

**Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche  
Scientifique  
Université de Tiaret  
Département de Physique**

**ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES  
ET OPTIQUES D'UN ALLIAGE  
SEMICONDUCTEUR QUATERNAIRE  
 $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  (modele de S. Adachi)**

En vue d'obtenir le diplôme de Magister

Spécialité : Génie-physique.

Option : Physique des matériaux.

Présenté par : AHMED ABDICHE

Soutenu le : 2002

**Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche  
Scientifique  
Université de Tiaret  
Département de Physique**

**ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES  
ET OPTIQUES D'UN ALLIAGE  
SEMICONDUCTEUR QUATERNAIRE  
 $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  (model de S. Adachi)**

En vue d'obtenir le diplôme de Magister

Spécialité : Génie-physique.  
Option : Physique des matériaux.

Présenté par : AHMED ABDICHE

Soutenu le : 2002

Directeur de mémoire : Dr.Hamza ABID

**Membres de Jury :**

**M. Amar BOUAZA**

Président

**M. Nadir SEKAL**

Examineur

**M. Boucif ABBAR**

Examineur

**M. A.E.K BENMEDJEDI**

Examineur

**M. Hamza ABID**

Directeur de mémoire

**ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES  
ET OPTIQUES D'UN ALLIAGE  
SEMICONDUCTEUR QUATERNAIRE  
 $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  (model de S. Adachi)**

**Présenté par : Ahmed ABDICHE**

**Soutenu le : 2002**

**Université de Tiaret**

**ERRATA :**

Page	Ligne	au lieu	lire
------	-------	---------	------

## **Liste des tableaux :**

**Tableau (I-1)** :Rayons covalents et \_électronégativités des éléments (III-V)

**Tableau (V-1)** :Paramètre de réseau et facteurs de formes symétriques et anti-symétriques du GaAs

**Tableau (V-2)** :Paramètre de réseau et facteurs de formes symétriques et anti-symétriques du GaSb

**Tableau (V-3)** :Paramètre de réseau et facteurs de formes symétriques et anti-symétriques du InAs

**Tableau (V-4)** :Paramètre de réseau et facteurs de formes symétriques et anti-symétriques duInSb

**Tableau (V-5)** :Energies gaps aux points  $\Gamma$  ,X , L

**Tableau (V-6)** :Caractéristiques de la densité d'états des bandes de valences calculées et expérimentales des éléments parents.

**Tableau (V-7)** :Constantes A,B et le spin orbite splitting  $\Delta$

## Liste des figures :

- Figure (I-1)** : Relation entre le paramètre de maille cristalline et l'énergie gap du matériau.
- Figure (III-1)** : Comparaison des fonctions de l'élargissement
- Figure (V-1)** : Variation de la concentration  $y = f(x)$
- Figure (V-2)** : Variation du paramètre de réseau en fonction de la concentration
- Figure (V-3)** : Structure de bande électronique du GaAs
- Figure (V-4)** : Structure de bande électronique du GaSb
- Figure (V-5)** : Structure de bande électronique de l'InAs
- Figure (V-6)** : Structure de bande électronique de l'InSb
- Figure (V-7)** : Structure de bande électronique du GaInAsSb
- Figure (V-8)** : Structure de bande électronique du GaInAsSb/GaSb
- Figure (V-9)** : Variation de l'énergie gap aux points  $\Gamma, X, L$
- Figure (V-10)** : Densité de charges électroniques du GaAs
- Figure (V-11)** : Densité de charges électroniques du GaSb
- Figure (V-12)** : Densité de charges électroniques de l'InAs
- Figure (V-13)** : Densité de charges électroniques de l'InSb
- Figure (V-14)** : Densité de charges électroniques du GaInAsSb
- Figure (V-15)** : Densité de charges électroniques du GaInAsSb/GaSb
- Figure (V-16)** : Densité d'états électroniques du GaAs
- Figure (V-17)** : Densité d'états électroniques du GaSb
- Figure (V-18)** : Densité d'états électroniques de l'InAs
- Figure (V-19)** : Densité d'états électroniques de l'InSb
- Figure (V-20)** : Densité d'états électroniques du GaInAsSb
- Figure (V-21)** : Densité d'états électroniques du GaInAsSb par la méthode CPA
- Figure (V-22)** : Fonction diélectrique du GaInAsSb
- Figure (V-23)** : Indice de réfraction des binaires Ga, In, As, Sb
- Figure (V-24)** : Variation du spin orbite splitting  $\Delta$  en fonction de la concentration  $x$
- Figure (V-25)** : Variation de la constante A en fonction de la concentration  $x$
- Figure (V-26)** : Variation de la constante B en fonction de la concentration  $x$

**Figure (V-27)** : Indice de réfraction du GaInAsSb ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ )

**Figure (V-28)** : Indice de réfraction du GaInAsSb/GaSb en fonction de la concentration  $x$  et de l'énergie  $h\omega$

**Figure (V-29)** : Indice de réfraction du GaInAsSb/GaSb en fonction de la concentration  $x$  et pour des énergies fixes :

$$h\omega = [0.5, 1.5, 3, 4.5, 6] \text{ eV}$$

## Symboles et sigles utilisés :

$a_0$  : Paramètre de réseau  
 $x, y$  : Coefficients stœchiométriques  
 $R_{AC}, R_{AD}, R_{BC}, R_{BD}$  : Longueurs de liaisons  
 $R$  : Longueur de la liaison moyenne  
 $\Delta^{XS} S^S$  : Entropie d'excès de configuration  
 $\Delta^{XS} G^S$  : Entalpie libre d'excès supplémentaire  
 $\Delta G^S$  : Entalpie libre d'excès de l'alliage  
 $\gamma_{ij}$  : Coefficients d'activités  
 $\alpha_{ABCD}$  : Paramètre de courbure  
 $\overline{E}_g$  : Le gap moyen  
 $b$  : Paramètre de courbure optique  
 $f(x, y)$  : Fonction quadratique des composition  $x, y$   
 $\alpha_{ijk}$  : Paramètre d'affaiblissement du gap  
 $C_{A-B}, C_{C-D}$  : Différence d'électronégativité  
 $H$  : Hamiltonien  
 $\Psi$  : Fonction d'onde  
 $K$  : vecteur d'onde  
 $c, v$  : Etats du cœur et de valence  
 $\nabla$  : Le Laplacien  
 $V(r)$  : Potentiel cristallin  
 $V_R$  : Potentiel positif répulsif  
 $V_{ps}$  : Le pseudopotentiel  
 $G$  : Vecteur du réseau réciproque  
 $m$  : Masse de l'électron  
 $\hbar$  : Constante de Planck réduite  
 $\Omega$  : Volume cristallin  
 $\Omega_q$  : Volume atomique  
 $\vec{E}$  : Vecteur champ électrique  
 $\vec{B}$  : Vecteur d'induction magnétique  
 $\vec{D}$  : Champ de déplacement électrique  
 $\vec{J}$  : Densité de courant électrique  
 $\rho_{ext}$  : Densité de charges extérieure  
 $\varepsilon_i^j$  : Tenseur de constante diélectrique

$\varepsilon_i^j(\vec{k}, \omega)$ : Fonction de réponse diélectrique  
 $\alpha(\omega)$ : Coefficient représentant la probabilité d'absorption  
 $\sigma(\omega)$ : Section efficace  
 $\omega$ : fréquence  
 $r_s$ : Coefficient de réflexion pour une polarisation de type S  
 $r_p$ : Coefficient de réflexion pour une polarisation de type P  
 $n_1, n_2$ : Indice de réfraction  
 $i_1, i_2$ : angle d'incidence et de réflexion  
 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ : Constantes optiques  
 $P$ : Quantité de mouvement  
 $\vec{A}$ : Vecteur potentiel  
 $e$ : charge de l'électron  
 $\omega_p$ : fréquence du plasma  
 $J_{cv}$ : Densité d'états conjointe  
 $M_0, M_1, M_2, M_3$ : Points critiques  
 $ds$ : élément de surface  
 $\gamma(x)$ : Echelon unité  
 $\Gamma_k$ : Largeur de raie  
 $\chi$ : Longueur d'onde  
 $d_j$ : Dimension du point critique  
 $\theta_j$ : Angle de phase  
 $E_0, E_1, E_2$ : Energies gaps  
 $\Delta_1, \Delta_0$ : Spin orbite splitting  
 $\Gamma$ : Constante d'élargissement  
 $B_1, B_2, B_{11}, B_{12}$ : Constantes dépendant de l'énergie  
 $\chi_1, \chi_2, \chi_{1s}, \chi_{1d}, \chi_{1sd}, \chi_g$ : Valeurs énergétiques  
 $\hbar\omega_q$ : Energie du photon  
 $E_G^{ID}$ : Gap indirect  
 $A_{0X}^n$ : Paramètre de force excitonique  
 $m_r$ : Masse relative de l'électron  
 $m_t$ : Msse du trou  
 $\varepsilon_r$ : Permittivité du vide  
 $G^{3D}$ : Energie de Rydberg  
 $V_0$ : Volume de la maille élémentaire  
 $a_B^{3D}$ : Rayon de Bohr de l'exciton (3D)

$|\Phi_n^{3D,2D}(0)|$  : Fonction enveloppe du n<sup>ième</sup> exciton

$\tilde{\epsilon}$  : Fonction diélectrique d'un seul électron

$U_{ck}(r), U_{vk}(r)$  : Parties périodiques des fonctions de Bloch

$\eta$  : Infinitésimal positif

$\delta(s)$  : Fonction d'amortissement

$\Phi_L$  : Fonction d'élargissement

$\Phi_G$  : Fonction d'élargissement Gaussien

## Tables de matières

<b>INTRODUCTION</b>	<b>1</b>
---------------------	----------

## Chapitre I Généralités sur les argiles

<b>I-1 Introduction</b>	<b>5</b>
<b>I-2 La structure des argiles</b>	<b>6</b>
<b>I-2-1 Description de la couche tétraédrique</b>	<b>7</b>
<b>I-2-2 Description de la couche octaédrique</b>	<b>7</b>
<b>I-3 Disposition des oxygènes</b>	<b>10</b>
<b>I-4 Différents types de feuillets</b>	<b>12</b>
<b>I-4-1 Famille du Kaolin 1/1</b>	<b>12</b>
<b>I-4-2 Famille des smectites et des micas où série 2/1</b>	<b>13</b>
<b>I-4-3 Famille des chlorites où série 2/1 TOTO</b>	<b>13</b>
<b>I-5 La montmorillonite</b>	<b>15</b>
<b>I-5-1 Caractère cristallographique</b>	<b>15</b>
<b>I-5-2 L'échange cationique</b>	<b>16</b>
<b>I-5-3 Rôle des cations échangeables</b>	<b>17</b>

**Chapitre II**  
**Phénomènes d'adsorption et complexes organo-argileux.**

<b>II-1 Introduction</b>	<b>20</b>
<b>II-2 Phénomène d'adsorption</b>	<b>20</b>
<b>II-3 Différents types d'interfaces</b>	<b>21</b>
<b>II-4 Différents types d'adsorption</b>	<b>23</b>
<b>II-5 Complexes organiques des argiles</b>	<b>24</b>
<b>II-5-1 Mécanismes de formation et d'interaction</b>	<b>24</b>
<b>II-5-1-1 Fixation des molécules chargées</b>	<b>25</b>
<b>II-5-2 Fixation des molécules neutres</b>	<b>27</b>
<b>II-6 Les organosilanes</b>	<b>31</b>

**Chapitre III**  
**Les techniques expérimentales**

<b>III-1 Préparation et caractérisations des échantillons</b>	<b>33</b>
<b>III-1-1 Matériau</b>	<b>33</b>
<b>III-1-2 Sédimentation</b>	<b>33</b>
<b>III-1-3 Echange avec les cation <math>\text{Na}^+</math> et <math>\text{Ca}^{2+}</math></b>	<b>33</b>
<b>III-1-4 Saturation avec la matière organique</b>	<b>34</b>
<b>III-1-5 L'enrobage avec les organosilanes</b>	<b>34</b>
<b>III-2 Techniques expérimentales</b>	<b>35</b>
<b>III-2-1 Chauffage par micro-onde, principe et intérêt</b>	<b>35</b>
<b>III-2-2 Chromatographie en phase gazeuse</b>	<b>37</b>
<b>III-2-3 Diffraction des rayons X</b>	<b>40</b>

**Chapitre IV**  
**Résultats et interprétation**

<b>IV-1 Résultats expérimentaux</b>	<b>44</b>
<b>IV-1-1 Analyse par diffraction des rayons X</b>	<b>44</b>
<b>IV-1-2 Mesures chromatographiques</b>	<b>45</b>
<b>IV-1-2-1 Préparation des solution organiques</b>	<b>46</b>
<b>II-1-2-2 Mesures chromatographiques</b>	<b>47</b>
<b>IV-2 Interprétation des résultats</b>	<b>51</b>
<b>IV-2-1 Introduction</b>	<b>51</b>
<b>IV-2-2 Théorie HSAB</b>	<b>51</b>
<b>IV-2-2-1 Notion de dureté</b>	<b>52</b>
<b>IV-2-2-2 Echelle de dureté</b>	<b>52</b>
<b>IV-2-2-3 Utilisation de la dureté</b>	<b>53</b>
<b>IV-2-3 Le concept d'électronégativité</b>	<b>53</b>
<b>IV-2-3-1 Le problème des liaisons iono-covalentes</b>	<b>54</b>
<b>IV-2-3-2 Les différentes échelles</b>	<b>55</b>
<b>IV-2-3-3 L'utilisation de l'électronégativité</b>	<b>57</b>
<b>IV-3 Méthode d'égalisations des électronegativités EEM</b>	<b>61</b>
<b>IV-3-1 Energie-Electronégativité-dureté</b>	<b>63</b>
<b>IV-4 Les molécules adsorbées</b>	<b>66</b>
<b>IV-5 Effet de l'enrobage de la mont avec un organosilane</b>	<b>68</b>
<b>Conclusion générale</b>	<b>73</b>
<b>Annexe</b>	<b>80</b>

## Remerciements

Arrivé au terme de ce mémoire , je voudrais exprimer toute ma reconnaissance aux personnes qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.

Je voudrais d'abord exprimer toute ma gratitude à: M..BELARBI El-habib, maître de conférence à l'Université de Tiaret d'avoir accepté de diriger ce mémoire . Sa compétence et sa constante attention ne pourront être oubliées, je lui en suis très reconnaissant.

Je ne remercierais jamais assez Monsieur.RAHMOUNI.M , professeur à l'Université de Tiaret , qui a toujours porté un intérêt à mon travail et d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

Je tiens également à remercier les membres de jury pour avoir bien voulu évaluer ce travail : M.AOUISSI.A, Recteur à l'Université de l'Aghouat. M.HAOUZI.A , Maître de conférence à l'Université de Tiaret. M..SASSI.A Directeur de l'institut de Génie mécanique de l'Université de Tiaret.

Je remercie également et tout particulièrement mon meilleur ami SENOUCI DJAMEL EDDINE pour son soutien de tous les instants.

Je n'oublierais certainement pas dans ces remerciement : DAHMANI.Z ,TABAHRIT.F,M<sup>me</sup>Kasmi.S de m'avoir aidé pendant la réalisation de la partie expérimentale et qui m'ont soutenu moralement par leurs conseils qui m'ont été bénéfiques.

Un grand merci au professeur Jean-charles Giuntini et toute son équipe de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire de physico-chimie de la matière condensée de l'université des sciences II de Montpellier.

Ma sympathie se tourne vers tous les collègues , les techniciens de laboratoire de chimie et de biochimie et les secrétaires de l'université de Tiaret grâce à qui j'ai travaillé dans de bonnes conditions .

Je voudrais enfin remercier mes enseignants qui m'ont formé et toutes ma famille qui m'a soutenu tout au long de mes études.

