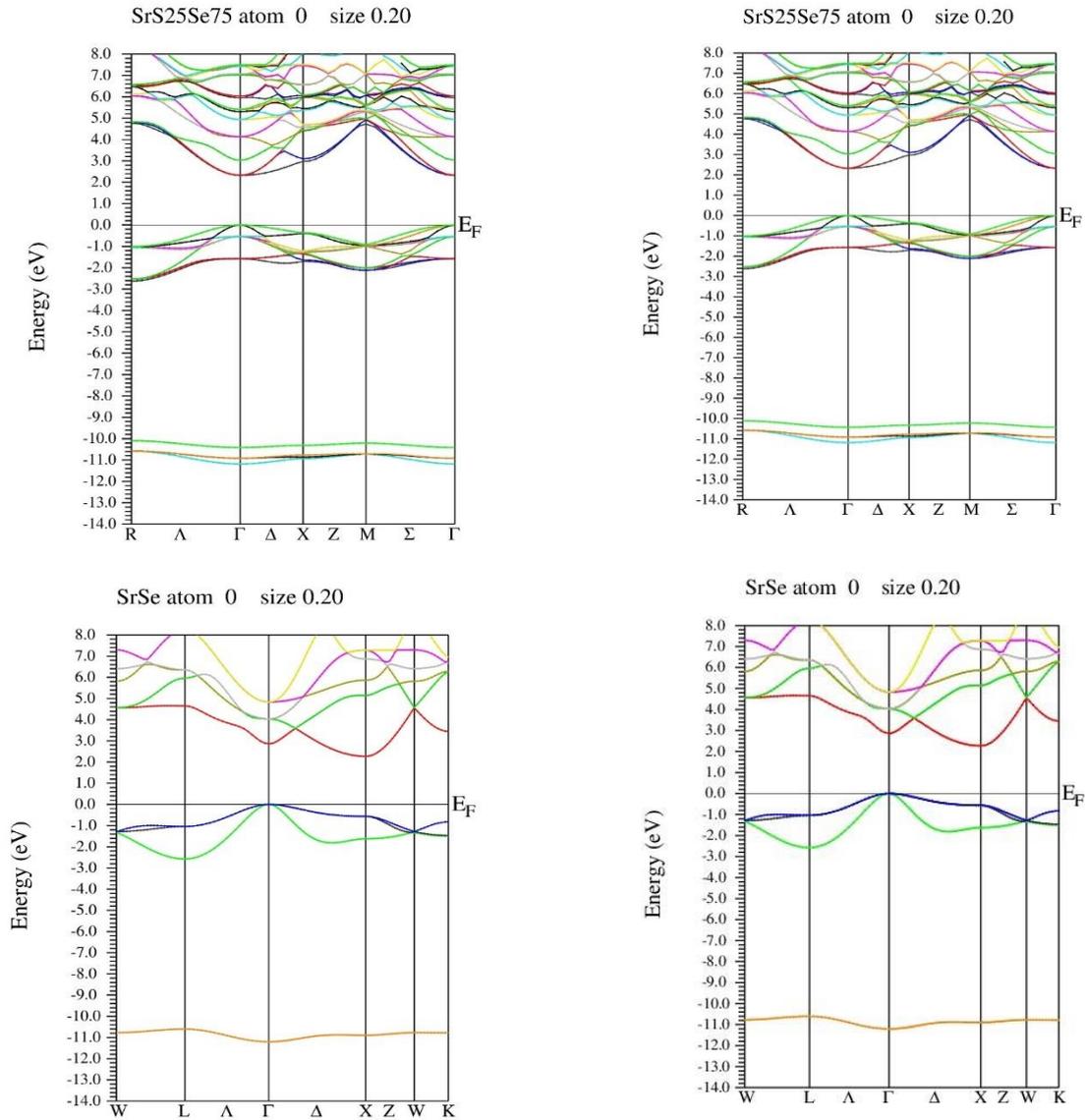


Figure III .5 : Structure de Bande calculée à gauche par GGA-PBE à droite par Tb-mBJ

IV. Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont intimement liées à leur structure électronique. Pour une énergie allant jusqu'à 14 eV.[5]

Tableau III.3 : Valeurs des pics d'énergie, la fonction diélectrique, indice de réfraction, indice de réflexion, coefficient d'absorption et la conductivité optique

| Concentration de (Se) | Méthodes | E_0 | E_1 | E_2 | E' | $\epsilon_1(0)$ | $\epsilon_2(0)$ | $\epsilon(0)$ | $R(0)$ | $n(0)$ | α $\times 10^{-4}$ | $\sigma(0)$ |
|--------------------------|----------|---------|---------|---------|---------|-----------------|-----------------|---------------|---------|---------|------------------------------|-------------|
| x=0 | PBE- | 2,8708 | 6,16338 | 6,97972 | 7,68722 | 4,57471 | 0,03076 | 4,574813 | 0,13165 | 2,13887 | 9,91977 | 0,00753 |
| | GGA | - | - | - | - | 3,62626 | 0,01861 | - | 0,09716 | 1,90428 | 6,74073 | 0,00597 |
| | Tb-mBJ | | | | | | | | | | | |
| x=0.25 | PBE- | 2,54427 | 4,5307 | 6,00011 | 6,70761 | 4,70429 | 0,03332 | 4,704408 | 0,13608 | 2,16895 | 10,6 | 0,00774 |
| | GGA | - | - | - | - | 3,72454 | 0,0201 | - | 0,10097 | 1,92991 | 7,18495 | 0,00613 |
| | Tb-mBJ | | | | | | | | | | | |
| x=0.50 | PBE- | 2,84359 | 4,50349 | 5,89127 | 6,54434 | 4,8386 | 0,03529 | 4,838728 | 0,14059 | 2,1997 | 11,1 | 0,00796 |
| | GGA | - | - | - | - | 4,65239 | 0,03324 | - | 0,1355 | 2,15695 | 10,6 | 0,00766 |
| | Tb-mBJ | | | | | | | | | | | |
| x=0.75 | PBE- | 2,65311 | 4,44906 | 5,75521 | 6,51713 | 4,99007 | 0,03765 | 4,990212 | 0,14557 | 2,2338 | 11,6 | 0,00821 |
| | GGA | - | - | - | - | 4,98953 | 0,03765 | - | 0,14606 | 2,23374 | 11,6 | 0,00821 |
| | Tb-mBJ | | | | | | | | | | | |
| x=1 | PBE- | 2,65311 | 4,31301 | 5,56473 | 6,32665 | 5,07446 | 0,03887 | 5,074608 | 0,14832 | 2,25267 | 11,9 | 0,00835 |
| | GGA | - | - | - | - | 4,03934 | 0,02397 | - | 0,11286 | 2,00982 | 8,22634 | 0,00665 |
| | Tb-mBJ | | | | | | | | | | | |

IV.1. Fonction diélectrique complexe $\varepsilon(\omega)$

La fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ est utilisée pour décrire la réponse linéaire du matériau au rayonnement électromagnétique qui est lié à l'interaction des photons avec les électrons.

La fonction diélectrique est déterminée par les transitions électroniques entre la bande de valence et la bande de conduction. Il est calculé en évaluant les éléments de la matrice comme une représentation d'impulsion. Il utilise le formalisme d'*Ehrenreich* et *Cohen* pour obtenir la partie réelle (la partie dispersée) et de la partie imaginaire (la partie absorbée) donnée par la formule suivante [10] :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{III.3})$$

Tel que la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ est donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{q_e^2 \hbar}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} |M_{cv}(k)|^2 \delta[\omega_{cv}(k) - \omega] d^3k \quad (\text{III.4})$$

Avec q est la charge de l'électron et M est sa masse :

$$M_{cv}(k) = \langle u_{ck} | e \nabla | u_{vk} \rangle \quad (\text{III.5})$$

Qui représente les éléments de la matrice pour les transitions entre la bande de valence et la bande de conduction avec e est le vecteur de polarisation du champ électrique et $u_{ck}(r)$ est la partie périodique de la fonction d'onde de *Bloch* pour un état de la conduction de bande et du vecteur d'onde k , [10]

$$\omega_{cv}(k) = E_{ck} - E_{vk} \quad (\text{III.6})$$

C'est l'énergie de l'excitation.

La partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique dépend de la transition électronique au début de l'absorption. La transition directe entre les bandes de fréquences peut être dérivée de la reconnaissance de la structure de la bande d'énergie. [10]

La partie réelle $\varepsilon_1(\omega)$ de la fonction diélectrique peut être obtenue à partir de la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ en utilisant la relation *Kramers-Kronig* suivante :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.7})$$

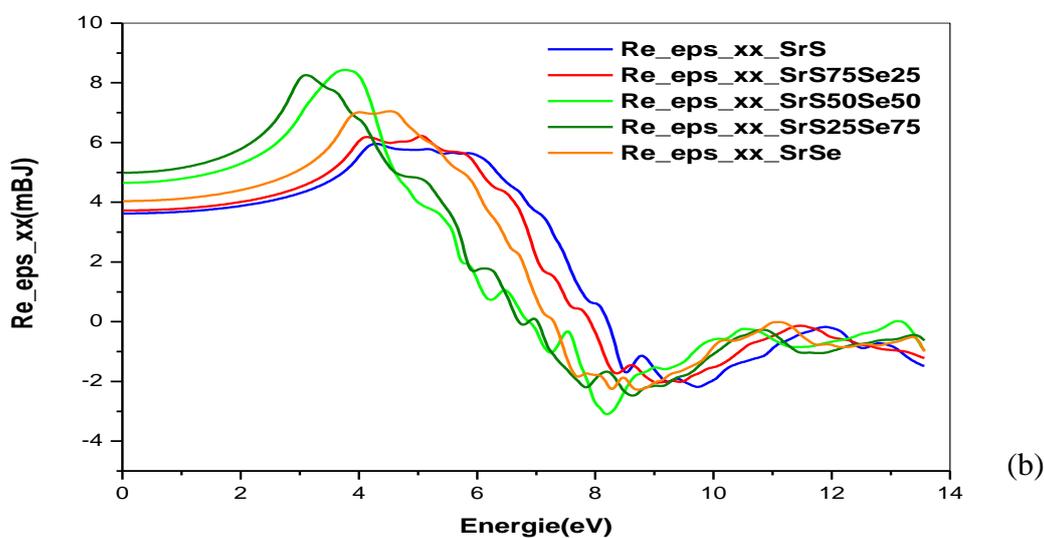
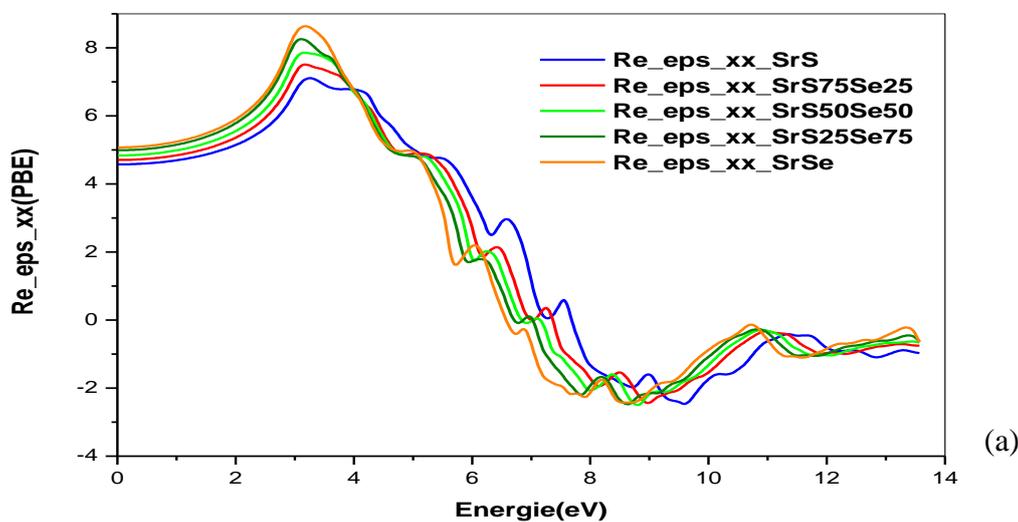
P représente la valeur principale de l'intégrale

La connaissance de la partie réelle et de la partie imaginaire permet de calculer les autres fonctions optiques telles que la réflectivité, la conductivité optique et l'indice de réfraction.

Afin de calculer les propriétés optiques à partir de la structure de bande, une plage d'énergie de photons de 0 - 30 eV a été choisie. Pour deux raisons, les propriétés optiques ont été montrées de l'intervalle d'énergie photonique de 0-14 eV [10] :

- Montrer le comportement optique du matériau dans le spectre visible.
- Décrire la limite de l'anisotropie des propriétés optiques du matériau.

D'où on a obtenu les figures suivantes :



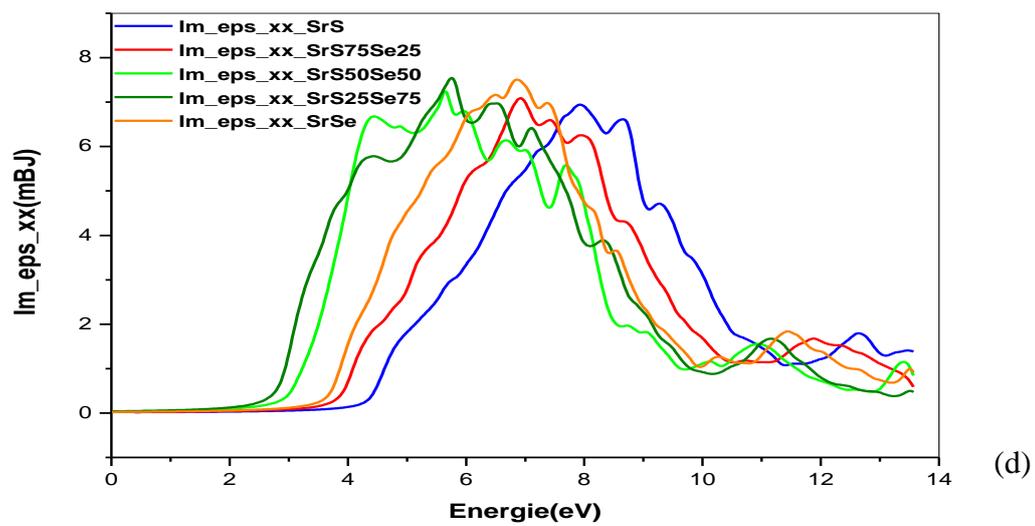
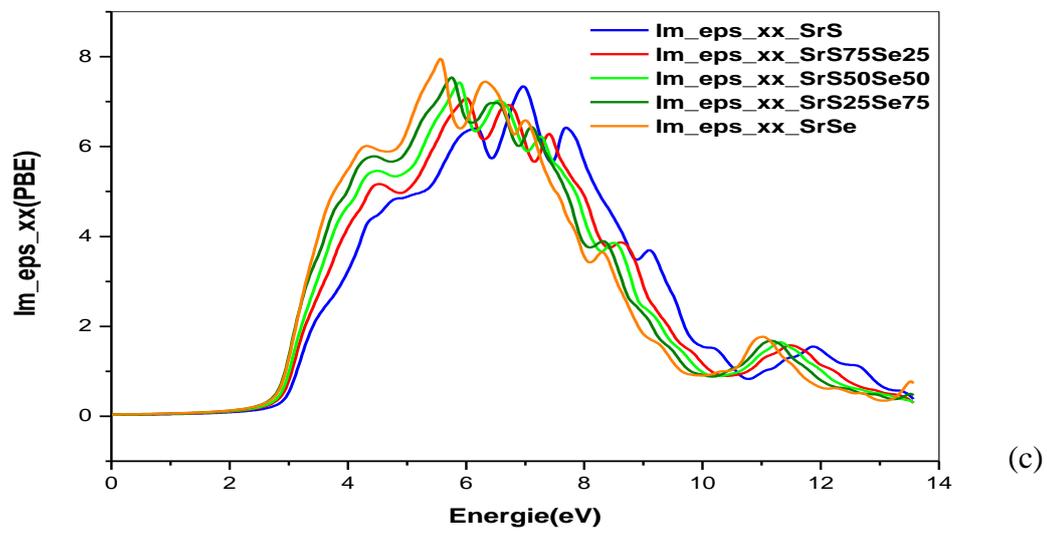


Figure III.6 : Fonction diélectrique partie réelle : (a) par GGA-PBE, (b) par Tb-mBJ et imaginaire (c) par GGA-PBE, (d) par Tb-mBJ.