# SOMMAIRE

<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	1
<b>CHAPITRE N°I</b>	
I- Théorie des alliages semi-conducteurs	4
I.1 Définition d'un alliage semi-conducteur	4
I.2 Classification des alliages semi-conducteurs	4
<b>I.3 Préparation des alliages semi-conducteurs</b>	
<b>6</b>	
I.3.1 L'épitaxie en phase liquide LPE	6
I.3.2 L'épitaxie en phase vapeur VPE	6
I.3.3 La déposition chimique de la vapeur métallo-organique MOCVD	6
I.3.4 La déposition chimique de la vapeur métallo-organique à faible pression LP.MOCVD	6
<b><i>I.3.5 L'épitaxie par jet moléculaire MBE</i></b>	<b>7</b>
I.3.6 L'épitaxie par jet moléculaire a basse température	7
I.3.7 L'épitaxie par jet moléculaire a source gazeuse G.S MBE	8
I.4 Intérêt technologique des alliages semi-conducteurs	8
I.5 Propriétés structurales des alliages semi-conducteurs	10
I.5.1 Structure cristalline	10
I.6 Propriétés de liaisons	11
I.7 Propriétés thermodynamiques des alliages semi-conducteurs	13

<b>I.7.1 Stabilité thermodynamique des alliages III-V</b>	
<b>13</b>	
<b>I.7.2 Model D.L.P.O.C</b>	
<b>14</b>	
I.7.3 Calcul de l'entropie d'excès du à l'ordre	15
<b>I.7.4 Application du model D.L .P.O.C au calcul du diagramme quaternaire d'un alliage III-V</b>	<b>15</b>
<b>I.8 Propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs</b>	
<b>16</b>	
I.8.1 Modélisation des alliages quaternaires	16
I.8.1.1 Alliage quaternaire quadratique	16
I.8.1.2 Constante du réseau de l'alliage quaternaire quadratique	17
I.8.1.3 Gaps d'énergie de l'alliage quaternaire quadratique	17
<b>I.8.1.4 Calcul du paramètre de courbure</b>	
<b>18</b>	
<b>I.8.2 Modélisation des alliages quaternaires triangulaires</b>	
<b>18</b>	
I.8.2.1 Paramètre du réseau	19
I.8.2.1.a alliages quaternaires triangulaires cationiques	19
I.8.2.1.b alliages quaternaires triangulaires anioniques	19
I.8.2.2 Constante du réseau de l'alliage	19
I.8.2.2.a alliages quaternaires triangulaires cationiques	19
I.8.2.2.b alliages quaternaires triangulaires anioniques	19
I.8.2.3 Gaps d'énergie des alliages quaternaires triangulaires	19

## CHAPITRE N°II

II. Méthode de calcul	21
II.1 Présentation de la méthode de calcul	23
II.2 La méthode du pseudo-potentiel couplée avec la VCA	28

## CHAPITRE N° III

III. Propriétés optiques des semi-conducteurs	31
III.1 Milieux diélectriques	31
III.2 Classification des milieux	31
III.3 Interaction champ électromagnétique-milieux diélectriques	32
III.3.1 Equations du champ	32
III.4 Fonction diélectrique	32
III.4.1 Réponse diélectrique linéaire	33
III.5 Spectre d'absorption de la lumière	34
III.5.1 Les types d'absorption	34
III.5.1.1 L'absorption intrinsèque	34
III.5.1.2 L'absorption extrinsèque	35
III.5.1.3 L'absorption par porteurs de charges libres	35
III.5.1.4 L'absorption par réseau	35
III.5.1.5 L'absorption plasmique	35
III.5.1.6 L'absorption intrabande	35
III.5.1.7 L'absorption par excitons	35
III.6 La reflectivite	35
III.7 Propagation des ondes électromagnétiques	36

III.7.1	onde incidente	36
III.7.2	onde réfléchi	36
III.7.2	onde transmise	36
III.8	Fonction diélectrique et transitions interbandes	37
III.8.1	Analyse théorique des transitions optiques	37
III.8.2	Théorie quantique des transitions	38
III.8.3	Contribution d'un couple de bandes de valence et de conduction aux constantes optiques	39
III.8.4	Structure des constantes optiques aux points critiques	43
III.8.5	Nombre et caractère des points critiques	45

## **CHAPITRE N°IV**

IV	Modélisation de la fonction diélectrique	51
IV.1	Models phénoménologiques	52
IV.1.1	Model de Wempel et Didomenico	52
IV.1.2	Model de Stern	52
IV.1.3	Model d'Afromitz	53
IV.1.3	Model d'Erman	53
IV.1.4	Model de Terry	54
IV.2	Models de calcul de l'indice de réfraction	54
IV.2.1	de MOSS	54
IV.2.2	de Vandam et Herve (H-V)	55
IV.2.3	de Ravindra	55
IV.2.4	de Sellmeier	55
IV.3	Models [PCBP]	55
IV.4	Models combinés	56
IV.4.1	Model de la fonction diélectrique [MFD]	56
IV.5	Model de Sadao Adachi	57

IV.6 Les transitions interbandes	58
IV.6.1 Les transitions $E_0$ et $E_0+\Delta_0$	58
IV.6.2 Les transitions $E_1$ et $E_1+\Delta_1$	59
IV.6.3 Les transitions $E_2$	60
IV.6.4 Les transitions des gaps indirects	61
IV.7 Effets excitoniques et transitions interbandes	62
IV.8 Fonction d'élargissement	66
IV.8.1 Effet de la fonction d'élargissement	66

## CHAPITRE N°V

V Etude de l'alliage quaternaire GaInAsSb	71
V.1 Propriétés électroniques de l'alliage quaternaire	75
V.1.1 Structure de bandes électroniques des éléments parents	75
V.1.1.a Structure de bandes électroniques du GaAs	75
V.1.1.b Structure de bandes électroniques du GaSb	77
V.1.1.c Structure de bandes électroniques de l'InAs	78
V.1.1.d Structure de bandes électroniques de l'InSb	78
V.1.1.e Structure de bandes électroniques du GaInAsSb	80
V.1.1.f Structure de bandes électroniques du GaInAsSb/GaSb	81
V.1.2 Variation de l'énergie gap de l'alliage ajusté sur substrat en fonction de la concentration	82
V.1.3 La densité de charges électronique	84
V.1.3.a La densité de charges électronique du GaAs	85
V.1.3.b La densité de charges électronique du GaSb	85
V.1.3.c La densité de charges électronique de l'InAs	86
V.1.3.d La densité de charges électronique de l'InSb	87
V.1.3.e La densité de charges électronique du GaInAsSb	89
V.1.3.f La densité de charges électronique GaInAsSb/GaSb	90

V.1.4 Densité d'états	91
V.1.4.a Densité d'états des éléments parents	92
V.1.4.b Densité d'états du quaternaire GaInAsSb	94
V.2 Fonction diélectrique	95
V.3 Indice de réfraction	96
V.3.1 Indice de réfraction des éléments parents	97
V.3.2 Indice de réfraction du quaternaire GaInAsSb	97
V.3.2.a Indice de réfraction du quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$	97
V.3.2.b Indice de réfraction du GaInAsSb/GaSb	98

---

**IIV CONCLUSION GENERALE** 105

## INTRODUCTION :

Dans nos jours, la technologie des dispositifs électroniques et optoélectroniques connaît un développement énorme et incessant, ceci est du à la connaissance plus ou moins profonde des propriétés physiques de la matière.

La mécanique quantique a permis la description théorique des propriétés de la matière dépendant des lois qui régissent les interactions des particules, mais dans la pratique beaucoup d'insuffisances restent à combler.

Le développement des modèles théoriques et les techniques modernes d'expérimentation misent à la disposition des chercheurs ont rendu plus facile l'étude des propriétés physiques et notamment les propriétés électroniques et optiques des matériaux et a donc contribué efficacement à la prédiction et le Choix des matériaux avec des caractéristiques recherchées.

Les paramètres physiques ayant une importance capitale et qui fournissent plus d'informations sur le comportement d'un matériau sous, l'influence d'une perturbation, est la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  qui nous informe à la fois des propriétés électroniques(structure de bande, densité de charges)et les propriétés optiques(absorption, réflexion et indice de réfraction)

Cependant, il s'avère plus que nécessaire de modéliser la fonction diélectrique de la manière la plus efficace et qui renferme plus d'exactitude. Car plusieurs applications telle que le contrôle de la croissance cristalline, l'analyse des données spectrales et la construction des lasers à semi-conducteurs ainsi que les composants guides d'ondes se basent sur les résultats que fournit le modèle utilisé pour la fonction diélectrique

Afin de remplir de telles exigences, le problème le plus crucial à résoudre est la mauvaise adaptation des modèles de la fonction

diélectrique, au voisinage du point critique, car elle décrit mal l'absorption au voisinage et en dessous du bord direct dans cette région

Pour palier à ce déficit Kim a proposé un modèle assez complexe, mais qui montre une certaine concordance avec les résultats expérimentaux au voisinage du gap  $E_0$ . Ce modèle inclue les deux types de l'élargissement de raie, à savoir l'élargissement lorentzien et gaussien

Un modèle similaire a été élaboré par Adachi, mais qui est pour une approximation Lorentzienne en désaccord avec l'expérience. Une amélioration a été apportée à ce modèle. Elle consiste à introduire une fonction d'élargissement presque gaussienne au lieu de l'élargissement lorentzien. Ce nouveau modèle est basé sur les transitions interbandes, les deux parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique sont obtenues analytiquement en se servant des transformations de Kramers et Kronig. La densité d'état conjointe est d'importance capitale dans l'établissement du spectre optique de la fonction diélectrique aux niveaux des points critiques

Notre étude est faite en quatre chapitres :

Le premier chapitre a été consacré à la théorie générale des alliages, leur classification, préparation et leur modélisation, une importance particulière a été accordée aux propriétés structurales, électroniques et thermodynamiques. Une approche théorique de la méthode de calcul employée dans ce travail a été donnée d'une manière plus ou moins détaillée, il s'agit de la méthode du pseudo-potentiel empirique. Une idée générale sur l'intérêt technologique des alliages semi-conducteurs a été également exposée

Le deuxième chapitre traite les propriétés optiques des matériaux, ou on a donné les différents modes d'absorption, le fondement de la fonction diélectrique et les constantes optiques telles que (la réflexion, l'indice de réfraction ...)

Le troisième chapitre envisage la modélisation de la fonction diélectrique, les différents modèles théoriques ont été cités, une attache exceptionnelle a été réservée au modèle de Sadao-Adachi qui est basé sur les transitions interbandes ou la fonction diélectrique prend en compte la contribution des différentes transitions et notamment dans la région des points critiques ou les modèles précédents étaient loin de donner une interprétation

Ce modèle est caractérisé par rapport aux autres modèles par l'introduction d'une fonction d'élargissement de raie presque gaussien, appliqué aux calculs des propriétés de plusieurs alliages ternaires et quaternaires, il a donné des résultats satisfaisants et en concordance avec ceux de l'expérience

Le quatrième chapitre a été réservé à l'étude de notre alliage quaternaire(GaInAsSb/GaSb)du point de vue propriétés électroniques et optiques et à la discussion des résultats obtenus

Une conclusion générale sur ce travail vient immédiatement pour l'achever.

## I.1 DEFINITION D'UN ALLIAGE

Le terme alliage désigne un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux ; ce terme était réservé durant une bonne période aux métaux, cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, plus particulièrement la céramique et les polymères.

Le développement rapide des techniques de la croissance cristalline, et la purification des semi-conducteurs a permis la réalisation de plusieurs alliages binaires ternaires et quaternaires. Un alliage semi-conducteur est un matériau qui offre la possibilité de moduler l'amplitude du gap et d'autres paramètres physiques afin de mieux optimiser et étendre le domaine d'application, notamment en micro-électronique et optoélectronique.

En effet, le progrès fait par les chimistes, les physiciens et technologues à contribuer efficacement à l'étude et l'élaboration de nouveaux matériaux parmi eux les alliages semi-conducteurs.

## I.2 CLASSIFICATION DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS

En combinant deux semi-conducteurs A et B à l'aide des techniques de croissance, on réalise un alliage binaire, ternaire ou quaternaire cristallisant dans la même structure et ayant des paramètres de maille très voisins.

Les alliages semi-conducteurs se classent suivant le nombre de constituants dans l'alliage en :

### a) Alliage binaire

Il est de la forme  $A^n B^{n-8}$

### b) Alliage ternaire

Si deux éléments binaires  $A^n B^{n-8}$  et  $A^m C^{m-8}$  sont associés le composé ainsi formé est un alliage ternaire qui peut être soit:

#### b.1) Un alliage ternaire anionique

$$A^n B_x^{n-8} C_{1-x}^{8-x}$$

### **b.2) Un alliage ternaire cationique**

$$A_X^n B_{1-x}^n C^{8-x}$$

Un alliage ternaire est caractérisé par le coefficient stœchiométrique x

### **C) Alliage quaternaire**

On a également dans la gamme des alliages semi-conducteurs les matériaux quaternaires dont lesquels quatre composés binaires sont associés, ce type est caractérisé par deux coefficients stœchiométriques x et y. Ces alliages peuvent être soit.

#### **C.1) Des solutions quadratiques de la forme**

$$A_{1-x}^n B_x^n C_y^{8-n} D_{1-y}^{8-n}$$

**C.2) Des solutions triangulaires qui se divisent de leur part en deux classes**

#### **C.2.1) Des solutions purement anioniques**

$$A^n B_x^{8-n} C_y^{8-n} D_{1-x-y}$$

**C.2.2) Des solutions purement cationiques**

$$A_x^n B_y^n C_{1-x-y}^{8-n} D^{8-n}$$

Le critère qui concerne l'accord de paramètres dans tout type d'alliages semi-conducteur est un outil purement technologique conditionnant la réalisation du matériau, cependant le nouveau composé doit alors avoir des caractéristiques intermédiaires entre les composés de bases (les constituants).

### **I.3 PREPARATION DES ALLIAGES**

Pour la préparation des alliages plusieurs techniques de croissance épitaxiales peuvent conduire à la réalisation de l'alliage on cite les principales techniques utilisées :

**I.3.1 L'épitaxie en phase liquide LPE [1],[2].**

**I.3.2 L'épitaxie en phase vapeur VPE[3].**

**I.3.3 La déposition chimique de la vapeur métallo-organique MOCVD [5],[6].**

**I.3.4 La déposition chimique de la vapeur métallo-organique à faible pression LP.MOCVD [7].**

La technique MOCVD présente un intérêt particulier dans le cas des antimoniures ou la technique classique de transport en phase vapeur par les halogénures est difficilement applicable, du fait de la faible tension de la vapeur de l'Antimoine.

L'avantage principal de cette technique par rapport aux autres techniques, est sa plus grande souplesse d'utilisation au niveau du contrôle de la composition de la phase gazeuse, et au niveau du contrôle des épaisseurs des dépôts effectués, néanmoins cette technique présente des inconvénients majeurs qui sont :

- La contamination par les atomes de carbone provenant du craquage des organométalliques qui peut être réduite par l'introduction de  $H_2$  comme gaz vecteur afin de saturer les groupements alkyles libérés lors de la pyrolyse des organométalliques

- La difficulté de la manipulation des organométalliques.

- La toxicité de ces composés.

Cette technique a été utilisée avec succès pour la croissance de la plupart des semi-conducteurs (III – V),[7],[8].

### **I.3.5 L'EPITAXIE PAR JET MOLECULAIRE MBE [4] .**

Elle consiste à faire condenser sur un substrat monocristalin semi-conducteur orienté généralement selon le plan cristallographique le plus dense une fine couche monocristalline. Cette technique se caractérise par : le fait que la croissance s'opère sous vide résiduel très poussé, et elle est provoquée par l'évaporation simultanée à partir de creusets individuellement chauffés et contenant les différents constituants du matériau à élaborer. Par exemple Ga et As pour faire croître l'alliage GaAs y compris éventuellement les impuretés de dopage qui convergent sur le substrat lui-même chauffé à une température convenable. La composition de la couche peut être contrôlée par les intensités des feux atomiques de chaque espèce évaporée, celles-ci sont à leur tour contrôlées par la température du creuset.

### **I.3.6 L'EPITAXIE PAR JET MOLECULAIRE A BASSE TEMPERATURE [4]**

On peut réaliser des couches de haute qualité à des températures relativement basses, inférieures à 550 °C pour GaAs et à 750°C pour Si, ce qui bloque tout phénomène de diffusion thermique et permet de ce fait la réalisation d'interfaces abruptes avec des vitesses de croissance de l'ordre du  $\mu\text{m/h}$  ce qui autorise l'élaboration de quelques  $\text{\AA}$  d'épaisseur.

#### **LES AVANTAGES DE LA METHODE [MBE]**

- Une excellente planéité sur de grandes superficies de substrats épitaxiales qui sont croissantes au fur et à mesure que les constructeurs développent des installations plus volumineuses.

- Bonne uniformité de composition chimique (ou dopage )

- Possibilité d'obtention de profil de concentration en dopant d'une manière très abrupte de même on dispose d'une grande souplesse dans la réalisation de profil de composition d'un ou de plusieurs éléments.

Possibilité de faire croître des couches très minces ce qui n'est pas le cas pour l'épitaxie en phase liquide.

### **I.3.7 L'ÉPITAXIE PAR JET MOLECULAIRE A SOURCE GAZEUSE G.S MBE [4]**

La méthode d'épitaxie par jet moléculaire (MBE) utilisant les sources gazeuses sont des variantes de la (MBE) à source solide standard pour la croissance des composés(III.V)

La technique (GSMBE) utilise des éléments du groupe III, et une source de vapeur du groupe V.

Les résultats obtenus par cette technique ont montré l'importance technologique de cette méthode, dans le domaine de la fabrication des dispositifs optoélectroniques avec de très bonnes performances.

### **I.4 INTERET TECHNOLOGIQUE DES ALLIAGES S-CONDUCTEURS**

Le progrès et le développement rapide des techniques électroniques et optoélectroniques a conduit à la découverte d'une nouvelle classe de matériaux semi-conducteurs : la famille III-V et l'idée de concevoir des solutions solides à partir de ces composés binaires à immédiatement surgit ; la bande interdite pouvait donc, prendre toutes valeurs de 0.18 à 2.42 eV.

Ces alliages ont fait l'objet de nombreuses recherches ou toutes les méthodes de croissance cristalline épitaxiée ont été appelées

Ces recherches ont été consacrées à la détermination des paramètres du réseau et la structure de bande en fonction de la composition.

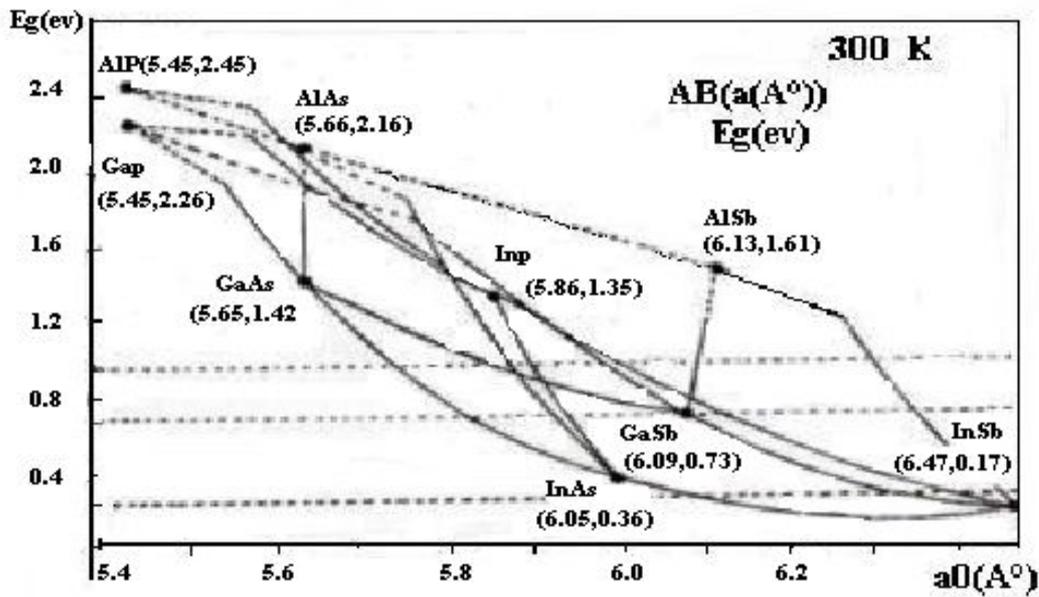
L'apparition des fibres optiques à très faible absorption à pousser le développement des composés ternaires, puis quaternaires de la famille III-V afin d'obtenir des dispositifs optoélectroniques mieux adaptés. Les alliages quaternaires  $Ga_{1-x}Al_xAs_ySb_{1-y}/GaSb$ ,  $Ga_{1-x}In_xAs_yP_{1-y}/InP$  ont été les plus étudiés.

La perspective de réaliser des fibres optiques transparents dans l'infrarouge a été ouverte en découvrant de nouveaux verres fluorés.

Vu la limite théorique d'atténuation qui est de  $10^{-2}$  à  $10^{-3}$  db/km avec des longueurs d'onde de 2.5 à 4  $\mu m$  et l'exigence d'un niveau de pertes extrêmement bas impose une nouvelle filière d'alliage III-V pour la réalisation des composants d'extrémité.

Certains alliages ternaires tel que (In As Sb/In As), le(Ga In Sb/ Ga Sb) et quaternaires(Ga In As sb /Ga Sb) et (In As Sb p/In AS) apparaissent comme étant les plus intéressants car ils couvrent la gamme (1.8  $\mu m$  – 4.4 $\mu m$ ) ;

La figure (I.1)montre la relation entre le paramètre de maille cristalline et le gap d'énergie des semi-conducteurs III-V et leurs alliages.



**Figure(I.1):Relation entre le parametre de maille et le gap d'energie pour les composés III.V et leurs alliages**

## I.5 PROPRIETES STRUCTURALES DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS

### I.5.1 STRUCTURE CRISTALLINE

La compréhension profonde des propriétés électroniques, optiques et mécaniques des semi-conducteurs : exige l'étude et la connaissance parfaite du milieu physique qui est le siège du déplacement des porteurs de charges, c'est à dire connaître la façon sous laquelle les atomes et les molécules sont placées et disposés.

La structure cristalline résulte des contraintes géométriques imposées par la taille des atomes, la force coulombienne des ions et atomes chargés et les propriétés d'orientations dues aux liaisons chimiques.

En cristallographie, on a l'état monocristallin et polycristallin dans le premier l'arrangement atomique qui est le critère le mieux adapté se répète d'une manière régulière dans les trois directions de

l'espace à travers le solide et cela du point de vue composition orientation et position des atomes.

Dans le deuxième, l'arrangement comporte plusieurs orientations qui se juxtaposent les unes aux autres.

Toute structure échappant à cette règle est dite amorphe.

Les semi-conducteurs III-V forment un cristal avec un arrangement zinc blende, qui est une structure d'origine cubique où les atomes du réseau sont à liaisons tétraédriques. La maille élémentaire de cette structure est identique à celle du diamant avec la seule différence et que chaque atome d'un élément donné est entouré tétraédriquement par quatre atomes de l'espèce opposée. De ce fait les alliages semi-conducteurs qui se cristallisent dans la structure zinc blende : sont des cristaux simples manquant d'un centre de symétrie et aussi, ils sont capables de donner naissance aux effets piezo-électriques et autres effets dépendant de la symétrie polaire. On note que cette structure présente un taux de compacité de l'ordre de 0.34 elle est donc considérée comme étant une structure ouverte offrant ainsi la possibilité d'insertion d'atomes légers.[17],[18].

## **I.6 PROPRIETE DE LIAISONS**

La connaissance des propriétés structurales des alliages semi-conducteurs est d'importance capitale dans les calculs pour la prédiction et la connaissance de leurs propriétés à titre d'exemple : la courbure du gap d'énergie est partiellement due au changement dans la longueur de la liaison afin de connaître les micro-structures des alliages semi-conducteurs. Il est intéressant d'étudier au moins les longueurs des liaisons.[19].

Les longueurs de liaisons peuvent être mesurées expérimentalement par la méthode EXAFS (Extend X-Ray

Absorption Fine Structure) qui a donné satisfaction pour plusieurs alliages ternaires, tel que  $In_{1-x}Ga_xAs$ , et  $GaAs_{1-x}P_x$  et quaternaires tel que  $InGaAsP$  et  $InGaSbAs$ . [20],[21],[22],[23].

D'une autre part plusieurs modèles théoriques ont été élaborés pour étudier les longueurs de liaisons dans les alliages III-V tels que le modèle VFF (Valence. Force Field ) et le schéma des pseudo-potentiel, ces modèles ont été établis afin d'interpréter les résultats expérimentaux pour ces alliages. [24][25][26].

Les propriétés de liaisons peuvent être étudiées à l'aide d'un modèle récemment établi et basé sur le modèle BOM (Bond orbital model ) [27], combiné à la théorie de Y. Cai et al [28].

Dans les alliages quaternaires (III.V). Gai et Thoupe [28] ont étudié le problème de l'accord de liaison dans les alliages quaternaires désordonnés en donnant une formule pour les longueurs de liaison et si les différences des paramètres de relaxation sont incluses les longueurs de liaison des alliages quaternaires quadratiques sont :

$$R_{AC} = R_{ABCD}^{\circ} - x \xi_{BCA} [R_{BC}^{\circ} - R_{AC}^{\circ}] - y \xi_{ADC} [R_{AD}^{\circ} - R_{AC}^{\circ}] \quad (I.1)$$

$$R_{AD} = R_{ABCD}^{\circ} - x \xi_{BDA} [R_{BD}^{\circ} - R_{AD}^{\circ}] + (1-y) \xi_{ACD} [R_{AD}^{\circ} - R_{AC}^{\circ}] \quad (I.2)$$

$$R_{BC} = R_{ABCD}^{\circ} + (1-x) \xi_{ACB} [R_{BC}^{\circ} - R_{AC}^{\circ}] - y \xi_{BDC} [R_{BD}^{\circ} - R_{BC}^{\circ}] . \quad (I.3)$$

$$R_{BD} = R_{ABCD}^{\circ} + (1-x) \xi_{ADB} [R_{BD}^{\circ} - R_{AD}^{\circ}] + (1-y) \xi_{BCD} [R_{BD}^{\circ} - R_{BC}^{\circ}] . \quad (I.4)$$

avec :

$$R_{ABCD}^{\circ} = (1-x)(1-y)R_{AC}^{\circ} + (1-x)yR_{AD}^{\circ} + x(1-y)R_{BC}^{\circ} + xyR_{BD}^{\circ}$$

La longueur de la liaison moyenne est :

$$R = (1-x)(1-y)R_{AC} + (1-x)yR_{AD} + x(1-y)R_{BC} + xyR_{BD}. \quad (I.5)$$

## I.7 PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS

### I.7.1 STABILITE THERMODYNAMIQUE DES ALLIAGES III - V.

Les diagrammes d'équilibre des phases dans les systèmes multi-composants (III–V) à partir des systèmes binaires qui les bornent sont très utiles pour prévoir les conditions expérimentales de croissance en solution des alliages (III- V) à trois ou quatre constituants

Si les surfaces liquides sont bien décrites par les modèles de solutions régulières ou quasi-régulières.[29][30]. Le solidus calculé en supposant la solution solide régulière peut se trouver en désaccord avec les résultats expérimentaux. Cela est dû à la présence de lacune de miscibilité très dissymétrique dans la section binaire en phase solide, de plus ces modèles prévoient une large région de non miscibilité pour les alliages Ga InAs Sb, Ga Al As Sb et Ga In As Sb, et ne peuvent rendre compte de la réalisation effective de dépôt de ces mêmes alliages pour des compositions x, y et les localisant dans leur lacune de miscibilité respective.

Ces faits mettent en relief les faiblesses de tout modèle régulier, qui suppose même dans le cas d'interaction forte, une répartition aléatoire des atomes dans le réseau et néglige par la même une entropie d'excès de configuration, ce défaut intrinsèque est d'autant plus important que les atomes considérés aient des tailles ou des électro- négativités différentes (voir tableau ci dessous) :

Eléments	r (A°)	x (échelle de pauling )
Ga	1.250	1.81
Sb	1.405	1.90
In	1.405	1.78
As	1.225	2.00

**Tableau (I,1)** :Rayons covalents et électro-négativités des éléments III-V

En plus de ces considérations, il a été mis en évidence l'influence d'un substrat d'épitaxie, sur le diagramme de phase [31]. En effet dans le cadre, d'une déformation élastique du réseau épitaxie, contraint par celui du substrat, la modification extrinsèque du diagramme se traduit par une stabilisation de l'alliage.

Plusieurs modèles ont été élaborés afin d'expliquer les faits expérimentaux, on cite le modèles (D. L P : Delta lattice parameter ) [32] , le modèle D.L.P.O.C (Delta, lattice, parameter, ordre et contrainte ) [33] .

### I.7.2 Modèle (D.L.P.O.C)

Marboeuf et al [33] et en se basant sur le modèle DLP dû à Stringfellow [32] ont développé un formalisme qui est basé sur :

L'introduction d'un paramètre d'ordre à courte distance où le désordre chimique conduit à une entropie d'excès de configuration  $\Delta^{xS} S^S$  (modification intrinsèque du diagramme de phase ).

L'évaluation d'une enthalpie libre d'excès supplémentaire due à la contrainte sur l'alliage exercé par le substrat  $\Delta^{xS} G^S_{(cont)}$  (modification extrinsèque du diagramme de phase ).

### I.7.3 CALCUL DE L'ENTROPIE D'EXCES DUE A L'ORDRE :

Pour un alliage quaternaire on ne peut définir un paramètre d'ordre pour chaque réseau d'un alliage pseudo-binaire  $(A_{x1} B_{x2})_{III} (C_{x3} D_{x4})_{IV}$ . Si les interactions entre sous réseaux  $III_{xS} V$  sont faibles, l'entropie d'excès de configuration  $\Delta^{xS} S^C$  qui est négative sera en fonction de deux paramètres d'ordre indépendants  $\alpha_{III-III}$  et  $\alpha_{V-V}$ .

En se basant sur l'approche de Stringfellow [32] l'enthalpie libre d'excès de l'alliage peut s'écrire :

$$\Delta G^s = -ka_0^{-2.5} + RT[(1 - \alpha_{III-III}) \sum_{i=1}^2 x_j Lnx_i + (1 - \alpha_{V-V}) \sum_{i=3}^{\eta} x_j Lnx_j] \quad (I.6)$$

avec :

$k$  : Constante positive

$a_0$  : Paramètre du réseau Zinc-blende.

La corrélation entre l'existence d'un ordre partiel ( $\alpha_{III-III}$ ,  $\alpha_{V-V} \neq 0$ ) dans l'alliage et la démixtion et mise en évidence par l'équation spinoidale délimitant le domaine de solution solide dans son extension métastable.

$$Det_{ord} = \frac{\partial^2 \Delta G^s}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial^2 \Delta G^s}{\partial y^2} - \left[ \frac{\partial^2 \Delta G^s}{\partial x \partial y} \right]^2 \quad (I.7)$$

La solution solide sera :

- Stable ou métastable si  $Det_{ord} > 0$

- Instable si  $Det_{ord} < 0$

#### I.7.4 APPLICATION DU MODELE (DL P-OC) AU CALCUL DU DIAGRAMME QUATERNAIRE D'UN ALLIAGE III-V

Dans la solution solide les coefficients d'activités  $\gamma_{ij}$  peuvent se décomposer en un produit de trois termes :

$$\mathcal{Y}_{ij} = \mathcal{Y}_{ijDLP} \mathcal{Y}_{ij.ord} \mathcal{Y}_{ij.cont} \quad (I.8)$$

D'une part :

$$\text{On a : } RT \ln \mathcal{Y}_{ij(DLP)} = k \left[ 2,5 a^{-3,5} \sum_{ij} (a_{ij}^{-2,5} a_0^{2,5}) \right] \quad (I.9)$$

Avec :

$$\sum_{ij} = x_k x_j (a_{ij} - a_{kj}) + x_i x_k (a_{ij} - a_{ik}) + x_k x_{k^1} (a_{ik^1} + a_{kj} - 2a_k a_{k^1}).$$

$$K = 1, 2 \neq i, k^1 = 3, 4 \neq j.$$

De l'autre part :

$$\log \gamma_{ij.ond} = - (\alpha_{III-III} \ln X_i + \alpha_{V-V} \ln X_j). \quad (I.10)$$

et :

$$RT \ln \gamma_{ij} = 3,6 \cdot 10^{-12} \left[ \frac{E a_0^4}{1 - \nu} \right]_{III-Vref} \left[ \left( \frac{a_0 a_{sub}}{a_{sub}} \right) \frac{1}{a_0} + \frac{a_2^2 - a_{su}^2}{a_{sub}^2 \cdot a_0^2} \sum_{ij} \right] \quad (I.11)$$

Supposant que la loi de Vegard est valable, on aura donc :

$$a_0 = x_1 x_3 a_{13} + x_2 x_3 a_{23} + x_1 x_4 a_{14} + x_2 x_4 a_{24}.$$

avec :

$a_0$  : est le paramètre de maille du composé ( $A_{x_1}B_{x_2}C_{x_3}D_{x_4}$ ).

$a_{13}$  : est le paramètre de maille du binaire AC.

$a_{23}$  : est le paramètre de maille du binaire BC

$a_{14}$  : est le paramètre de maille du binaire AD

$a_{24}$  : est le paramètre de maille du binaire BD

## I.8 PROPRIETES ELECTRONIQUES

### INTRODUCTION:

La structure de bande d'un matériau solide est d'une importance capitale, car elle détermine sa nature (métallique, isolant ou semi-conducteur).