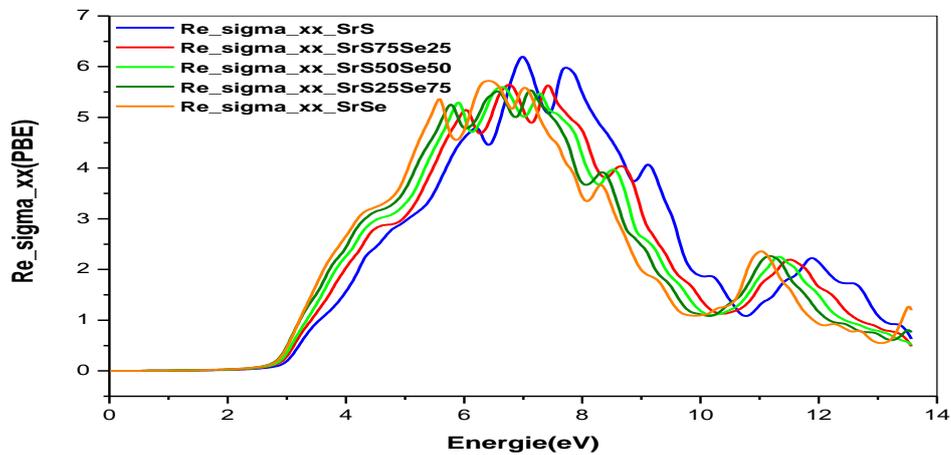
IV.2. Conductivité optique $\sigma(\omega)$

En absorbant des photons, l'état occupé est excité à un état inoccupé au-dessus du niveau de *Fermi*. Cette transition inter-bandes est appelée "*conduction optique*" et l'absorption de photons est appelée "*absorption inter-bandes*". Le terme "*conduction optique*" signifie la conduction électrique en présence du champ électrique inclus dans la lumière.

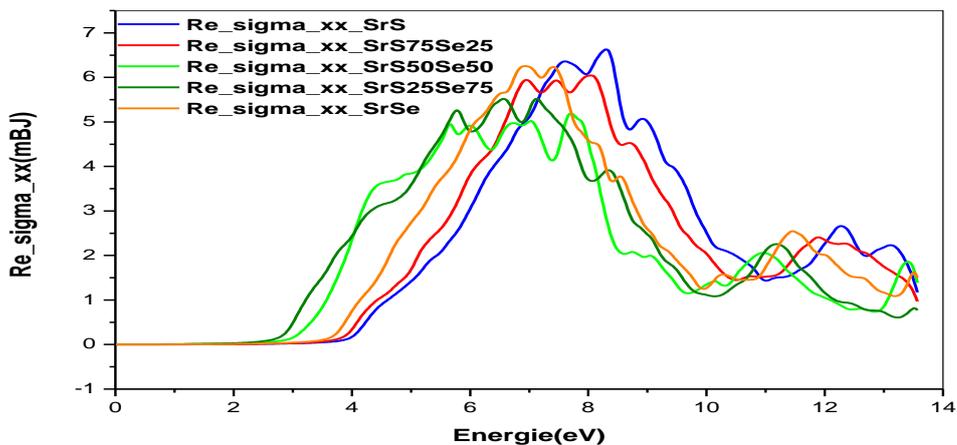
La partie réelle de la conductivité optique est calculée selon la relation suivante : [10]

$$Re \sigma(\omega) \approx \frac{\omega}{4\pi} \ln \varepsilon(\omega) \quad (III.8)$$

Pour les matériaux choisis, on a obtenu les résultats suivants :



(a)



(b)

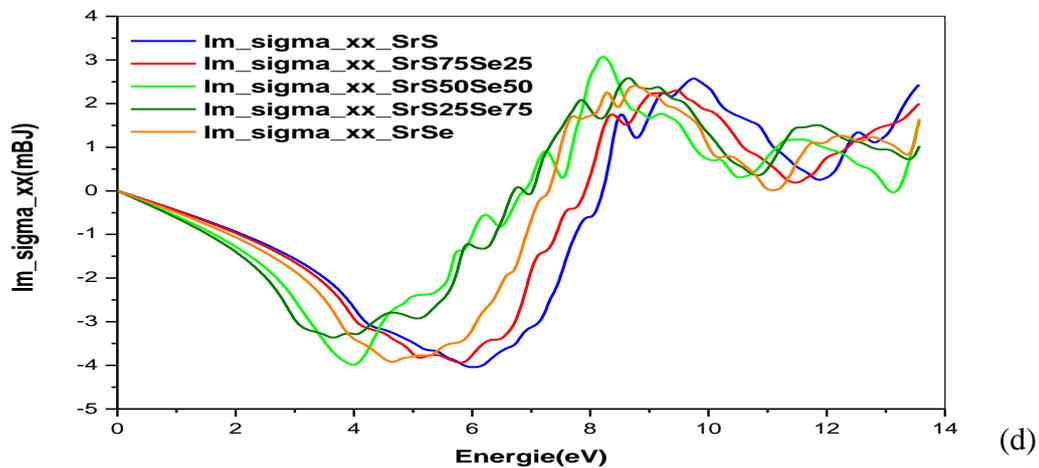
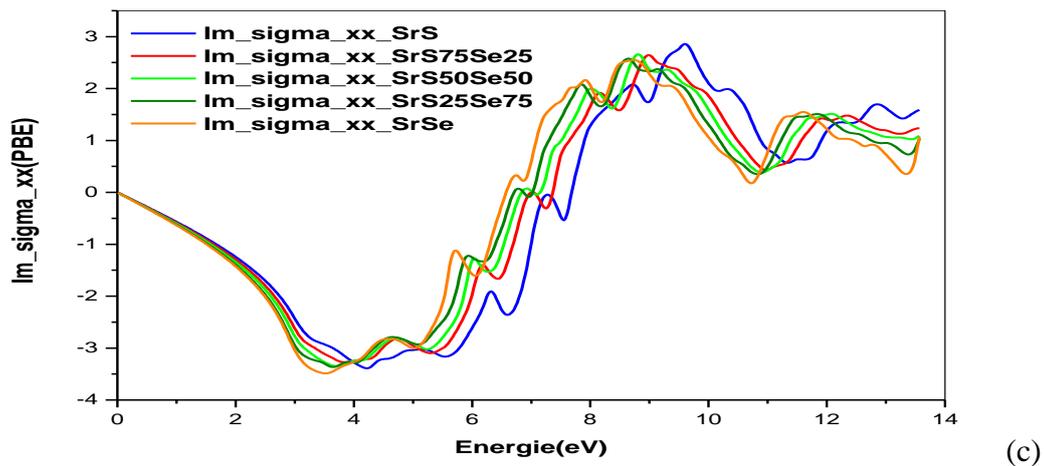


Figure III.7 : Conductivité optique partie réelle : (a) par GGA-PBE, (b) par Tb-mBJ et imaginaire : (c) par GGA-PBE, (d) par Tb-mBJ.

IV.3. Coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$

Le coefficient d'absorption entre bandes $\alpha(\omega)$ caractérise la partie de l'énergie absorbée par le solide. Il détermine que la lumière d'une longueur d'onde spécifique peut pénétrer dans le matériau avant d'être absorbée. Dans un matériau à faible coefficient d'absorption, la lumière n'est que faiblement absorbée et, si le matériau est assez fin, il apparaît transparent pour cette longueur d'onde. Le coefficient d'absorption dépend du matériau et aussi de la longueur d'onde de la lumière qui est absorbée.[10]

Le coefficient d'absorption peut être calculé via la fonction diélectrique par la relation suivante :

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\omega}{c} \sqrt{\frac{-\text{Re} \varepsilon(\omega) |\varepsilon(\omega)|}{2}} \quad (\text{III.9})$$

L'absorption de photons est le point de départ de la transition optique interbande. Cela ne se produira pas seulement pour les énergies déterminées qui représentent les énergies de transition entre les états des énergies ; et c'est pourquoi nous trouvons des énergies qui sont absorbées et d'autres qui ne le sont pas. Notez que lorsque l'énergie du photon est inférieure à l'énergie de l'espace optique, aucune absorption ne se produit.[10]

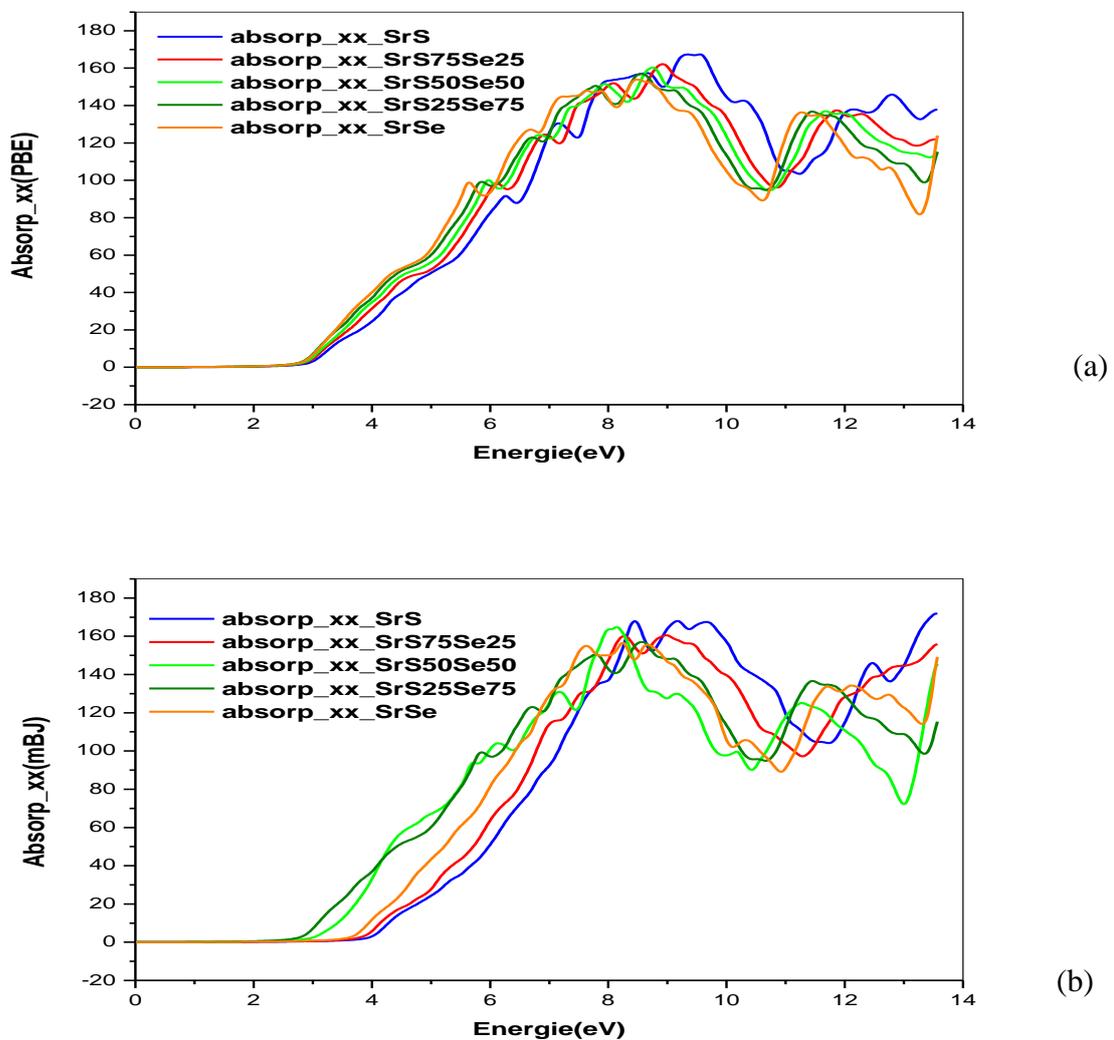


Figure III.8 : Absorption : (a) par GGA-PBE et (b) par Tb-mBJ.

IV.4. Indice de réfraction $n(\omega)$

La propagation d'un faisceau lumineux à travers un milieu translucide est décrite par l'indice de réfraction n . Ce dernier est défini par la relation entre la vitesse de la lumière dans l'espace libre c et celle dans le milieu v selon la relation : [10]

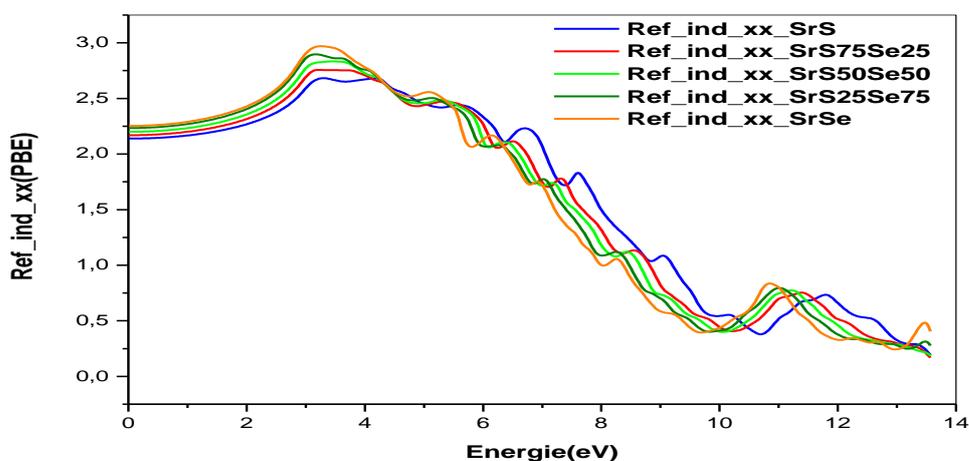
$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{III.10})$$

L'indice de réfraction dépend de la fréquence du faisceau lumineux. Cet effet s'appelle : dispersion. L'indice de réfraction $n(\omega)$ est calculé par la relation suivante :

$$n(\omega) = \left[\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}{2}} \right]^{1/2} \quad (\text{III.11})$$

A basse fréquence ($\omega = 0$), la relation de n devient :

$$n(0) = \varepsilon_1^{\frac{1}{2}}(0) \quad (\text{III.12})$$



(a)