#### I.8.1 MODELISATION DES ALLIAGES QUATERNAIRE

##### I.8.1.1 ALLIAGE QUATERNAIRE QUADRATIQUE

Cette alliage est formé de quatre composés binaires AB,AD,BC,BD à l'aide d'un schéma d'interpolation linéaire et en se servant de la loi de Vegard, le paramètre Q du réseau quaternaire peut être obtenu à partir des paramètres des constituants binaires .

a) Paramètre du réseau :

$$Q(x,y) = (1-x)y B_{AC} + (1-x)(1-y) B_{AD} + xy B_{BC} + x(1-y) B_{BD} \quad (I.12)$$

**Si l'un des quatre paramètres est manquant, le schéma d'interpolation devient [11].**

$$Q(x,y) = (1-x)B_{AC} + y B_{BC} + (1-y) B_{BD}.$$

$$Q(x,y) = (1-x) B_{BD} + y B_{BC} + (x-y) B_{BD}.$$

$$Q(x,y) = (y-x) B_{AC} + (1-y) B_{BD} + x B_{BC}.$$

En se servant des relations relatives aux ternaires (valeurs T) on peut écrire :

$$Q(x,y) = \frac{x(1-x)[(1-y)T_{ABD} + yT_{ABD}] + y(1-y)[(1-x)T_{ACD} + xT_{BCD}]}{x(1-x) + y(1-y)}. \quad (I.13)$$

### I.8.1.2 CONSTANTE DU RESEAU DE L'ALLIAGE

D'après la loi de Vegard, la constante du réseau d'un alliage semi-conducteur quaternaire est donnée par :

$$a(x,y) = x(1-x)a(AD) + (1-x)y a(BC) + xy a(AC) + (1-x)(1-y)a(BD) \quad (I.14)$$

ou :

$a(AD)$ ,  $a(BC)$ ,  $a(AC)$ ,  $a(BD)$  sont les constantes de réseau des constituants binaires.

### I.8.1.3 GAPS D'ENERGIE DE L'ALLIAGE QUATERNAIRE QUADRATIQUE

Les gaps d'énergies de l'alliage quaternaire peuvent être calculés à partir de la moyenne des gaps d'énergies des constituants de l'alliage.[12][14].

D'après le modèle de calcul de Akio-Sasalis [15] et la formule de Thomson et Woulley [10] on peut écrire :

$$E_{ABCD} = E_{ABD}y + E_{ABC}(1-y) - \frac{\alpha_{ABCD}}{\left(\frac{E_{ABD} + E_{ABC}}{2}\right)^{1/2}} \cdot y(1-y) \quad (I.15)$$

avec :

$$E_{ABC} = E_{BC}x + E_{AC}(1-x) - \frac{\alpha_{ABC}}{\left(\frac{E_{BC} + E_{AC}}{2}\right)^{1/2}} x(1-x). \quad (I.16)$$

$$E_{ABD} = E_{BD}x + E_{AD}(1-x) - \frac{\alpha_{ABD}}{\left(\frac{E_{BD} + E_{AD}}{2}\right)^{1/2}} x(1-x) \quad (I.17)$$

$$\alpha_{ABCD} = \alpha_{BCD}x + \alpha_{ACD}(1-x).$$

avec :

$E_{ijk}$  : énergie de la bande interdite

$\alpha_{ijk}$  : paramètre d'affaiblissement du gap d'énergie

Plusieurs mesures expérimentales de l'énergie  $E(x,y)$  peuvent être interpolées de la manière suivantes :

$$E_g(x,y) = \bar{E}_g(x,y) - b f(x,y) \quad (I.18)$$

avec :

$E_g(x)$  : gap moyenne des binaires constituant l'alliage

$B$  : paramètre de courbure optique

$f(x,y)$  : fonction quadratique des compositions  $x, y$ .

#### **I.8.1.4 CALCUL DU PARAMETRE DE COURBURE**

L'une des méthodes [16] traite le désaccord des deux sous réseaux, comme étant indépendant, l'équation (I.18) devient :

$$E_g(x,y) = \bar{E}_g(x,y) - b_1 \cdot x(1-x) - b_2 y(1-y). \quad (I.19)$$

Afin d'inclure les interactions entre les deux sous réseaux, Sylvester et ses collaborateurs [13] ont utilisé la forme générale de la fonction  $f(x,y)$  donnée par :

$$f(x,y) = x(1-x) + y(1-y).$$

En appliquant le modèle de VAN Vechten et Bergstresser au quaternaire, le paramètre de courbure devient :

$$b(x,y) = \frac{1}{A} [C_{A-B}^2 x(1-x) + C_{C-D}^2 y(1-y)] \quad (I.20)$$

avec :

$C_{A-B}^2$  : Différence d'électro-négativité entre A et B

$C_{C-D}^2$  : Différence d'électro-négativité entre C et D

#### **I.8.2 MODELISATION DES ALLIAGES TRIANGULAIRES**

L'alliage triangulaire cationique  $A_x B_{1-x} C_{1-x-y} D_y$  est composé de trois binaires AD, BD, et CD et l'alliage triangulaire anionique  $A B_x C_y D_{1-x-y}$  est composé des binaires AB, AC et AD.

De même qu'un alliage quadratique et en utilisant un schéma d'interpolation linéaire, le paramètre du réseau du quaternaire triangulaire est obtenu à partir des paramètres des constituants binaires par :

### **I.8.2.1 paramètre du réseau**

#### **I.8.2.1.1 Alliage quaternaire triangulaire cationique**

$$Q(x,y) = x B_{AD} + y B_{BD} + (1-x-y) B_{BC}. \quad (I.21)$$

#### **I.8.2.1.2 Alliage quaternaire triangulaire anionique**

$$Q(x,y) = x B_{AB} + y B_{AC} + (1-x-y) B_{AD}. \quad (I.22)$$

### **I.8.2.2 Constante du réseau de l'alliage triangulaire**

Comme dans le cas de l'alliage quaternaire quadratique la constante du réseau est estimée de la loi de Vegard en utilisant les constantes de réseau des constituants binaires, elle est donnée par :

#### **I.8.2.2.1 Alliage triangulaire cationique**

$$a(x,y) = x a(AD) + y a(BD) + (1-x-y) a(CD). \quad (I.23)$$

#### **I.8.2.2.2 Alliage triangulaire anionique**

$$a(x,y) = x a(AB) + y a(AC) + (1-x-y) a(AD). \quad (I.24)$$

Avec

$a(AD)$ ,  $a(BD)$ ,  $a(CD)$ ,  $a(AB)$ ,  $a(AC)$ ,  $a(AD)$  . Constantes de réseau des composés binaires.

### **I.8.2.3 GAPS D'ENERGIES DES ALLIAGES QUATERNAIRES TRIANGULAIRES**

A. Sasaki et ces collaborateurs[15] ont appliqué la formule de variation du gap d'énergie, en fonction de la composition proposée par Thomson et Woolley [9 ]

Le gap d'énergie est donné en fonction des compositions de l'alliage quaternaire par :

$$E_{ABCD} = \frac{1}{x+y} \left\{ E_{ABD}x + E_{ACD}y - \frac{\alpha_{ABC}}{\left(\frac{E_{ABD} + E_{ACD}}{2}\right)^{1/2}} xy \right\} \quad (I.25)$$

$$\text{avec : } E_{ABD} = E_{AB}(x+y) + E_{AD}(1-x-y) - \frac{\alpha_{ABD}}{\left(\frac{E_{AB} + E_{AD}}{2}\right)^{1/2}} (x+y)(1-x-y) \quad \} \quad (I.26)$$

$$E_{ACD} = E_{AC}(x+y) + E_{AD}(1-x-y) - \frac{\alpha_{ACD}}{\left(\frac{E_{AC} + E_{AD}}{2}\right)^{1/2}} (x+y)(1-x-y) \quad \}. \quad (I.27)$$

$\alpha$  : paramètre de courbure.

## II METHODES DE CALCUL

### INTRODUCTION :

La structure de bande d'un alliage semi-conducteur et le paramètre du réseau ainsi que l'indice de réfraction sont les propriétés les plus intéressantes.

Afin de les déterminer plusieurs modèles de calcul ont été élaborés. Ces modèles se subdivisent en trois catégories:

Classique.

Empirique.

Semi-empirique.

Parmi les méthodes de calcul les plus utilisées on cite :

- Méthode des liaisons fortes
- Méthode de Korring, Kohn et Rostoker (k.k k).
- Méthode des ondes planes orthogonalisées (opw).
- Méthode des ondes planes augmentées (Apw).
- La méthode du pseudo-potentiel

On s'intéresse ici à la méthode du pseudo-potentiel empirique (EPM : Empirical pseudo-potentiel méthode).

Cette méthode est fondée sur la base de l'équation de Shrodinger, qui est offerte par la mécanique quantique et qui met à la disposition des chercheurs physiciens, un moyen très efficace pour déterminer la structure électronique des matériaux. Cependant, ce moyen est exprimé par la relation fondamentale suivante

$$H\psi = E\psi. \quad (\text{II.1})$$

avec :

H : opérateur Hamiltonien

E : Energie.

$\psi$  : Fonction d'onde.

La résolution de cette équation permet de déterminer les énergies  $E_n(k)$  et les fonctions d'ondes  $\psi(k)$  correspondantes. Vu la complexité de cette équation, sa résolution pose des problèmes épineux, afin de palier à ces difficultés, on doit toujours avoir recours à des approximations et des hypothèses qui rendent le problème abordable.

Cette méthode est très utilisée actuellement pour la détermination des structures électroniques et d'autres propriétés des semi-conducteurs telles que : le gap d'énergie, l'influence de la pression et de la température sur la structure électronique, en plus des propriétés optiques (constantes optiques, spectre photo-émisif et la fonction diélectrique ) des matériaux et particulièrement des alliages.

L'avantage qu'offre cette méthode est la possibilité de l'ajuster à l'expérience, cette dernière approche est dite méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M).

Il est à noter que dans cette méthode et si l'effet du cœur est négligé, elle est dite de pseudopotentiel local et non local dans le cas contraire.

## II.1 PRESENTATION DE LA METHODE DU PSEUDO POTENTIEL

L'équation de Schrodinger peut s'écrire sous une forme plus explicite, comme suit:

$$H\psi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n \psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.2})$$

avec:

H : opérateur Hamiltonien

K : vecteur d'onde

n : nombre de bandes

$E_{nk}$  : bandes d'énergies

$\psi_{nk}$  : fonction d'onde

La fonction d'onde de l'électron peut être écrite sous la forme :

$$\Psi_{nk} = \phi_K(r) - \sum_c \langle \phi_{ck}(r) | \phi_k(r) \rangle \phi_{ck}(r) \quad (\text{II.3})$$

La méthode OPW permet d'écrire :

$$|\Psi\rangle = |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \quad (\text{II.4})$$

En omettant les indices k et sachant que les indices c et v représentent respectivement les états du cœur et de valence, et en substituant l'équation (II.4) dans l'équation (II.2) on aura :

$$H \left[ |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \right] = E_n \left[ |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \right] \quad (\text{II.5})$$

L'Hamiltonien H agit sur  $|\phi_c\rangle$  en donnant les énergies propres des états du cœur, cette influence est remplacée par  $E_c / |\phi_c\rangle$ .

D'où :

$$H |\Psi_v\rangle - E \sum_c \langle \psi_c | \Psi_v \rangle |\psi_c\rangle = E_n |\Psi_v\rangle - \sum_c \langle \psi_c | \Psi_v \rangle |\psi_c\rangle \quad (\text{II.6})$$

Ou encore :

$$H |\phi_v\rangle + \sum_C (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle = E_n |\phi_v\rangle \quad (\text{II.7})$$

Qui peut se mettre sous la forme :

$$H |\phi_v\rangle + \sum_C (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \frac{|\phi_v\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.8})$$

On pose :

$$H_{PS} = H + \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.9})$$

$$H_{ps} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.10})$$

L'équation (II.8) devient :

$$H_{ps}|\phi_v\rangle = E_n|\phi_v\rangle \quad (\text{II.11})$$

soit :

$$V_R = \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{\langle \phi_v | \phi_c \rangle} \quad (\text{II.12})$$

En substituant l'équation (II.12) dans l'équation (II.10), on aura :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(r) + V_R \right] |\phi_v\rangle = E_n |\phi_v\rangle. \quad (\text{II.13})$$

avec :

$V(r)$  : potentiel cristallin réel de nature négative et attractive

$V_R$  : potentiel de nature positive et répulsive

L'interaction des potentiels  $V(r)$  et  $V_R$  conduit ainsi à un potentiel effectif dit pseudopotentiel ( $V_{ps}$ )

Donc :

$$V_{ps} = V(r) + V_R \quad (\text{II.14})$$

**Concernant la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) basée sur des données expérimentales telles que les paramètres des réseaux et les transitions interbandes et intrabandes, et qui a été développée en premier lieu par Brust et al [35] et ayant donné des résultats satisfaisants avec le Si [34] et le Germanium.**

La méthode EPM a été appliquée, par la suite, dans la détermination des propriétés de liaison des semi-conducteurs, en termes de densités de charges des électrons de valence. Le pseudopotentiel n'est fonction que de la position, elle est donc du type local.

**Considérons la pseudo-équation d'onde.**

$$H_{ps} \phi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.15})$$

Ecrivons l'équation de Schrodinger pour un potentiel cristallin  $V_{ps}$ :

$$H_{ps} \phi_{nk}(\mathbf{r}) = (T + v) \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.16})$$

La pseudo fonction d'onde  $\phi_{nk}(\mathbf{r})$  est donnée par :

$$\phi_{nk}(r) = \sum_G C_{nk}(G) \exp[i(K + G).r] \quad (\text{II.17})$$

avec :

k: vecteur d'onde

G : vecteur du réseau réciproque

$C_{nk}(G)$  : coefficient de Fourier de  $\phi_{nk}(r)$ .

La détermination des énergies  $E_n(k)$  passe par la résolution de l'équation séculaire

$$\langle \phi_G | H_{ps} - E_n | \phi_{G'} \rangle = 0 \quad (\text{II.18})$$

qui peut s'écrire d'une manière explicite comme suit :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \langle \phi_G | \nabla^2 | \phi_{G'} \rangle + \langle \phi_G | v_{ps} | \phi_{G'} \rangle - E_n(K) \langle \phi_G | \phi_{G'} \rangle = 0 \quad (\text{II.19})$$

Pour déterminer les termes de cette équation on procède comme suit :

En premier lieu :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \phi_G | \nabla^2 | \phi_{G'} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* \nabla^2 \phi_G d^3r \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Omega} \int \exp[-i(k+G).r] \nabla^2 \exp[+i(k+G).r] d^3r. \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k+G')^2 \frac{1}{\Omega} \int \exp[i(G-G').r] d^3r. \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k+G')^2 \delta_{G,G'} \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

En deuxième lieu:

$$\langle \phi_G | v_{ps} | \phi_{G'} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* v_{ps}(r) \phi_{G'} d^3r \quad (\text{II.21})$$

$$v_{ps}(r) = \sum_n \sum_i V_{ps}^a(r - \tau_i - R_n) \quad (\text{II.22})$$

$v_{ps}$ : est une superposition de pseudopotentiels atomiques (E. P. M local).

avec :

$r$  : vecteur de base

$i$  : nombre d'atomes par maille élémentaire.

$\tau_i$  : vecteur liant deux atomes de la même maille

$R_n$  : la position du quatrième vecteur du réseau de Bravais.

$N$  : nombre de mailles élémentaires dans le solide

Par voie de conséquences, le terme restant est donné par :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G / V_{ps} / \phi_{G'} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* V_{ps}(r) \phi_{G'} d^3r \\ &= \frac{1}{\Omega} \int \sum_n^N \sum_i V_{ps}^a(r - \tau_i - R_n) \exp [i(G' - G).r] d^3r \quad (\text{II.23}) \end{aligned}$$

Soit :

$$r' = r - \tau_i - R_n \quad (\text{II.24})$$

d'où l'équation (II.23) devient :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G / V_{ps} / \phi_{G'} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int \sum_n^N \sum_i V_{ps}^a(r') \exp [i(G - G')(r' + \tau_i + R_n)] d^3r \\ &= \sum_n^N \exp [-i(G - G')R_n] \sum_i \exp [-i(G - G')\tau_i]^* \\ &\quad \left[ \frac{1}{\Omega} \int V_{ps}^a(r') \exp [-i(G - G')r'] d^3r \right] \quad (\text{II.25}) \end{aligned}$$

Pour une structure cubique de type diamant ou zincblende

$$\Omega = 2N_{ra}$$

avec :

$\Omega$  : volume cristallin.

$\Omega_a$  : volume atomique

L'équation (II.25) devient :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G | V_{ps} | \phi_{G'} \rangle &= \sum_n^N \exp [-i(G - G')R_n] \sum_i \exp [-i(G - G')\tau_i]^* \\ &\quad \frac{1}{2N} \frac{1}{\Omega_a} \int V_{ps}^a(r') \exp [-i(G - G')r'] d^3r \quad (\text{II.26}) \end{aligned}$$

ou le terme :

$$\sum_n^N \exp \left[ -i(G - G') \cdot R_n \right] = 1 \quad \text{pour : } G = G'$$

et :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_a} \int V_{ps}^a(r') \exp \left[ -i(G - G') \cdot r' \right] d^3r &= V_{ps}^a(G - G'). \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \exp \left[ -i(G - G') \cdot \tau_i \right] V_{ps}^a(G - G') \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

Pour des raisons de simplification, le centre des deux atomes repérés par  $r_1$  et  $r_2$  est pris comme origine avec :

$$\begin{aligned} r_1 &= \left( \frac{a}{8} \right) (1,1,1) = \tau \\ r_2 &= -\tau \end{aligned}$$

Où ‘‘a’’ est la constante du réseau.