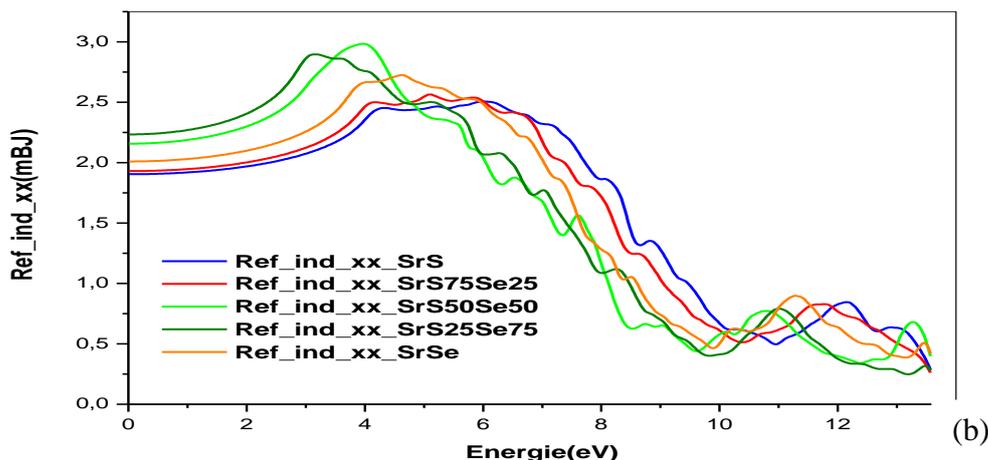


Figure III.9 : Indice de réfraction : (a) par GGA-PBE, (b) par Tb-mBJ

IV.5. Coefficient de réflexion $R(\omega)$

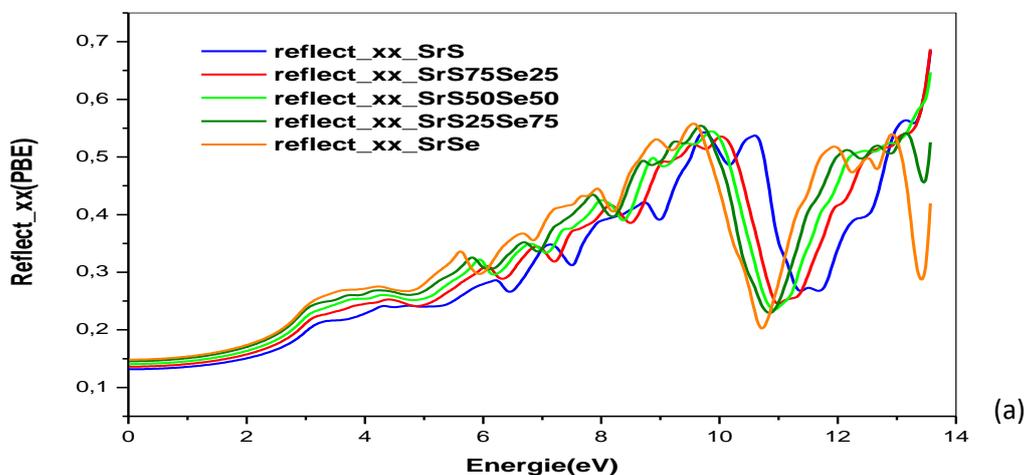
Le phénomène de réflexion qui se produit sur les surfaces avant et arrière est décrit par le coefficient de réflexion qui représente le rapport entre l'énergie réfléchié et l'incident d'énergie sur la surface.[10]

$$R(\omega) = \frac{n+iK-1}{n+iK+1} \tag{III.13}$$

Avec K coefficient d'extinction

Le module de la fonction complexe $R(\omega)$ est donné par la relation suivante :

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2+K}{(n+1)^2+K} \tag{III.14}$$



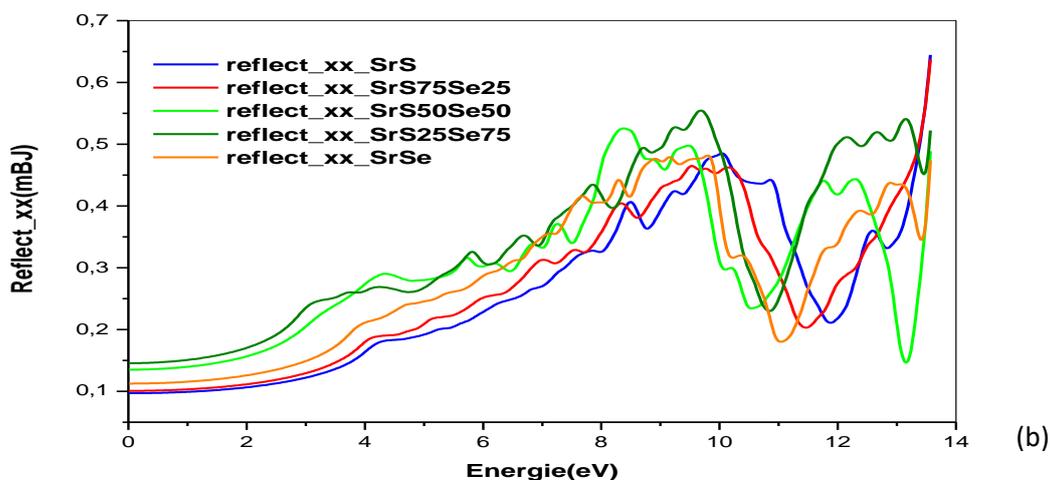


Figure III.10 : Réflexion : (a) par GGA-PBE, (b) par Tb-mBJ

Grâce à l'approximation *PBE*, on peut conclure que les différentes propriétés optiques de l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$ varient avec *S* et *Se*. La comparaison des résultats théoriques obtenus avec les expérimentaux montre une bonne approche. Les paramètres de courbure sont déduits pour tous ces propriétés. Nous avons tracé ces écarts par rapport à la composition de *S* et *Se* dans la figure (III.11).[5]

Tableau III.4 : Valeurs de courbure pour les paramètres structuraux, électronique et optiques l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$

| b_0 | a_0 | B_0 | E_g | E_0 | E_1 | E_2 | E' | $\epsilon(0)$ | $n(0)$ | $R(0)$ | $\sigma \times 10^{-4}$ | $\alpha(0)$ |
|---------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------|---------------|---------|---------|-------------------------|-------------|
| 0.24715 | -8.59482 | -0.37646 | -1.56526 | -9.73904 | -5.65478 | -5.93209 | 0.59785 | 0.09319 | 0.01381 | -6.2571 | 4.89185 | |