Dans ces conditions on aura :

$$\begin{aligned} \langle \phi_{G'} / V_{ps} / \phi_G \rangle &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[ -i(G - G') \cdot r_1 \right] V_1(G - G') + \exp \left[ -i(G - G') \cdot r_2 \right] V_2(G - G') \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[ -i(G - G') \cdot \tau \right] V_1(G - G') + \exp \left[ -i(G - G') \cdot (-\tau) \right] V_2(G - G') \right\} \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

où  $v_1$  et  $v_2$  représentent les contributions du cation et de l’anion qui dépendent du module de  $G$ .

$$v_1(G) = \frac{2N}{\Omega_a} = \frac{\eta\pi Z_1 \ell^2}{|G|^2} \quad (\text{II.29a})$$

$$v_2(G) = \frac{2N}{\Omega_a} = \frac{\eta\pi Z_2 \ell^2}{|G|^2} \quad (\text{II.29b})$$

Dans le cas général, il est nécessaire d’introduire les termes symétriques et antisymétriques exprimés par :

$$v_s = \frac{1}{2} [V_1 + V_2]$$





Les valeurs et les vecteurs propres sont obtenus en résolvant l'équation séculaire suivante :

$$\left\| \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^2 \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} + \tau V_S \cos(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau + V_A \sin(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau - E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \right\| C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = 0 \quad (\text{II.33})$$

En troisième lieu on a :

$$E_n(\mathbf{k}) \langle \phi_{\mathbf{G}} / \phi_{\mathbf{G}'} \rangle = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \phi_{\mathbf{G}}^* \phi_{\mathbf{G}'} d^3r = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \exp[i(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\mathbf{r}] d^3r = E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \quad (\text{II.34})$$

## II.2 METHODE DU PSEUDOPOTENTIEL EMPIRIQUE COUPLEE AVEC L'APPROXIMATION DU CRISTAL VIRTUEL (VCA)

**Dans un alliage, et même si nous supposant que le cristal est parfait (cas irréal), le désordre peut être du à la différence des potentiels intrinsèques des atomes de substitution (désordre chimique). Cette différence se traduit par des distorsions qui ) leur tour influencent directement les paramètres du matériau (alliage).**

**L'une des approches aux problèmes des alliages est l'approximation du cristal virtuel (VCA) [36],[37]. Dans cette approche, on considère que les distorsions sont suffisamment faibles afin de préserver la structure de bande du cristal parfait.**

**Dans ce cas l'identité des atomes de substitution est abandonnée au profil d'un élément intermédiaire, ce qui permet de définir une nouvelle constante du réseau .**

**Si par exemple, l'alliage considéré est un ternaire de type  $A_x B_{1-x} C$  . La constante du réseau et le potentiel de l'alliage ternaire sont exprimés par :**

$$\mathbf{a}_{\text{alliage}} = x \mathbf{a}_{AC} + (1-x) \mathbf{a}_{BC} \quad (\text{II.35a})$$

$$V(\mathbf{r}) = x V_{AC} + (1-x) V_{BC}$$

(II.35b)

Avec :

$a_{AC}$ ,  $a_{BC}$  représentent les paramètres de mailles des constituants binaires AC et BC.

$V_{AC}$  et  $V_{BC}$  sont les potentiels périodiques des cristaux AC et BC.

La différence des potentiels  $V(\mathbf{r}) = V_{AC} - V_{BC}$  qui est considéré comme une perturbation devra avoir la même périodicité que les potentiels  $V_{AC}$  et  $V_{BC}$ .

Dans l'approximation du cristal virtuel, la constante du réseau est estimée à partir de la loi de Vegard. Donc pour un alliage quaternaire du type :



Cette constante est donnée par :

$$a_0 = x(1-y) \cdot a_{AD} + (1-x) \cdot y \cdot a_{BC} + x \cdot y \cdot a_{AC} + (1-x)(1-y) \cdot a_{BD}. \quad (\text{II.36})$$

De la même façon, et en tenant compte des volumes de l'effet des volumes différents dans le matériau quaternaire, le pseudopotentiel peut être calculé à partir des facteurs de formes suivants [ ] :

$$V^S = \frac{1}{\Omega_{\text{all}}} (x(1-y)\Omega_{AD} V_{AD}^S + (1-x) \cdot y \Omega_{BC} V_{BC}^S + xy \cdot \Omega_{AC} V_{AC}^S + (1-x)(1-y)\Omega_{BD} V_{BD}^S) \quad (\text{II.37})$$

$$V^A = \frac{1}{\Omega_{\text{all}}} (x(1-y)\Omega_{AD} V_{AD}^A + (1-x) \cdot y \Omega_{BC} V_{BC}^A + xy \cdot \Omega_{AC} V_{AC}^A + (1-x)(1-y)\Omega_{BD} V_{BD}^A) \quad (\text{II.38})$$

La méthode de l'approximation du cristal virtuel est d'autant plus meilleure que le désaccord de paramètre de maille est faible et les configurations atomiques des atomes de substitution sont semblables.

## II METHODES DE CALCUL

### INTRODUCTION :

La structure de bande d'un alliage semi-conducteur et le paramètre du réseau ainsi que l'indice de réfraction sont les propriétés les plus intéressantes.

Afin de les déterminer plusieurs modèles de calcul ont été élaborés. Ces modèles se subdivisent en trois catégories:

Classique.

Empirique.

Semi-empirique.

Parmi les méthodes de calcul les plus utilisées on cite :

- Méthode des liaisons fortes
- Méthode de Korring, Kohn et Rostoker (k.k k).
- Méthode des ondes planes orthogonalisées (opw).
- Méthode des ondes planes augmentées (Apw).
- La méthode du pseudo-potentiel

On s'intéresse ici à la méthode du pseudo-potentiel empirique (EPM : Empirical pseudo-potentiel méthode).

Cette méthode est fondée sur la base de l'équation de Shrodinger, qui est offerte par la mécanique quantique et qui met à la disposition des chercheurs physiciens, un moyen très efficace pour déterminer la structure électronique des matériaux. Cependant, ce moyen est exprimé par la relation fondamentale suivante

$$H\psi = E\psi. \quad (\text{II.1})$$

avec :

H : opérateur Hamiltonien

E : Energie.

$\psi$  : Fonction d'onde.

La résolution de cette équation permet de déterminer les énergies  $E_n(k)$  et les fonctions d'ondes  $\psi(k)$  correspondantes. Vu la complexité de cette équation, sa résolution pose des problèmes épineux, afin de palier à ces difficultés, on doit toujours avoir recours à des approximations et des hypothèses qui rendent le problème abordable.

Cette méthode est très utilisée actuellement pour la détermination des structures électroniques et d'autres propriétés des semi-conducteurs telles que : le gap d'énergie, l'influence de la pression et de la température sur la structure électronique, en plus des propriétés optiques (constantes optiques, spectre photo-émisif et la fonction diélectrique ) des matériaux et particulièrement des alliages.

L'avantage qu'offre cette méthode est la possibilité de l'ajuster à l'expérience, cette dernière approche est dite méthode de pseudopotentiel empirique (E.P.M).

Il est à noter que dans cette méthode et si l'effet du cœur est négligé, elle est dite de pseudopotentiel local et non local dans le cas contraire.

## II.1 PRESENTATION DE LA METHODE DU PSEUDO POTENTIEL

L'équation de Schrodinger peut s'écrire sous une forme plus explicite, comme suit:

$$H\psi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n \psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.2})$$

avec:

H : opérateur Hamiltonien

K : vecteur d'onde

n : nombre de bandes

$E_{nk}$  : bandes d'énergies

$\psi_{nk}$  : fonction d'onde

La fonction d'onde de l'électron peut être écrite sous la forme :

$$\Psi_{nk} = \phi_K(r) - \sum_c \langle \phi_{ck}(r) | \phi_k(r) \rangle \phi_{ck}(r) \quad (\text{II.3})$$

La méthode OPW permet d'écrire :

$$|\Psi\rangle = |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \quad (\text{II.4})$$

En omettant les indices k et sachant que les indices c et v représentent respectivement les états du cœur et de valence, et en substituant l'équation (II.4) dans l'équation (II.2) on aura :

$$H \left[ |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \right] = E_n \left[ |\phi_v\rangle - \sum_c \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \right] \quad (\text{II.5})$$

L'Hamiltonien H agit sur  $|\phi_c\rangle$  en donnant les énergies propres des états du cœur, cette influence est remplacée par  $E_c / |\phi_c\rangle$ .

D'où :

$$H |\Psi_v\rangle - E \sum_c \langle \psi_c | \Psi_v \rangle |\psi_c\rangle = E_n |\Psi_v\rangle - \sum_c \langle \psi_c | \Psi_v \rangle |\psi_c\rangle \quad (\text{II.6})$$

Ou encore :

$$H |\phi_v\rangle + \sum_C (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle = E_n |\phi_v\rangle \quad (\text{II.7})$$

Qui peut se mettre sous la forme :

$$H |\phi_v\rangle + \sum_C (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle |\phi_c\rangle \frac{|\phi_v\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.8})$$

On pose :

$$H_{PS} = H + \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.9})$$

$$H_{ps} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{|\phi_v\rangle} \quad (\text{II.10})$$

L'équation (II.8) devient :

$$H_{ps}|\phi_v\rangle = E_n|\phi_v\rangle \quad (\text{II.11})$$

soit :

$$V_R = \sum_c (E_n - E_c) \langle \phi_c | \phi_v \rangle \frac{|\phi_c\rangle}{\langle \phi_v | \phi_c \rangle} \quad (\text{II.12})$$

En substituant l'équation (II.12) dans l'équation (II.10), on aura :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(r) + V_R \right] |\phi_v\rangle = E_n |\phi_v\rangle. \quad (\text{II.13})$$

avec :

$V(r)$  : potentiel cristallin réel de nature négative et attractive

$V_R$  : potentiel de nature positive et répulsive

L'interaction des potentiels  $V(r)$  et  $V_R$  conduit ainsi à un potentiel effectif dit pseudopotentiel ( $V_{ps}$ )

Donc :

$$V_{ps} = V(r) + V_R \quad (\text{II.14})$$

**Concernant la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) basée sur des données expérimentales telles que les paramètres des réseaux et les transitions interbandes et intrabandes, et qui a été développée en premier lieu par Brust et al [35] et ayant donné des résultats satisfaisants avec le Si [34] et le Germanium.**

La méthode EPM a été appliquée, par la suite, dans la détermination des propriétés de liaison des semi-conducteurs, en termes de densités de charges des électrons de valence. Le pseudopotentiel n'est fonction que de la position, elle est donc du type local.

**Considérons la pseudo-équation d'onde.**

$$H_{ps} \phi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.15})$$

Ecrivons l'équation de Schrodinger pour un potentiel cristallin  $V_{ps}$ :

$$H_{ps} \phi_{nk}(\mathbf{r}) = (T + v) \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.16})$$

La pseudo fonction d'onde  $\phi_{nk}(\mathbf{r})$  est donnée par :

$$\phi_{nk}(r) = \sum_G C_{nk}(G) \exp[i(K + G).r] \quad (\text{II.17})$$

avec :

k: vecteur d'onde

G : vecteur du réseau réciproque

$C_{nk}(G)$  : coefficient de Fourier de  $\phi_{nk}(r)$ .

La détermination des énergies  $E_n(k)$  passe par la résolution de l'équation séculaire

$$\langle \phi_G | H_{ps} - E_n | \phi_{G'} \rangle = 0 \quad (\text{II.18})$$

qui peut s'écrire d'une manière explicite comme suit :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \langle \phi_G | \nabla^2 | \phi_{G'} \rangle + \langle \phi_G | v_{ps} | \phi_{G'} \rangle - E_n(K) \langle \phi_G | \phi_{G'} \rangle = 0 \quad (\text{II.19})$$

Pour déterminer les termes de cette équation on procède comme suit :

En premier lieu :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \phi_G | \nabla^2 | \phi_{G'} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* \nabla^2 \phi_G d^3r \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Omega} \int \exp[-i(k+G).r] \nabla^2 \exp[+i(k+G).r] d^3r. \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k+G')^2 \frac{1}{\Omega} \int \exp[i(G-G').r] d^3r. \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k+G')^2 \delta_{G,G'} \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

En deuxième lieu:

$$\langle \phi_G | v_{ps} | \phi_{G'} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* v_{ps}(r) \phi_{G'} d^3r \quad (\text{II.21})$$

$$v_{ps}(r) = \sum_n \sum_i V_{ps}^a(r - \tau_i - R_n) \quad (\text{II.22})$$

$v_{ps}$ : est une superposition de pseudopotentiels atomiques (E. P. M local).

avec :

$r$  : vecteur de base

$i$  : nombre d'atomes par maille élémentaire.

$\tau_i$  : vecteur liant deux atomes de la même maille

$R_n$  : la position du quatrième vecteur du réseau de Bravais.

$N$  : nombre de mailles élémentaires dans le solide

Par voie de conséquences, le terme restant est donné par :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G / V_{ps} / \phi_{G'} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int \phi_G^* V_{ps}(r) \phi_{G'} d^3r \\ &= \frac{1}{\Omega} \int \sum_n \sum_i V_{ps}^a(r - \tau_i - R_n) \exp [i(G' - G).r] d^3r \quad (\text{II.23}) \end{aligned}$$

Soit :

$$r' = r - \tau_i - R_n \quad (\text{II.24})$$

d'où l'équation (II.23) devient :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G / V_{ps} / \phi_{G'} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int \sum_n \sum_i V_{ps}^a(r') \exp [i(G - G')(r' + \tau_i + R_n)] d^3r \\ &= \sum_n \exp [-i(G - G')R_n] \sum_i \exp [-i(G - G')\tau_i]^* \\ &\quad \left[ \frac{1}{\Omega} \int V_{ps}^a(r') \exp [-i(G - G')r'] d^3r \right] \quad (\text{II.25}) \end{aligned}$$

Pour une structure cubique de type diamant ou zincblende

$$\Omega = 2N_{ra}$$

avec :

$\Omega$  : volume cristallin.

$\Omega_a$  : volume atomique

L'équation (II.25) devient :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G | V_{ps} | \phi_{G'} \rangle &= \sum_n \exp [-i(G - G')R_n] \sum_i \exp [-i(G - G')\tau_i]^* \\ &\quad \frac{1}{2N} \frac{1}{\Omega_a} \int V_{ps}^a(r') \exp [-i(G - G')r'] d^3r \quad (\text{II.26}) \end{aligned}$$

ou le terme :

$$\sum_n^N \exp \left[ -i(G - G') \cdot R_n \right] = 1 \quad \text{pour : } G = G'$$

et :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega_a} \int V_{ps}^a(r') \exp \left[ -i(G - G') \cdot r' \right] d^3r &= V_{ps}^a(G - G'). \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \exp \left[ -i(G - G') \cdot \tau_i \right] V_{ps}^a(G - G') \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

Pour des raisons de simplification, le centre des deux atomes repérés par  $r_1$  et  $r_2$  est pris comme origine avec :

$$\begin{aligned} r_1 &= \left( \frac{a}{8} \right) (1,1,1) = \tau \\ r_2 &= -\tau \end{aligned}$$

Où ‘‘a’’ est la constante du réseau.

Dans ces conditions on aura :

$$\begin{aligned} \langle \phi_{G'} / V_{ps} / \phi_G \rangle &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[ -i(G - G') \cdot r_1 \right] V_1(G - G') + \exp \left[ -i(G - G') \cdot r_2 \right] V_2(G - G') \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[ -i(G - G') \cdot \tau \right] V_1(G - G') + \exp \left[ -i(G - G') \cdot (-\tau) \right] V_2(G - G') \right\} \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

où  $v_1$  et  $v_2$  représentent les contributions du cation et de l’anion qui dépendent du module de  $G$ .

$$v_1(G) = \frac{2N}{\Omega_a} = \frac{\eta\pi Z_1 \ell^2}{|G|^2} \quad (\text{II.29a})$$

$$v_2(G) = \frac{2N}{\Omega_a} = \frac{\eta\pi Z_2 \ell^2}{|G|^2} \quad (\text{II.29b})$$

Dans le cas général, il est nécessaire d’introduire les termes symétriques et antisymétriques exprimés par :

$$v_s = \frac{1}{2} [V_1 + V_2]$$





Les valeurs et les vecteurs propres sont obtenus en résolvant l'équation séculaire suivante :

$$\left\| \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^2 \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} + \tau V_S \cos(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau + V_A \sin(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau - E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \right\| C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = 0 \quad (\text{II.33})$$

En troisième lieu on a :

$$E_n(\mathbf{k}) \langle \phi_{\mathbf{G}} / \phi_{\mathbf{G}'} \rangle = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \phi_{\mathbf{G}}^* \phi_{\mathbf{G}'} d^3r = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \exp[i(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\mathbf{r}] d^3r = E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \quad (\text{II.34})$$

## II.2 METHODE DU PSEUDOPOTENTIEL EMPIRIQUE COUPLEE AVEC L'APPROXIMATION DU CRISTAL VIRTUEL (VCA)

**Dans un alliage, et même si nous supposant que le cristal est parfait (cas irréal), le désordre peut être du à la différence des potentiels intrinsèques des atomes de substitution (désordre chimique). Cette différence se traduit par des distorsions qui ) leur tour influencent directement les paramètres du matériau (alliage).**

**L'une des approches aux problèmes des alliages est l'approximation du cristal virtuel (VCA) [36],[37]. Dans cette approche, on considère que les distorsions sont suffisamment faibles afin de préserver la structure de bande du cristal parfait.**

**Dans ce cas l'identité des atomes de substitution est abandonnée au profil d'un élément intermédiaire, ce qui permet de définir une nouvelle constante du réseau .**

**Si par exemple, l'alliage considéré est un ternaire de type  $A_x B_{1-x} C$  . La constante du réseau et le potentiel de l'alliage ternaire sont exprimés par :**

$$\mathbf{a}_{\text{alliage}} = x \mathbf{a}_{AC} + (1-x) \mathbf{a}_{BC} \quad (\text{II.35a})$$

$$V(\mathbf{r}) = x V_{AC} + (1-x) V_{BC}$$

(II.35b)

Avec :

$a_{AC}$ ,  $a_{BC}$  représentent les paramètres de mailles des constituants binaires AC et BC.

$V_{AC}$  et  $V_{BC}$  sont les potentiels périodiques des cristaux AC et BC.

La différence des potentiels  $V(\mathbf{r}) = V_{AC} - V_{BC}$  qui est considéré comme une perturbation devra avoir la même périodicité que les potentiels  $V_{AC}$  et  $V_{BC}$ .

Dans l'approximation du cristal virtuel, la constante du réseau est estimée à partir de la loi de Vegard. Donc pour un alliage quaternaire du type :



Cette constante est donnée par :

$$a_0 = x(1-y) \cdot a_{AD} + (1-x) \cdot y \cdot a_{BC} + x \cdot y \cdot a_{AC} + (1-x)(1-y) \cdot a_{BD}. \quad (\text{II.36})$$

De la même façon, et en tenant compte des volumes de l'effet des volumes différents dans le matériau quaternaire, le pseudopotentiel peut être calculé à partir des facteurs de formes suivants [ ] :

$$V^S = \frac{1}{\Omega_{\text{all}}} (x(1-y)\Omega_{AD} V_{AD}^S + (1-x) \cdot y \Omega_{BC} V_{BC}^S + xy \cdot \Omega_{AC} V_{AC}^S + (1-x)(1-y)\Omega_{BD} V_{BD}^S) \quad (\text{II.37})$$

$$V^A = \frac{1}{\Omega_{\text{all}}} (x(1-y)\Omega_{AD} V_{AD}^A + (1-x) \cdot y \Omega_{BC} V_{BC}^A + xy \cdot \Omega_{AC} V_{AC}^A + (1-x)(1-y)\Omega_{BD} V_{BD}^A) \quad (\text{II.38})$$

La méthode de l'approximation du cristal virtuel est d'autant plus meilleure que le désaccord de paramètre de maille est faible et les configurations atomiques des atomes de substitution sont semblables.

### **III PROPRIETES OPTIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS**

#### *INTRODUCTION :*

L'étude des propriétés optiques des semi-conducteurs est consacrée à la compréhension des phénomènes d'interaction d'une radiation lumineuse avec la matière, notamment l'interaction des photons avec le solide.

Cette étude traite les connaissances quantitatives de la propagation de la lumière dans les solides et la possibilité de confronter des évidences expérimentales avec les modèles théoriques.

#### **III.1 MILIEUX DIELECTRIQUES**

Un milieu diélectrique parfait est un milieu dans lequel il ne peut exister de courants continus sous l'action d'une perturbation extérieure : Champ électrique statique.

Un tel milieu se polarise sous l'action de ce champ, mais cette définition est trop restrictive et ne correspond pas à la réalité physique, car :

Les milieux réels contiennent toujours des impuretés et des défauts

Les expériences actuelles sont faites sous l'action de champs perturbateurs dépendant du temps (RX, UV, BF...)

#### **III.2 CLASSIFICATION DES MILIEUX**

Les différents milieux sont classés d'une manière élémentaire comme suit :

Milieux dilués ou gaz.

Milieux semi-condensés ou liquides.

Milieux condensés ou solides.

### III.3 INTERACTION CHAMP ELECTROMAGNETIQUE-MILIEU DIELECTRIQUE

#### III.3.1 EQUATION DU CHAMP

Les équations du champ microscopique, valables dans le vide, ne le sont plus dans les milieux condensés, ou il faut calculer le champ électromagnétique moyen à l'intérieur du milieu. Laurentz a généralisé les équations microscopiques de Maxwell aux milieux matériels.

Les équations de Maxwell sont données sous la forme habituelle par :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{III.1})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (\text{III.2})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{III.3})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \quad (\text{III.4})$$

Avec :

$\vec{E}$  : champ électrique

$\vec{B}$  : champ magnétique

$\vec{D}$  : champ de déplacement électrique

$\vec{H}$  : champ d'induction magnétique

$\vec{J}$  : densité de courant électrique

$\rho_{ext}$  : densité de charge extérieure appliquée

### III.4 FONCTION DIELECTRIQUE [46]

Dans un milieu matériel, l'induction est liée au champ macroscopique moyen par la relation :

$$dD_i = \varepsilon_i^j dE_j + \varepsilon_{ij}^k dE_k + \varepsilon_{ij}^{kl} dE_k dE_l dE_j + \dots \quad (\text{III.5})$$

Pour des champs excitateurs faibles, on se limite à :

$$dD_i = \varepsilon_i^j dE_j \quad (\text{III.6})$$

Où  $\varepsilon_i^j$  est le tenseur de constante diélectrique, qui n'est justifié que lorsque la grandeur est effectivement une constante.

On utilise à l'heure actuelle le terme fonction diélectrique car l'absorption et la dispersion dépendent de la fréquence et du vecteur d'onde.

### III.5 REPONSE DIELECTRIQUE LINEAIRE

La réponse linéaire d'un milieu matériel à une excitation extérieure est effectivement traduite par la fonction de réponse diélectrique.

Cette réponse peut être écrite sous la forme d'un produit de convolution :

$$D^i(\vec{r}, t) = \varepsilon_j^i(\vec{r}, t) \bullet E^j(\vec{r}, t) \quad (\text{III.6})$$

Où la transformé de Fourier est :

$$D^i(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_j^i(\vec{k}, \omega) * E^j(\vec{k}, \omega) \quad (\text{III.7})$$

Avec :

$\varepsilon_j^i(\vec{K}, \omega)$ : fonction de réponse diélectrique

$\varepsilon_j^i(\vec{k}, \omega)$ : sa transformé de Fourier

Il est clair que la dépendance en  $K$  et en  $\omega$  traduit la dispersion en fréquence et la dispersion spatiale, ce type de dispersion se traduit pour un milieu cristallin et à titre d'exemple par : l'activité optique de la polarisation rotatoire.

Dans les limites théoriques linéaires, il est rendu compte de l'absorption, en écrivant  $\varepsilon_j^i(K, \omega)$  sous une forme complexe :

$$\varepsilon_j^i(\vec{K}, \omega) = \varepsilon_{j1}^i(\vec{K}, \omega) + i\varepsilon_{j2}^i(\vec{K}, \omega) \quad (\text{III.8})$$

## **III.6 SPECTRE D'ABSORPTION DE LA LUMIERE**

### *INTRODUCTION :*

Une radiation lumineuse incidente à la surface d'un corps solide, interagit avec lui par échange d'énergie, l'affaiblissement de l'intensité de la radiation lumineuse est interprété par la diminution du nombre de photons, ceci est du soit à une diffusion soit à une absorption. L'absorption est caractérisée par un coefficient  $\alpha(\omega)$  représentant la probabilité d'absorption d'un photon par unité de longueur, il est fonction de la section efficace d'absorption des photons  $\sigma(\omega)$  et de la concentration N des centres d'absorption. On a :

$$\alpha(\omega) = \sigma(\omega) \cdot N \quad (\text{III.9})$$

La dépendance du coefficient d'absorption de la fréquence  $\omega$  ou de la longueur d'onde  $\lambda$  se caractérise par le spectre d'absorption.

## **III.6 LES TYPES D'ABSORPTION**

Dans l'étude des différents matériaux semi-conducteurs, les principaux mécanismes d'absorption rencontrés sont :

### **III.6.1 L'ABSORPTION INTRINSEQUE**

La lumière provoque la transition d'un électron de l'état lié à l'état libre, donc de la bande de valence vers la bande de conduction, l'absorption propre n'est possible que lorsque l'énergie du photon est supérieure ou égale à la largeur de la bande interdite et pouvant avoir lieu aussi bien dans la région infrarouge du spectre que dans la région des radiations visibles selon la largeur de la bande interdite.

### **III.6.2 L'ABSORPTION EXTRINSEQUE**

Ce type est du à l'ionisation des atomes d'impuretés, donc à une transition d'électrons dans la bande de conduction ou de la bande de valence sur les niveaux d'impuretés.

### **III.6.3 L'ABSORPTION PAR PORTEURS DE CHARGES LIBRES**

Ce type provient de la mise en circulation des porteurs de charges libres sous l'action du champ électrique de l'onde lumineuse, celle-ci perdant une partie de son énergie qui est utilisée pour accélérer les porteurs de charges libres et par voie de conséquence l'onde lumineuse s'en trouve atténuée.

### **III.6.4 L'ABSORPTION PAR RESEAU**

Ce type est du à l'interaction avec les vibrations thermiques du réseau (variation du nombre de photons).

### **III.6.5 L'ABSORPTION PLASMIQUE**

Elle est du à l'ensemble des électrons et trous libres.

### **III.6.6 L'ABSORPTION INTRABANDE**

Elle est observée dans le cas des semi conducteurs (Ge, Si) elle est caractérisée par la structure de bande complexe.

### **III.6.7 L'ABSORPTION PAR EXCITONS**

C'est le cas où l'absorption donne lieu à la formation de paires électron-trou

## **III.7 LA REFLECTIVITE**

Les mesures de la réflexion de la lumière fournissent une information plus ou moins complète sur les systèmes électroniques. La réflectivité  $R$  (facteur de réflexion) caractérise la part d'énergie qui est réfléchi à l'interface du solide.

$$R = \frac{I_{reflchie}}{I_{incidente}} \quad (III.10)$$

$I$  : Intensité lumineuse

### III.8 PROPAGATION DES ONDES ELECTROMAGNETIQUES

Les équations régissant les champs électriques et magnétiques des ondes sont données par :

#### III.8.1 ONDE INCIDENTE

$$\vec{E}_i = E_{i0} \exp j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (\text{III.11})$$

$$\vec{H}_i = (\vec{k}_i \wedge \vec{E}_i) / \omega \quad (\text{III.13})$$

#### III.8.2 ONDE REFLICHIE

$$\vec{E}_r = E_{r0} \exp j(\vec{k}_r \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (\text{III.13a})$$

$$\vec{H}_r = (\vec{k}_r \wedge \vec{E}_r) / \omega \quad (\text{III.13b})$$

#### III.8.3 ONDE TRANSMISE

$$\vec{E}_t = \vec{E}_{t0} \exp j(\vec{k}_{t0} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (\text{III.14a})$$

$$\vec{H}_t = (\vec{k}_t \wedge \vec{E}_t) / \omega \cdot \mu \quad (\text{III.14b})$$

Avec :

$\mu$  = perméabilité relative du milieu où l'onde est transmise.

Le coefficient de réflexion est donné par :

$$R = \frac{E_r}{E_i} \quad (\text{III.15})$$

Avec :  $E_r$  et  $E_i$  sont les amplitudes des champs électriques incident et réfléchi.

Il a été démontré en théorie électromagnétique de la lumière que le coefficient de réflexion pour une polarisation de type « S » est donné par :

$$r_s = \frac{n_1 \cos i_1 - n_2 \cos i_2}{n_1 \cos i_2 + n_2 \cos i_1} \quad (\text{III.16})$$

Avec :  $n_1, n_2$  sont respectivement les indices de réfraction des milieux I et II  
 et  $i_1, i_2$  sont les angles d'incidence et de réflexion.

Pour une polarisation de type « P » le coefficient de réflexion est donné par :

$$r_p = \frac{n_1 \cos i_2 - n_2 \cos i_1}{n_1 \cos i_2 + n_2 \cos i_1} \quad (\text{III.17})$$

Le facteur de réflexion R est donné par :

$$R = \left| \frac{1 - n_2}{1 + n_2} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (\text{III.18})$$

$$n_2 = n + ik$$

Avec :  $n$  : indice de réfraction

$K$  : coefficient d'extinction

Les constantes optiques sont des nombres réels et positifs, il sont liés à la fonction diélectrique complexe.

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$$

$$n = \left( \frac{(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^{1/2}) + \varepsilon_1}{2} \right)^{1/2} \quad (\text{III.19})$$

$$k = \left( \frac{(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^{1/2}) - \varepsilon_1}{2} \right)^{1/2}$$

### III.9 FONCTION DIELECTRIQUE ET TRANSITIONS INTERBANDES

### III.9.1 ANALYSE THEORIQUE DES TRANSITIONS OPTIQUES [41]

L'énergie cinétique en mécanique classique d'un système à N électrons est donnée par :

$$\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} \quad (III.20)$$

En présence d'un champ électromagnétique l'expression (III.20) devient :

$$\sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2m} \left( \vec{p}_i + \frac{e \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t)}{c} \right)^2 \right] \quad (III.21)$$

Avec :

$\vec{A}$  : le potentiel vecteur du champ électromagnétique

e : valeur absolue de la charge de l'électron

m : masse de l'électron

p : quantité de mouvement

L'hamiltonien d'interaction des électrons dans un champ de radiation est donné par :

$$H = \frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{P}_i \quad (III.22)$$

Pour étudier l'effet du champ de radiation sur les états cristallins on suppose que H est un terme de perturbation dépendant du temps et cause les transitions des bandes occupées vers les bandes vides.

La relation entre les constantes optiques et la structure électronique est dérivée à partir de la probabilité de transition.

### III.9.2 THEORIE QUANTIQUE DES TRANSITIONS

La probabilité par unité de temps, au premier ordre de perturbation a la forme :  $Le^{\pm i\omega.t}$ , elle introduit une transition d'un état initial  $|i\rangle$  d'énergie  $E_i$  à un état final  $|f\rangle$  d'énergie  $E_f$ , on a :

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|L|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (\text{III.23})$$

Donc on a soit une transition avec absorption d'un quanta d'énergie, soit une émission d'un quanta d'énergie ( $\pm \hbar\omega$ ).

La probabilité de transition au deuxième ordre est :

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\beta} \frac{\langle f|L|\beta\rangle \langle \beta|L|i\rangle}{E_{\beta} - E_i \pm \hbar\omega} \right|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega \pm \hbar\omega) \quad (\text{III.24})$$

Avec :

$|\beta\rangle$  : états intermédiaires entre  $|i\rangle$  et  $|f\rangle$ .

### III.9.3 CONTRIBUTION D'UN COUPLE DE BANDE DE VALENCE ET DE CONDUCTION AUX CONSTANTES OPTIQUES

En négligeant les effets relativistes et en se plaçant dans le cas d'une approximation adiabatique et mono-électronique, l'état de base d'un système électronique est écrit comme un déterminant de Slater :

$$\psi_0 = A \left\{ \psi_{vk_1}(r_1) \alpha(1) \psi_{vk_1}(r_2) \beta(2) \dots \psi_{vk_1s_1}(r_n) \psi_{vk_n}(r_{2n}) \beta(2n) \right\} \quad (\text{III.25})$$

Avec :

A : Opérateur antisymétrique.

N : Nombre de mailles élémentaires

V : Une bande de valence spécifique

$\alpha, \beta$  : Fonctions propres de spin

$s_i$  : Indice de spin ( $\alpha$  ou  $\beta$ ).