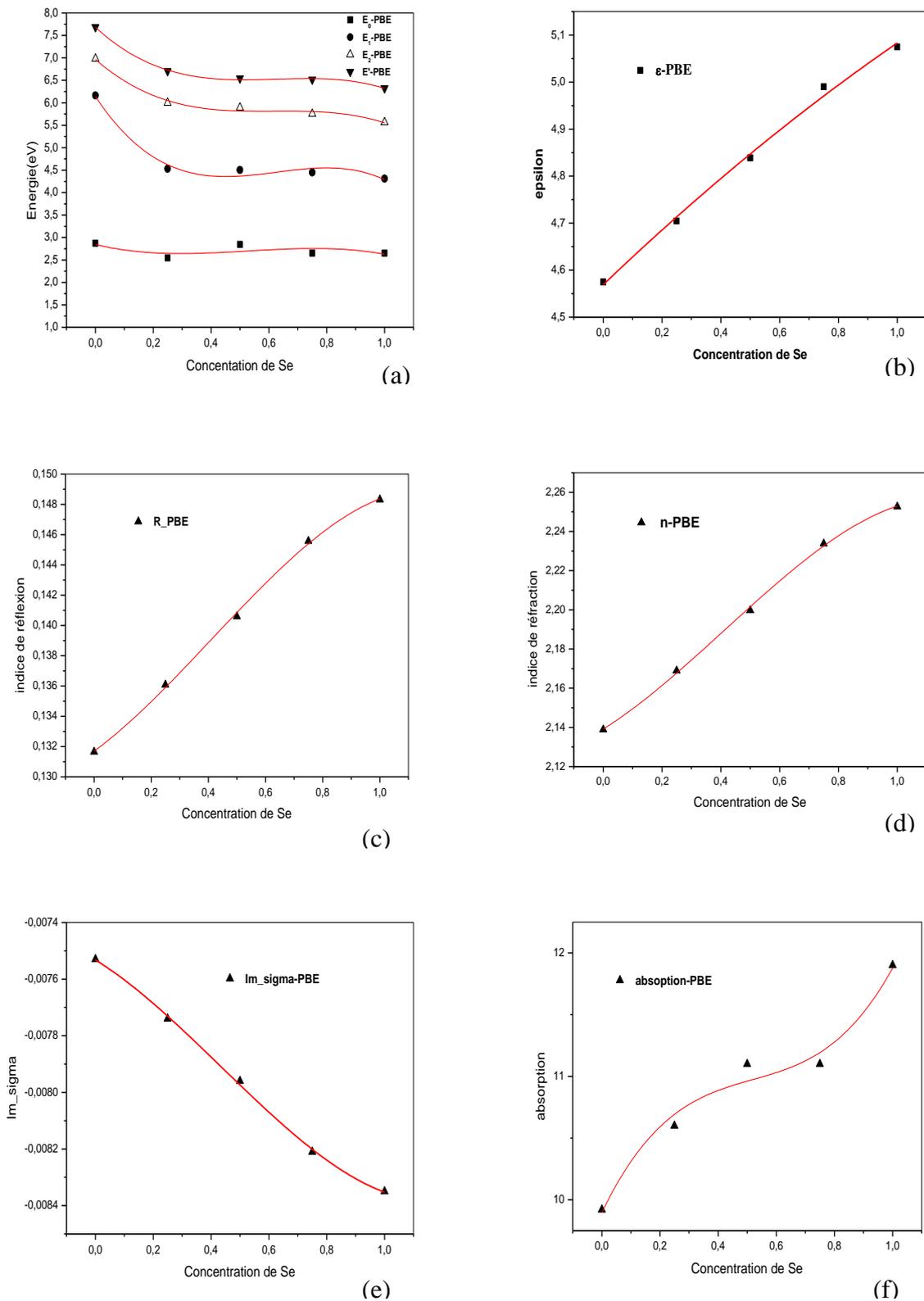


Figure III.11 : Variation des propriétés optiques en fonction de la concentration x de $SrS_{1-x}Se_x$: **a** : Energie, **b** : fonction diélectrique, **c** : l'indice de réflexion et réfraction, **d** : indice d'absorption, **e**: conductivité Optique, **f**: absorption en fonction de la concentration x

V. Interprétations des résultats

➤ Propriétés structurales

- Le tableau (III.1) résume les résultats obtenus à l'état d'équilibre des paramètres structuraux (le paramètre de maille, le module de compression et sa première dérivée) pour l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$ pour différentes concentrations ($x=0$, $x=0.25$, $x=0.5$, $x=0.75$, $x=1$) avec quelques valeurs expérimentales et théoriques. On remarque que les résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux ainsi que les résultats trouvés par d'autres recherches. Les valeurs du module de compression diminuent avec l'augmentation de la concentration x .
- La raison de l'écart par rapport à la Loi de Vegard est due au désaccord des paramètres de maille entre les composés de base formant des alliages ternaires. Nous avons conclu que la valeur la plus élevée du module volumique $45,9526(GPa)$ obtenu pour $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, implique qu'il y a les composés relativement moins compressibles. Nous avons remarqué que la compressibilité dans cet alliage augmente avec la diminution de x de S ou de Se ce qui donne une allure de module de compressibilité de haut en bas.[5]

➤ Propriétés électroniques

- Les structures de bande électronique du SrS , $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et $SrSe$ sont représentées par la figure (III.5) montrent la variation des valeurs des bandes interdites en fonction de la concentration x dans $SrS_{1-x}Se_x$. Elles nous montrent aussi que la nature du gap change (direct à indirect). Pour une concentration $x = 0$ et $x = 1$ du Sélénium, la bande interdite du binaire SrS et $SrSe$ est déterminée par des valeurs de $3.579 (eV)$ et $2.27093 (eV)$ (gap indirect). On voit que plus la valeur de concentration x (en Se) est élevée, plus l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction diminue (le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situées aux points $\Gamma-\Gamma$.) Cette diminution s'arrête à la valeur maximale de x ($x=1$) Les bandes interdites directes et indirectes sont données dans le tableau (III.2), ainsi que les valeurs expérimentales disponibles pour ces alliages.[5]

Les résultats obtenus par la correction *Tb-mBJ* montrent une amélioration pour les structures de bande par rapport à celles du *PBE-GGA*.

Dans la figure (III.4), nous avons illustré les variations du gap d'énergie calculées par rapport aux fonctionnelle *PBE-GGA* et *Tb-mBJ* en fonction de la composition x de ces alliages. Un comportement non linéaire est évident ce qui donne un archer non

négligeable. Cette non-linéarité observée dans les alliages semi-conducteurs est originaire de la non-linéarité de la structure de bande en fonction des potentiels électroniques.[5] *Bernard et Zunger* ont étudié l'origine physique de cette non-linéarité et ils ont conclu par leurs approches, que de courbure est originaire de trois contributions *bVD*, *bCE* et *bSR*, respectivement par la relaxation structurale, échange de charge et déformation de volume. Cette approche a été largement utilisée par plusieurs auteurs [15]. Dans les alliages semi-conducteurs comme $SrS_{1-x}Se_x$, la relaxation structurale (*bSR*) est importante.

➤ Propriétés optiques

- La figure (III.6) montre les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ des semi-conducteurs étudiés qui sont calculées par la méthode *PBE-GGA* et *Tb-mBJ*. La constante diélectrique statique $\varepsilon_1(0)$ obtenue est environ 3.62626 (eV), 3.72454 (eV), 4.65239 (eV), 4.98953 (eV) et 4.03934 (eV) pour *SrS*, $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et *SrSe*. Les pics observés sont dus aux transitions électroniques de la bande de valence vers la bande de conduction. On note que le début du spectre $\varepsilon_2(0)$ est associé aux transitions proches du gap fondamental direct ($\Gamma-\Gamma$) 6.9253 (eV), 5.64636 (eV) et 5.75521 (eV) pour les composés $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$. La connaissance des deux parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique permet de calculer d'autres propriétés optiques.[12]
- La courbe de la conductivité optique en fonction de l'énergie calculée avec *PBE-GGA* et *Tb-mBJ* présentée dans la figure (III.7) pour l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$. Cette courbe présente plusieurs pics 9.7529 (eV), 9.45596 (eV), 7.71443 (eV), 8.63962 (eV) et 8.74846 (eV) pour *SrS*, $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et *SrSe* respectivement, qui correspondent à l'excitation du matériau qui nous ont éclairé sur le nombre d'électrons traversant la bande de valence à la bande de conduction.[13]
- La figure (III.8) montre le coefficient d'absorption α en fonction de l'énergie des photons incidents pour l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$ avec une concentration qui varie de 0 à 1. Nous remarquons que le maximum d'absorption α (bonne absorption) est situé dans l'intervalle d'énergie de 8-10.5 (eV) pour *SrS*, de 7-10 (eV) pour $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, de 7-9 (eV) pour $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, de 7-9.5 (eV) pour $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et de 6.5-9.5 (eV) pour *SrSe*. [13]
- La courbe de variation de l'indice de réfraction dans la gamme d'énergie 0-14 eV présentent un maximum à l'énergie 6.02732 (eV), 5.10214 (eV), 3.98647 (eV), 3.17013 (eV), 4.61233 (eV) pour *SrS*, $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et *SrSe*,

qui correspondent à des pics dans l'ultra-violet à environ de 206.55 (nm), 244.01 (nm), 312.3 (nm), 392.72 (nm) et 269.92 (nm) respectivement. Les spectres font apparaître un comportement anisotrope entre les composants. Il ressort également de la figure, que l'anisotropie diminue avec l'augmentation de l'énergie des photons incidents. L'indice de réfraction n est inversement proportionnel au gap d'énergie.[12]

- La variation de la réflectivité des composés en fonction de l'énergie est présentée dans la figure (III.10). La réflectivité nous informe sur les différents points de transition dans le cristal. Comme pour l'absorption, on remarque une succession de pics très importants qui sont liés à la fonction diélectrique complexe. La courbe de variation de l'indice de réflexion dans la gamme d'énergie 0-14 (eV) présentent un maximum à l'énergie 13.56 (eV), 13.56 (eV), 8.36 (eV), 9.72807 (eV), 9.80 (eV) pour SrS , $SrS_{0.75}Se_{0.25}$, $SrS_{0.50}Se_{0.50}$, $SrS_{0.25}Se_{0.75}$ et $SrSe$,[14]
- Nous avons tracé les écarts par rapport à la composition de S et Se dans la figure (III.11). Comme il est illustré, le $Tb-mBJ$ donne une correction et des valeurs plus précises par rapport à l'approximation de $PBE-GGA$. Nous observons un comportement non linéaire et les paramètres de courbure sont résumés au tableau (III.4). Les résultats du coefficient d'absorption et la conductivité optique montrent un comportement non linéaire au voisinage de S et Se respectivement pour l'alliage $SrS_{1-x}Se_x$ séparé par le biais du troisième ordre donnant lieu à des paramètres de courbure important pour ces propriétés. Cela indique que le coefficient d'absorption et la conductivité optique sont plus sensibles à la composition de S et Se respectivement pour cet alliage que d'autre étude des propriétés physiques.[5]

VI. Conclusion :

Notre étude présente de nouveaux résultats concernant les propriétés électroniques et optiques pour le composé ternaire $SrS_{1-x}Se_x$. Ces résultats sont obtenus en utilisant l'approximation $PBE-GGA$ à l'aide de la correction $Tb-mBJ$. Nous avons porté notre attention sur les paramètres de courbure correspondant à ces propriétés physiques. Nos résultats montrent que leurs comportements correspondants suivent la loi de Vegard. En ce qui concerne l'utilisation du $Tb-mBJ$ conduit à une amélioration des valeurs par rapport au régime classique de $PBE-GGA$. Nous démontrons que la composition de S et Se n'ont pas un effet important sur la variation des propriétés étudiées, sauf pour le coefficient d'absorption et de la conductivité optique. Notre étude donne de nouveaux résultats concernant les paramètres optiques.[5]

Références

- [1] REFICE, F. Z. (2016). *Etude théorique des propriétés électroniques optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs* (Doctoral dissertation, Université Mohamed Boudiaf, M'sila).
- [2] N. BOUARISSA, R. BACHIRI and Z. CHARIFI, Phys.Stat.Sol.(b) 226 (2001) 293.
- [3] T.H. GLISSON, J.R. HAUSER, M.A. LITTLEJOHN, C.K. WILLIAMS, J. ELECTRON.MATER.7(1978) 1.
- [4] K. SHIM, H. RABITZ, JI-H. CHANG, AND T.YAO, J. CRYST.GROWTH, 214/215 (2000) 350.
- [5] B.N. BRAHMI, Thèse Doctorat, Univ Abou Bakr Belkaid Tlemcen (2013)
- [6] BAAZIZ, H. (2005). *Etude des propriétés électroniques et structurales des alliages semi-conducteurs ternaire $Ga_{x}In_{1-x}PySBzAs_{1-y}z$* (Doctoral dissertation, Batna, Université El Hadj Lakhder. Faculté des Sciences).
- [7] J.P. Perdew et al Phys. Rev.Lett.77. 3865, (1996)
- [8] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390
- [9] ZAIR, A. *Modélisation et simulation des propriétés optoélectroniques d'alliage à base de nitrures* (Doctoral dissertation, 2020).
- [10] *The analysis of the Optical Properties of the compound Bi_2S_3* (from my memoir of Magister). <http://wien2k-algerien1970.blogspot.com/2020/04/the-analysis-of-optical-properties-of.html>.
- [11] F. EL HAJ HASSAN, A. BREIDI, S. GHEMID, B. AMRANI, H. MERADJI AND O. PAGÈS, J. alloyCompd. 499 (2010) 80.
- [12] LARBI, R. (2020). *Etude des propriétés structurales et électroniques et optiques des semi conducteurs CdS et ZnO pour des applications en photovoltaïques* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).
- [13] Oussama, D. A. K. H. O. U. C. H. E. (2017). *Etude des propriétés optoélectronique du semi-conducteur ternaire ($CuGaTe_2$)* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).
- [14] BENSTAALI, W. *ETUDE DES PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES ET MAGNETIQUES DES COMPOSES ZnX/CdX DOPES PAR DES METAUX DE TRANSITION* (Doctoral dissertation, Université de Mostaganem-Abdelhamid Ibn Badis, (2014)).
- [15] Labidi, S., Labidi, M., Meradji, H., Ghemid, S., & Hassan, F. E. H. (2010). First-principles Study of Structural, Electronic and Optical Properties of $Sr_{1-x}S_x$ Alloys. *Chinese Journal of Physics*, 48(1), 126-137.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

L'objectif de ce mémoire est de mener des recherches théoriques basées sur les investigations des propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs *II-VI* à base de Strontium en utilisant une combinaison de calculs de la théorie fonctionnelle de la densité selon le premier principe (*DFT*) par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (*FP-LAPW*), implémenté dans le code *WIEN2k* dans l'approximation du gradient généralisé *GGA-PBE* avec la correction *Tb-mBJ*.

Nous avons cité dans un premier temps des généralités sur les matériaux, puis on a essayé d'aborder le domaine des semi-conducteurs avec des explications sur leur propriétés. Dans la deuxième étape de notre travail, nous avons consacré notre étude aux propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage à base du Strontium $SrS_{1-x}Se_x$. Nous avons comparé les résultats de *PBE-GGA* avec ceux de *Tb-mBJ*, cette étude nous a permis d'établir les conclusions suivantes :

- Concernant les alliages ternaires, nous avons montré que les paramètres cristallins, les modules de compressibilités et leurs dérivées varient presque linéairement ce qui est en accord avec la loi linéaire de Vegard, par contre le gap varie d'une manière non linéaire ce qui est traduit par un facteur de désordre, pour ce dernier nos résultats montrent une amélioration par rapport à d'autres calculs et les valeurs expérimentales.
- Les énergies du gap obtenues par nos calculs sont acceptables en les comparant à d'autres données théoriques et expérimentales.
- L'introduction de la correction *Tb-mBJ* nous a permis d'avoir une bonne amélioration des calculs du gap au niveau des propriétés électroniques. Elle nous a donné des valeurs plus proches de l'expérience.
- Les structures de bandes d'énergie calculées révèlent que les binaires sont des semi-conducteurs à gap indirecte contrairement aux ternaires qui ont des gaps directs.
- Enfin nous avons porté notre attention sur les paramètres de courbure correspondants à ces propriétés physiques, pour l'alliage à base de Strontium, soient $SrS_{1-x}Se_x$. L'étude des structures de bandes électroniques et des propriétés optiques (fonction diélectrique, indice de réfraction, indice de réflexion, coefficient d'absorption,

conductivité optique...) a montré un bon accord avec l'expérience malgré le manque d'information sur ces paramètres à notre niveau.

Enfin les travaux menés dans le cadre de ce mémoire ouvrent une direction de recherche qui mérite à notre avis, d'être approfondie, notamment :

- Reprendre les mêmes composés en leur appliquant cette fois-ci d'autres approximations (afin d'améliorer les erreurs dues à la sous-estimation du gap) et d'effectuer une étude comparative avec les résultats de ce travail.
- Effectuer d'autres calculs pour étudier d'autres propriétés physiques afin de voir leurs paramètres de courbure.
- Ce mémoire a permis d'offrir une large gamme de choix à proposer aux concepteurs de nouveaux matériaux, en se basant sur nos travaux, les concepteurs peuvent choisir lequel des composés que nous avons étudiés peut être le plus adéquat à être exploité pour une application désirée.

Annexe

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

| GROUPE | | PÉRIODE | | | | | | | | | | | | | | | | GROUPE | | | | | | | | | | | | | |
|-------------|--------------------------|---------|---------------------------|--------|---------------------------|-----|---------------------------|-----|--------------------------|-----|--------------------------|-----|----------------------------|-----|---------------------------|-----|--------------------------|--------|---------------------------|-----|------------------------|----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|
| 1A | | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 10 | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 8 | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 6 | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 4 | | | | | | | | | | | | | |
| 6 | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 | | | | | | | | | | | | | |
| 7 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | H 1,008 HYDROGÈNE | 2 | He 4,0026 HELIUM | 3 | Li 6,94 LITHIUM | 4 | Be 9,0122 BERYLLIUM | 5 | B 10,81 BORE | 6 | C 12,011 CARBONE | 7 | N 14,007 AZOTE | 8 | O 15,999 OXYGÈNE | 9 | F 18,998 FLUOR | 10 | Ne 20,180 NEON | | | | | | | | | | | | |
| 11 | Na 22,990 SODIUM | 12 | Mg 24,305 MAGNÉSium | 13 | Al 26,982 ALUMINIUM | 14 | Si 28,085 SILICIUM | 15 | P 30,974 PHOSPHORE | 16 | S 32,06 SOUFRE | 17 | Cl 35,45 CHLORE | 18 | Ar 39,948 ARGON | 19 | K 39,098 POTASSIUM | 20 | Ca 40,078 CALCIUM | | | | | | | | | | | | |
| 37 | Rb 85,468 RUBIDIUM | 38 | Sr 87,62 STRONTIUM | 39 | Y 88,906 YTRIUM | 40 | Zr 91,224 ZIRCONIUM | 41 | Nb 92,906 NIOBIUM | 42 | Mo 95,96 MOLYBDÈNE | 43 | Tc 98,906 TECHNETIUM | 44 | Ru 101,07 RUTHÈNIUM | 45 | Rh 102,91 RHODIUM | 46 | Pd 106,42 PALLADIUM | 47 | Ag 107,87 ARGENT | | | | | | | | | | |
| 55 | Cs 132,91 CÉSium | 56 | Ba 137,33 BARYUM | 57-71 | Lanthanides La-Lu | 72 | Hf 178,49 HAFNIUM | 73 | Ta 180,95 TANTALE | 74 | W 183,84 TUNGSTÈNE | 75 | Re 186,21 RHÈNIUM | 76 | Os 190,23 OSMIUM | 77 | Ir 192,22 IRIDIUM | 78 | Pt 195,08 PLATINE | 79 | Au 196,97 OR | | | | | | | | | | |
| 87 | Fr 223 FRANCIUM | 88 | Ra 226 RADIUM | 89-103 | Actinides Ac-Lr | 104 | Rf 267 RUFERORIUM | 105 | Db 268 DUBNIUM | 106 | Sg 271 SEABORGIUM | 107 | Bh 272 BOHRIUM | 108 | Hs 277 HASSIUM | 109 | Mt 276 MEITNERIUM | 110 | Ds 281 DARMSTADTIUM | 111 | Rg 280 ROENTGIUM | | | | | | | | | | |
| LANTHANIDES | | 57 | La | 58 | Ce | 59 | Pr | 60 | Nd | 61 | Pm | 62 | Sm | 63 | Eu | 64 | Gd | 65 | Tb | 66 | Dy | 67 | Ho | 68 | Er | 69 | Tm | 70 | Yb | 71 | Lu |
| ACTINIDES | | 89 | Ac | 90 | Th | 91 | Pa | 92 | U | 93 | Np | 94 | Pu | 95 | Am | 96 | Cm | 97 | Bk | 98 | Cf | 99 | Es | 100 | Fm | 101 | Md | 102 | No | 103 | Lr |

MASSE ATOMIQUE RELATIVE (1)

GROUPE IUPAC

SYMBÔLE

NOM DE L'ÉLÉMENT

ÉTAT PHYSIQUE (25 °C, 101 kPa)

Ne - gaz
Hg - liquide
Fe - solide
Tc - synthétique

- Métaux
- Métaux alcalins
- Métaux alcalino-terreux
- Métaux de transition
- Lanthanides
- Actinides
- Métalloïdes
- Non-métaux
- Chalcogènes
- Halogènes
- Gaz nobles



(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Résumé

Récemment, il y a un intérêt considérable pour les semi-conducteurs $II-VI$ et leurs alliages dû à leur application dans les appareils photovoltaïques, comme cristaux électro-optiques et optoélectroniques et de leurs applications à la réalisation récente des diodes luminescentes. Cela a motivé plusieurs physiciens à faire l'étude sur ces composées, leurs propriétés structurales et thermodynamiques dans cette famille et leurs alliages et réviser beaucoup de propriétés physiques fondamentales basé sur les calculs de l'Ab Initio. Dans ce travail on va faire une étude numérique des propriétés structurales, électroniques et optiques. Pour contribuer à une meilleure compréhension des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs de type $II-VI$ on va utiliser le code *WIEN2k* avec l'approximation du gradient généralisé de *Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE-GGA)* et la correction *Tb-mBJ (The Tran and Blaha modified Becke-Johnson potential)*. Enfin on fera une application sur les matériaux ternaire à base de Strontium pour bien montrer l'efficacité de ce travail où on va le comparer à d'autres résultats.

Mots clés : DFT- simulation numérique – Semi conducteur $II-VI$ – propriétés structurales - propriétés électroniques - propriétés optiques – $SrS_{1-x}Se_x$

Abstract

Recently, there is considerable interest in $II-VI$ semiconductors and their alloys due to their application in photovoltaic devices, as electro-optical and optoelectronic crystals and their applications to the recent realization of luminescent diodes. This motivated several physicists to study these compounds, their structural and thermodynamic properties in this family and their alloys and revise many fundamental physical properties based on the calculations of Ab Initio. In this work a numerical study of structural, electronic and optical properties will be carried out. To contribute to a better understanding of the optoelectronic properties of semiconductors of type $II-VI$ we will use the code *WIEN2k* with the approximation of the *generalized gradient of Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE-GGA)* and the correction *Tb-mBJ (The Tran and Blaha modified Becke-Johnson potential)*. Finally, an application will be made on ternary materials based on Strontium to clearly show the efficiency of this work where it will be compared with other results.

Keywords: DFT- Numerical simulation – Semiconductor $II-VI$ – structural properties – electronic properties – optical properties - $SrS_{1-x}Se_x$

الملخص

في الآونة الأخيرة، كان هناك اهتمام كبير بأشباه الموصلات $II-VI$ وسبائكها بسبب تطبيقها في الأجهزة الكهروضوئية، مثل البلورات الكهروضوئية والبصرية الأوتونية وتطبيقاتها على تحقيق الديودات اللوحية مؤخرًا. وقد حفز ذلك العديد من الفيزيائيين على دراسة هذه المركبات وخصائصها الهيكلية والثرمودينامية في هذه العائلة وسبائكها وتنقيح العديد من الخصائص الفيزيائية الأساسية بناءً على حسابات Ab Initio. وسيتم في هذا العمل إجراء دراسة رقمية للخصائص الهيكلية والإلكترونية والبصرية. وللمساهمة في فهم أفضل لخواص أشباه الموصلات من $II-VI$ ، سوف نستخدم الرمز *WIEN2k* مع تقدير التدرج المعمم للبيردو-بورك-إرنزرفوف (*PBE-GGA*) والتصحيح *Tb-mBJ (The Tran and Blahamodified Becke-Johnson potential)*. وأخيرًا، سيتم تقديم طلب على المواد الثنائية على أساس السترونتيوم لإظهار كفاءة هذا العمل بوضوح حيث سيتم مقارنته بنتائج أخرى.

الكلمات الرئيسية

الخصائص البصرية – الخصائص الإلكترونية – الخصائص الهيكلية – $II-VI$ أشباه الموصلات – المحاكاة العددية - DFT- $SrS_{1-x}Se_x$