Dans un état excité où la fonction d'onde de conduction  $\psi_{ck_f s_f}$  remplace la fonction d'onde de valence  $\psi_{vk_i s_i}$ , on peut alors écrire

$$\Psi' = \left\{ \Psi_{vk_i} (r_1) \alpha(1) \Psi_{vk_1} (r_2) \beta(2) \dots \Psi_{ck_f s_f} (r_n) \dots \Psi_{vk_n} (r_{2n}) \beta(2N) \right\} \quad (\text{III.26})$$

$$\text{Avec : } \langle \Psi' | H | \Psi_0 \rangle = \frac{e}{mc} \left\langle \Psi_{ck_i s_i} \left| \vec{A} \cdot \vec{p} \right| \Psi_{vk_i s_i} \right\rangle = \frac{e}{mc} \delta_{s_i, s_f} \left\langle \Psi_{ck_f} \left| \vec{A} \cdot \vec{p} \right| \Psi_{vk_i} \right\rangle \quad (\text{III.27})$$

Le potentiel vecteur  $\vec{A}$  est donné pour une radiation de fréquence  $\omega$  par :

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{e} E^{i(\vec{\eta} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \Phi \quad (\text{III.28})$$

Avec :

$\Phi$  : le conjugué complexe

$\vec{e}$  : vecteur de polarisation dans la direction de  $\vec{E}$

$\vec{n}$  : vecteur d'onde de la radiation

Si on ne tient compte que de l'effet du premier terme seulement de l'équation (II.28), la probabilité de transition par unité de temps est donnée par :

$$P_{vk_i s_i \rightarrow ck_f s_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{mc} \right)^2 \delta_{s_i, s_f} \left| \left\langle \Psi_{ck_f} \left| e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{r}} \vec{e} \cdot \vec{p} \right| \Psi_{vk_i} \right\rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (\text{III.29})$$

Qui est une expression de base pour le calcul des constantes optiques.

Soit l'élément matriciel :

$$\left\langle \Psi_{ck_f} \left| e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{r}} \vec{e} \cdot \vec{p} \right| \Psi_{vk_i} \right\rangle$$

On peut alors écrire :

$$\vec{K}_f = \vec{K}_i + \vec{\eta} + \vec{h} \quad (\text{III.30})$$

Où  $\vec{h}$  est vecteur du réseau réciproque  $K_i$  et  $K_f$  sont confiés à la première zone de Brillouin, et sachant que la fonction d'onde et les énergies dans une

bande donnée, varie lentement en  $\vec{K}$  par comparaison aux variations de l'ordre de  $\vec{\eta}$ .

On peut alors écrire :

$$\vec{K}_i \approx \vec{K}_f \tag{III.31}$$

Par voie de conséquence, seules les transitions verticales peuvent être causées par le champ de radiation. L'expression de la probabilité par unité de temps peut être donnée par :

$$P_{vks \rightarrow cks} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{mc} \right)^2 |eM_{cv}(\mathbf{K})|^2 \delta(E_c(\mathbf{K}) - E_v(\mathbf{K}) - \hbar\omega) \dots \tag{III.32}$$

$$eM_{cv}(\mathbf{K}) = \langle \Psi_{ck} | \vec{e} \cdot \vec{P} | \Psi_{vk} \rangle = \vec{e} \int_{\Omega} \Psi_c^*(\mathbf{K}, \mathbf{r}) (-i\hbar \vec{\nabla}) \Psi_v(\mathbf{K}, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \dots \tag{III.33}$$

$\Omega$  : volume cristallin

Le nombre de transitions par unité de temps, par unité de volume est donné par :

$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{mc} \right)^2 \sum_{v,c} \int_{ZB} \frac{2dk}{(2\pi)^3} |eM_{cv}(\mathbf{K})|^2 \delta(E_c(\mathbf{K}) - E_v - \hbar\omega) \tag{III.34}$$

Afin de décrire les propriétés optiques des matériaux, il est impératif de trouver la relation entre l'équation (III.34) et les constantes optiques.

D'une part on a :

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$$

De l'autre part :

$$N = n + I k$$

Où N est lié à  $\epsilon$  par la relation suivante:

$$\epsilon = N^2 \tag{III.35}$$

Le coefficient d'absorption 'α' est lié aux constantes optiques:

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} \dots\dots\dots(III36)$$

$$\alpha = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2 \dots\dots\dots(III37)$$

La densité d'énergie moyenne U est liée aux constantes optiques par la relation :

$$U = \frac{n^2 A_0^2 \omega^2}{2\pi c^2} \dots\dots\dots(III38)$$

**En se servant de l'équation (III.34) et sachant que le coefficient d'absorption est par définition l'énergie absorbée par unité de temps, par unité de volume divisée par le flux d'énergie.**

$$\alpha(\omega) = \frac{\hbar\omega W(\omega)}{U(c/n)} \dots\dots\dots(III.39)$$

D'où finalement :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 n \epsilon \omega} \sum_{v,c} \int_{ZB} \frac{2dk}{(2\pi)^3} |e \cdot M_{cv}(K)|^2 \delta(E_c(K) - E_v(K) - \hbar\omega) \dots\dots(III40)$$

et :

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{ZB} \frac{2dk}{(2\pi)^3} |e \cdot M_{cv}(K)|^2 \delta(E_c(K) - E_v(K) - \hbar\omega) \dots\dots(III.41)$$

Cette relation lie la structure de bande aux constantes optiques. L'expression  $\epsilon_1(\omega)$  est obtenue en utilisant la relation de dispersion de Kramers-Kroning [42].

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2p}{\pi} \int_0^\infty \omega' E_2(\omega') \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \dots\dots\dots(III.42)$$

**P** : Partie principale

Une substitution directe de l'équation (III.41) dans l'équation (III.42) donne :

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{8\pi \cdot e^2}{m^2} \sum_{v,c} \int_{ZB} \frac{2dk}{(2\pi)^3} \frac{|eM_{cv}(K)|^2}{[E_c(K) - E_v(K)]/\hbar} \frac{1}{[E_c(K) - E_v(K)]^2/\hbar^2 - \omega^2} \dots \text{(III.43)}$$

Pour des raisons de commodité , on utilise certaines règles de sommation [43]:

On a :

$$\int_0^\infty \omega \epsilon_2(\omega) d\omega = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \dots \text{(III.44)}$$

$$\omega_p = \left( \frac{4\pi \cdot n e^2}{m} \right)^{1/2} \dots \text{(III.45)}$$

$\omega_p$  : fréquence du plasma

$n$  : densité d'électrons participant à la transition.

Pour un milieu isotrope les règles de sommation les plus importantes de l'indice de réfraction sont :

$$\int_0^\infty [n(\omega) - 1] d\omega \dots \text{(III.46)}$$

$$\int_0^\infty \omega K(\omega) d\omega = \frac{\pi}{4} \omega_p^2 \dots \text{(III.47)}$$

### III.9.4 STRUCTURE DES CONSTANTES OPTIQUES AUX POINTS CRITIQUES

Les constantes optiques sont calculées en évaluant la partie imaginaire de la fonction diélectrique. Les recherches faites dans ce domaine ont montré que la structure des constantes optiques présente des pics dans certains points dit critiques.

Pour un couple donné, de bandes de valence et de conduction, les éléments matriciels  $|e \cdot M_{cv}(\mathbf{K})|^2$  sont des fonctions lisses de  $\bar{\mathbf{K}}$  à l'exception qu'au voisinage de quelques points où elles s'annulent grâce à la symétrie.

**Si on considère que  $|e \cdot M_{cv}(\mathbf{K})|^2$  est constante, la contribution d'une paire de bandes dans la fonction diélectrique est proportionnelle d'une part à  $\frac{1}{\omega^2}$  et de l'autre part à la quantité :**

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \int_{ZB} \frac{2dk}{(2\pi)^3} \delta(E_c(\mathbf{K}) - E_v(\mathbf{K}) - \hbar\omega) \quad (\text{III.48})$$

qui est dite, densité d'état conjointe et qui indique le nombre de paires d'états (vide et occupé) séparées par une énergie  $\hbar\omega$

Soit :

$$\int_a^b g(x) \delta[f(x)] dx = \sum_{x_0} g(x_0) \left| \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0}^{-1} \quad (\text{III.49})$$

où  $x_0$  est racine de  $f$  et  $x_0 \in [a, b]$

On a dans le cas tridimensionnel :

$$J_{cv} = \frac{2}{(2\pi^3)} \int_E \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{K}} [E_c(\mathbf{K}) - E_v(\mathbf{K})]|} \quad (\text{III.50})$$

Avec :

$$E = E_c(\mathbf{K}) - E_v(\mathbf{K}) \quad (\text{III.51})$$

$ds$  : élément de surface dans l'espace  $\bar{\mathbf{K}}$  sur la surface définie par l'équation (III. 51)

La densité d'état conjointe présente de fortes variations pour les transitions interbandes au voisinage de certaines valeurs particulières de  $E$ , qui sont les énergies des points critiques.

L'équation (III.50) montre que les singularités se présentent lorsque :

$$\nabla_{\mathbf{K}} E_c(\mathbf{K}) - \nabla_{\mathbf{K}} E_v(\mathbf{K}) = 0 \quad (\text{III.52})$$

Ces singularités sont dites : points critiques de Vann Hove[44]. Ils se classent en quatre types  $M_0, M_1, M_2, M_3$

### III.9.5 NOMBRE ET CARACTERE DES POINTS CRITIQUES

Certains théorèmes donnent une limite au nombre minimum de points critiques. Une fonction périodique de N variables doit avoir  $C_n^N$  points critiques de type  $M_n$

$$C_n^N = \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad n \leq N$$

Dans le cas à une dimension :

$N=1$  ;  $C_1^1 = 1$  on a un maximum et un minimum.

Dans le cas à deux dimensions ( $N=2$ )

On a quatre points critiques : un maximum, un minimum et deux points plats

Dans le cas à trois dimensions ( $N=3$ ) on a huit points critiques, un minimum  $M_0$ , un maximum  $M_3$ , trois points plats  $M_1$ , et trois points plats  $M_2$ .

Les trois points plats et leurs équivalents ont la même valeur de l'énergie et par voie de conséquence, on quatre positions énergétiques dans le cas à trois dimensions.

Il est à noter que chaque structure cristalline comprend un nombre de points critiques spécifique [44][47]

Le comportement analytique de la densité d'état conjointe  $J_{CV}(E)$  au voisinage d'une singularité est obtenu en développant l'expression :  $E = E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K})$  en série de Taylor au voisinage de la singularité et en se limitant aux termes quadratiques et en notant les vecteurs d'ondes suivant les axes principaux par :  $K_x, K_y$  et  $K_z$  on aura :

$$E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K}) = E_0 + \frac{\hbar}{2} \left( \varepsilon_x \frac{K_x^2}{m_x} + \varepsilon_y \frac{K_y^2}{m_y} + \varepsilon_z \frac{K_z^2}{m_z} \right) \quad \text{(III.53)}$$

Avec :  $M_x, M_y, M_z$  quantités positives

$\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$  sont égales à +1 ou -1

On considère à titre d'exemple le cas du point critique  $M_1$  ou  $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 1$  et

$$\varepsilon_z = -1$$

En substituant l'équation (III.53) dans (III.48) on obtient :

$$J_{CV}(E) = \int_{ZB} \frac{2 dk}{(2\pi)^3} \delta \left( E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{K_x^2}{m_x} + \frac{K_y^2}{m_y} - \frac{K_z^2}{m_z} - E \right) \right) \quad (III.54)$$

$$\text{Soit : } q_i = \left( \frac{\hbar}{2m_i} \right)^{0.5} \cdot K_i \quad (i = x, y, z)$$

D'où :

$$J_{CV}(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2^{3/2} (m_x m_y m_z)^{1/2}}{\hbar^3} \int dq \delta(E_0 + q_x^2 + q_y^2 + q_z^2 - E) \quad (III.55)$$

L'équation (III.55) est transformée, en utilisant les coordonnées cylindriques  $(q, \varphi)$  dans le plan  $(q_x, q_y)$ , en :

$$J_{CV}(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2^{3/2} (m_x m_y m_z)^{0.5}}{\hbar^3} 2\pi \iint q dq d\varphi \delta(q^2 - q_z^2 + E_0 - E) \quad (III.56)$$

En se servant de l'équation (III.49) et en intégrant par rapport à  $q_z$  on trouve :

$$J_{CV}(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2^{3/2} (m_x m_y m_z)^{1/2}}{\hbar^3} \int_0^R q dq \sum_{q_{z0}} \frac{1}{2|q_{z0}|} \quad (III.57)$$

avec :

$$q_{z0} = \pm (q^2 + E_0 - E)^{1/2} \quad \text{si } q^2 + E_0 - E > 0$$

R : Rayon de la sphère entourant le point critique.

Soit :  $\gamma(x)$  opérateur Echelon unité

$$\gamma(x) = \begin{cases} 1 & \text{Si } x \geq 0 \\ 0 & \text{Si } x < 0 \end{cases}$$

En appliquant cet opérateur à l'équation (III.57) on obtient :

$$J_{CV}(E) = A \int_0^R \frac{q dq}{(q^2 + E_0 - E)^{1/2}} \gamma(q^2 + E_0 - E) \quad (III.58)$$

Avec :

$$A = \pi 2^{7/2} (m_x m_y m_z)^{1/2} / \hbar^3$$

Deux cas sont à traiter :

Premièrement :

Si  $E < E_0$  alors  $\gamma(q^2 + E_0 - E) = 1$

$$\begin{aligned} J_{CV}(E) &= A \int_0^R \frac{q dq}{(q^2 + E_0 - E)^{1/2}} = A \left[ (R^2 + E_0 - E)^{1/2} - (E_0 - E)^{1/2} \right] \\ &= -A(E_0 - E)^{1/2} + \Phi(E_0 - E) \end{aligned} \quad (\text{III.59})$$

Il est à remarquer que la dernière égalité n'est vraie que lorsque  $|E - E_0| \ll R$ .

$\Phi(E_0 - E)$  désigne une quantité qui s'annule linéairement quand  $E \rightarrow E_0$ .

Deuxièmement :

Si  $E > E_0$ , alors  $\gamma(q^2 + E_0 - E) = 1$  si et seulement si :  $q > (E - E_0)^{1/2}$ .

$$J_{CV}(E) = A \int_{(E-E_0)^{1/2}}^R \frac{q dq}{(q^2 + E_0 - E)^{1/2}} = A(R^2 + E_0 - E)^{1/2} = \Phi(E_0 - E) \quad (\text{III.60})$$

De même, on peut trouver l'expression de  $J_{CV}(E)$  dans le cas bidimensionnel où l'énergie dépend seulement de deux composantes de  $\vec{K}(k_x, k_y)$

. L'expression de  $J_{CV}(E)$  est donnée par :

$$J_{CV}(E) = \frac{2\pi}{C} \int_{ZB} \frac{2}{(2\pi)^3} dk_x dk_y \delta(E_c(k_x, k_y) - E_v(k_x, k_y) - E) \quad (\text{III.61})$$

avec :

$$E_c(k_x, k_y) - E_v(k_x, k_y) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left( \varepsilon_x \frac{k_x^2}{m_x} + \varepsilon_y \frac{k_y^2}{m_y} \right)$$

ans le cas unidimensionnel où l'énergie dépend seulement d'une composante de  $\vec{K}$ ,  $k_z$  par exemple. L'expression de  $J_{CV}(E)$  est donnée par :

$$J_{CV}(E) = \frac{4\pi^2}{ab} \int_{ZB} \frac{2}{(2\pi)^3} dk_z \delta(E_c(k_z) - E_v(k_z) - E) \quad (\text{III.62})$$

avec :

$$E_c(k_z) - E_v(k_z) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left( \varepsilon_z \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

Les résultats des trois cas, tridimensionnel, bidimensionnel et unidimensionnel sont représentés respectivement dans les tableaux (III.1), (III.2) et (III.3).

Point critique	Densité d'état conjointe	Représentation
M <sub>0</sub> minimum m	$J(E) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \\ B + A(E - E_0)^{1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \dots \end{cases}$	
M <sub>1</sub> point plat	$J(E) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \\ B - A(E - E_0)^{1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \end{cases}$	
M <sub>2</sub> point plat	$J(E) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \\ B - A(E - E_0)^{1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \dots \end{cases}$	
M <sub>3</sub> maximum m	$J(E) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \\ B + A(E - E_0)^{1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \end{cases}$	

**TABLEAU (III.1) :** comportement analytique et représentation de  $J_{cv}(E)$ , cas à trois dimensions ( $A = \pi^{7/2} \hbar^{-3} (m_x m_y m_z)^{1/2}$ , B= constante )

Point critique	Densité d'état conjointe	Représentation
$M_0$ minimum	$J(E) = \begin{cases} B+\Phi(E-E_0); & \dots\dots\dots(E < E_0) \\ B+A+\Phi(E-E_0); & \dots\dots\dots(E > E_0) \end{cases}$	
$M_1$ point plat	$J(E) = B - \frac{A}{\pi} \ln \left  1 - \frac{E}{E_0} \right  + \Phi(E - E_0)$	
$M_2$ maximum	$J(E) = \begin{cases} B+A+\Phi(E-E_0); & \dots\dots\dots(E < E_0) \\ B+\Phi(E-E_0); & \dots\dots\dots(E > E_0) \end{cases}$	

**TABLEAU (III.2) :**

Comportement analytique et représentation de  $J_{cv}(E)$ , cas à deux dimensions

( $A = \frac{8\pi}{c} \hbar^{-2} (m_x m_y)^{1/2}$  ; B= constante )

Point critique	Densité d'état conjointe	Représentation
$M_0$ minimum		

	$J(\mathbf{E}) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \\ B + A(E - E_0)^{-1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \end{cases}$	
$M_1$ maximum	$J(\mathbf{E}) = \begin{cases} B + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E > E_0) \\ B + A(E - E_0)^{-1/2} + \Phi(E - E_0); \dots \dots \dots (E < E_0) \end{cases}$	

**TABLEAU(III.3) :**

Comportement analytique de la densité d'état conjointe  $J_{CV}(E)$  Près des points critiques, cas à une dimension ( $A = \left(\frac{4\pi}{ab}\right) \hbar^{-1} m_z^{1/2}$ , B = constante)

## IV MODELISATION DE LA FONCTION DIELECTRIQUE

### INTRODUCTION :

Dans l'étude des propriétés optiques des solides, le comportement de la fonction diélectrique complexe  $\varepsilon(\omega)$  est d'importance capitale, d'où la nécessité de la mise en place d'un modèle décrivant ce comportement.

La fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  expérimentale ne s'exprime pas comme fonctions des énergies électriques aux points critiques  $E_j$ , la composition de l'alliage ou même l'énergie du photon.

La construction d'un modèle exprimant la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  comme une fonction de  $\hbar\omega$  ou de la composition  $x,y$  et  $E_j$  est nécessaire et décisif dans la simulation de  $\varepsilon(\omega)$ .

Les recherches axées sur, ce domaine ont conduit généralement à des modèles purement phénoménologiques. Ces modèles (MP) [48][49] donnent des ajustements à  $\varepsilon(\omega)$  plus exactes numériquement que ceux donnés par les modèles basés sur l'approximation des points critiques de bande parabolique (PCBP). Mais les (MP) restent totalement incapable de reproduire la forme de la fonction diélectrique au voisinage du point critique  $E_0$ , et la forme de ces dérivées en tout point critique. Un autre handicap caractérise les (MP) grâce à leur caractère non physique, c'est qu'ils lient d'une manière non convenable la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  aux paramètres physiques. telle que la composition de l'alliage, la température ; les contraintes, le champs électrique.

Les modèles (PCBP) [50][51] sont plus satisfaisants, mais ils ne donnent pas un bon ajustement à  $\varepsilon(\omega)$  et ils violent la structure complète de la densité d'état électronique imposée par des considérations d'ordre topologique.

Dans les derniers temps, des modèles composés[51][53] sont développés en augmentant un modèle (PCBP) par des contributions phénoménologiques à hautes énergies.

## **IV.1 MODELES PHENOMENOLOGIQUES**

### **IV.1.1 MODELE DE WEMPLE ET DIDOMENICO**

Un modèle d'oscillateur semi-empirique permettant d'analyser l'indice de réfraction de plusieurs matériaux à été proposé par Wemple et Didominico, ce modèle exige deux paramètres  $E_p$  et  $E_d$  .[54].

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{E_p \cdot E_d}{E_p^2 - E^2} \quad (\text{IV.1})$$

- La partie imaginaire  $\varepsilon_2$  doit être une fonction  $\gamma$  à l'énergie  $E_p$ .
- La force d'un oscillateur effectif à l'énergie  $E_p$  doit être égale à  $\pi E_d / 2$ .
- L'inconvénient de ce modèle est qu'il ne peut pas être appliqué dans la région du point critique  $E_0$ , ni en son dessus.

### **IV.1.2 MODELE DE STERN**

Un autre modèle d'oscillateur harmonique double, a été proposé par Stern[55 ], mais ce modèle présente lui aussi un désaccord avec les résultats expérimentaux aux bord de l'absorption fondamentale.

### IV.1.3 MODELE D'AFROMITZ

Afromitz [56] a proposé un modèle modifié qui tient compte du bord de l'absorption directe ( $E_0$ ), l'expression de la partie imaginaire  $\varepsilon_2$  de la fonction diélectrique devient proportionnelle à  $(\hbar\omega)^4$ .

$$\varepsilon_2(\omega) = \begin{cases} \eta(\hbar\omega)^4 & \text{si } E_0 \leq \hbar\omega \leq E_f \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{IV.2}).$$

avec :

$$E_n(\mathbf{k}) \langle \phi_{\mathbf{G}} / \phi_{\mathbf{G}'} \rangle = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \phi_{\mathbf{G}}^* \phi_{\mathbf{G}'} d^3\mathbf{r} = E_n(\mathbf{k}) \frac{1}{\Omega} \int \exp[i(\mathbf{G}' - \mathbf{G})\mathbf{r}] d^3\mathbf{r} = E_n(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}$$

$$E_f = \left( 2E_p^2 - E_0^2 \right)$$

### IV.1.4 MODELE D'ERMAN

Ce modèle proposé par Erman et al [57] approxime le continuum des transitions possible entre les états de bande dans un solide par un petit ensemble discret de transitions et par conséquent il n'incorpore pas complètement la structure de bande.

Dans ce modèle  $\varepsilon(\omega)$  est donnée par l'expression:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \sum_{k=1}^n A_k \left( \frac{1}{\hbar\omega - E_k + i\Gamma_k} - \frac{1}{\hbar\omega + E_k + i\Gamma_k} \right) \quad (\text{IV.3}).$$

avec :

$E_k$  : Energie de l'oscillateur harmonique.

$\Gamma_k$  : Largeur de raie .

Le modèle de l'oscillateur harmonique contient 21 paramètres libres dont  $\varepsilon(\omega)$  dépend d'une façon non linéaire de 14 paramètres.

Les énergies  $E_k$  de ce modèle ne sont pas liées d'une manière simples aux énergies des points critiques  $E_j$ . La structure de bande est aussi liée d'une

façon simple à ce modèle. En plus les largeurs de raie ne se rapportent pas aux vraies largeurs, elles sont plus élargies et ne contiennent pas l'information utile sur la qualité de l'échantillon.

#### **IV.1.5 MODELE DE TERRY**

Terry [49] a amélioré le modèle de l'oscillateur harmonique en incluant un angle de phase arbitraire pour chaque oscillateur, il est à noter que Terry a utilisé neuf oscillateurs d'où 36 paramètres libres dont  $\varepsilon(\omega)$  dépend non linéairement de 27 paramètres. Il a obtenu un bon ajustement mais ce modèle reste loin de décrire exactement l'absorption  $\varepsilon_2(\omega)$  dans la région du point critique  $E_0$ .

### **IV.2 MODELES DE CALCUL DE L'INDICE DE REFRACTION**

Pour le calcul de l'indice de réfraction  $n(\omega)$ , plusieurs modèles ont été établis.

#### **IV.2.1 MODELE DE MOSS**

L'indice de réfraction dans le modèle de Moss [59] est donnée par l'expression :

$$n = \left( \frac{K}{E_0} \right)^{1/4} \quad (\text{IV.4.})$$

où K est une valeur énergétique égale à 95 eV.

et  $E_0$  est l'énergie du matériau.

#### **IV.2.2 MODELE DE VANDAM ET HERVE (H.V)**

Dans ce modèle l'indice de réfraction est donnée par l'expression [60]

$$n = \left[ 1 + \frac{A}{(E_0 + B)} \right]^{1/2} \quad (\text{III.5})$$

où A et B sont des constantes énergétiques égaux respectivement à 13,6 eV et 3,4 eV., et  $E_0$  est l'énergie gap du matériau.

### IV.2.3 MODELE DE RAVINDRA

Dans ce modèle l'indice de réfraction est exprimé par la relation [60]:

$$n = \alpha + BE_0 \quad (IV.6)$$

où  $\alpha$  et B sont des constantes énergétiques égaux respectivement à 4,08 eV et -0,62 eV et  $E_0$  est le gap du matériau.

### IV.2.4 MODELE DE SELLMEIER

Dans ce modèle l'indice de réfraction est donné par l'expression [61] :

$$n(\chi) = \left[ A + B \frac{\chi^2}{\chi^2 - C} \right]^{1/2} \quad (IV.7)$$

où A, B et C sont des paramètres à ajuster,  $\chi$  est la longueur d'onde de la lumière dans le vide .

### IV.3 MODELES [PCBP]

Le modèle [PCBP] a été développé en premier lieu par Cardona [50] et Aspnes [51] , il donne une représentation exacte aux dérivées d'ordre supérieur de la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  que celles du premier ordre .

Il permet ainsi la détermination plus exacte des énergies des points critiques et des largeurs de raie, l'inconvénient réside dans la description mal de la fonction diélectrique et sa première dérivée par rapport à l'énergie du photon la température et la pression.

La fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  est donnée par l'expression approximative suivante :

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{8\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_j P_j^2 \int \frac{J_j(E)}{\hbar\omega - E + i\Gamma_j} dE \quad (\text{IV.8.})$$

où  $P_j$  est l'élément matriciel de l'opérateur impulsion.

Les dérivées de  $\varepsilon(\omega)$  peuvent être donnée avec l'approximation (PCBP) par l'expression :

$$\frac{d^4}{d\omega^4} [\omega^2 \varepsilon(\omega)] = \sum_j C_j \frac{e^{i\theta_j}}{(\hbar\omega - E_j + i\Gamma_j)^{1+4-0,5d_j}} \quad (\text{IV.9})$$

où

$C_j$  : une constante .

$d_j$  : dimension du point critique.

$\theta_j$  : angle de phase.

$$\theta_j = \frac{\pi}{2}(j - d_j) \quad (\text{IV.10})$$

## IV.4 MODELES COMBINES

### IV.4.1 MODELE DE LA FONCTION DIELECTRIQUE [M.F.D]

Ce modèle est basé sur les transitions interbandes, les parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique sont obtenues à partir des considérations purement analytiques utilisant les transformations (k.k), la densité d'état conjointe

$J_{cv}(E)$  est d'une importance capitale dans l'établissement du spectre optique de  $\varepsilon(\omega)$  aux points critiques.

Dans le modèle (MFD) la relation entre structure de bande et la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  est donnée par :

$$\varepsilon_2(E) = \sum_{s=1}^N \frac{4e^2 \hbar^2}{\pi(\mu^s)^2 E^2} |P_{cv}^s(E)|^2 J_{cv}^s(E) \quad (\text{IV.11})$$

Avec :

$J_{cv}^s(E)$ : La densité d'états conjointe du  $S^{ieme}$  point critique.

Pour un alliage semi-conducteur du groupe III-V cristallisant dans la structure zinc-blende, le comportement analytique de la fonction diélectrique  $\epsilon(\omega)$  est décrit par la combinaison de toutes les contributions des points critiques à chaque gap d'énergie (  $E_0, E_1, E_2, \dots$  ).

#### IV.5 MODELE DE SADAO ADACHI

Ce modèle est basé sur les transformations de Kramers- Kroning (kk) , la fonction diélectrique est élaborée pour chaque gap d'énergie , à savoir l'énergie  $E_0$  ,  $E_0 + \Delta_0$  ,  $E_1$  ,  $E_1 + \Delta_1$  et  $E_2$  d'une part et les gaps indirects de l'autre part [61][62].

##### Relations de Kramers et Kroning

Ces relations lient la partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique comme suit :

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (IV.12)$$

$$\epsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\epsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (IV.13)$$

#### IV.6 LES TRANSITIONS INTERBANDES

##### IV.6.1 LES TRANSITIONS $E_0$ ET $E_0 + \Delta_0$

Dans cette transition, le point critique est du type  $M_0$ , en supposant que les bandes d'énergies sont paraboliques la contribution des transitions des paires électron-trou libres à  $\epsilon_2(\omega)$  est exprimée par [52][63][64].

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{A}{(\hbar\omega)^2} \left[ (\hbar\omega - E_0)^{0,5} H(\chi_0 - 1) + \frac{1}{2} (\hbar\omega - E_0 - \Delta_0)^{0,5} H(\chi_{s,0} - 1) \right] \quad (IV.14)$$

La relation (k.k) permettent d'écrire :

$$\epsilon_1(\omega) = AE_0^{-1,5} \left[ f(\chi_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right)^{1,5} f(\chi_{s,0}) \right] \quad (IV.15)$$

avec :

$$A = \frac{4}{3} \left( \frac{3}{2} \mu_0 \right)^{1,5} p^2 .$$

$$f(\chi_0) = \chi_0^{-2} \left[ 2 - (1 - \chi_0)^{0,5} - (1 + \chi_0)^{0,5} \right] .$$

$$f(\chi_{s,0}) = \chi_{s,0}^{-2} \left[ 2 - (1 - \chi_{s,0})^{0,5} - (1 + \chi_{s,0})^{0,5} \right] .$$

Et :

$$\chi_0 = \frac{\hbar\omega + i\Gamma_0}{E_0}$$

$$\chi_{s,0} = \frac{\hbar\omega + i\Gamma_0}{E_0 + \Delta_0} .$$

$\Gamma$  : constante d'élargissement ;  $A$  : paramètre de force .

$$H(y) = \begin{cases} 1 & \text{pour } y \geq 0 \\ 0 & \text{pour } y < 0 \end{cases}$$

#### IV.6.2 LES TRANSITIONS $E_1$ ET $E_1 + \Delta_1$ [63][65]

Dans ces transitions le point critique est du type  $M_1$  donc à trois dimensions, la contribution de la transition  $E_1$  à  $\varepsilon_2(\omega)$  est donnée par l'expression approximative :

$$\varepsilon_2(\omega) = \pi \chi_1^{-2} \left[ B_1 - B_{11} (E_1 - \hbar\omega)^{0,5} \right] \quad (\hbar\omega \leq E_1) \quad (\text{IV.16a})$$

$$\varepsilon_2 = \left[ \pi B_1 \chi_1^{-2} \right] ; \quad (\hbar\omega \geq E_1) \quad (\text{IV.16b})$$

Pour la transition  $E_1 + \Delta_1$  on a :

$$\varepsilon_2(\omega) = \left( \pi \chi_{1s}^{-2} \left[ B_1 - B_{21} (E_1 + \Delta_1 - \hbar\omega)^{0,5} \right] \right) ; \quad (\hbar\omega \leq E_1 + \Delta_1) \quad (\text{IV.17a})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \left[ \pi B_2 \chi_{1s}^{-2} \right] ; \quad (\hbar\omega \geq E_1 + \Delta_1) \quad (\text{IV.17b})$$

avec :

$$\chi_1 = \frac{\hbar\omega}{E_1}$$

$$\chi_{1s} = \frac{\hbar\omega}{E_1 + \Delta_1}$$

Sachant que la masse effective longitudinale  $m_l$  du point critique  $M_1$  est plus grande que sa contrepartie transversale  $m_t$ , le cas à trois dimensions peut être ramener à deux dimensions, et l'expression de  $\varepsilon_2(\omega)$  devient :

$$\varepsilon_2(\omega) = \pi \left[ B_1 \chi_1^{-2} H(\chi_1 - 1) + B_2 \chi_{1s}^{-2} H(\chi_{1s}^{-2} - 1) \right] \quad (\text{IV.18.})$$

avec :

$$\begin{cases} H(z) = 1 & \text{pour } z \geq 0 \\ H(z) = 0 & \text{pour } z < 0 \end{cases}$$

L'expression de  $\varepsilon_1(\omega)$  est calculée en utilisant les transformations (k.k) , elle est donnée par :

$$\varepsilon_1(\omega) = -B\chi_1^{-2} \ln(1 - \chi_1^2) - B_2 \chi_{1s}^{-2} \ln(1 - \chi_{1s}^2) \quad (\text{IV.19})$$

En tenant compte de l'effet d'amortissement l'expression de  $\varepsilon_1(\omega)$  devient :

$$\varepsilon_1(\omega) = -B\chi_{1d}^{-2} \ln(1 - \chi_{1d}^2) - B_2 \chi_{1sd}^{-2} \ln(1 - \chi_{1sd}^2) \quad (\text{IV.20})$$

avec :

$$\chi_{1d} = \frac{\hbar\omega + i\Gamma_1}{E_1}$$

$$\chi_{1sd} = \frac{\hbar\omega + i\Gamma_1}{E_1 + \Delta_1}$$

### IV.6.3 LES TRANSITIONS $E_2$

Elles sont de nature complexes et correspondent à des points critiques qui ne sont pas bien définis, Adachi [52] les caractérise par le modèle de l'oscillateur harmonique Amorti (D.H.O ) les expressions de la partie réelle  $\varepsilon_1(\omega)$  et la partie imaginaire  $\varepsilon_2(\omega)$  de la fonction diélectrique sont données par :

$$\varepsilon_2(\omega) = C\chi_2^2\gamma / (1 - \chi_2^2)^2 + (\chi_2^2\gamma^2) \quad (\text{IV.21})$$

$$\varepsilon_1(\omega) = \frac{C(1 - \chi_2^2)}{(1 - \chi_2^2)^2 + \chi_2^2\gamma^2} + 1 \quad (\text{IV.22})$$

avec :

$$\chi_2 = \frac{\hbar\omega}{E_2}.$$

C : caractérise l'interaction entre l'oscillateur et le photon.

$\gamma$  : facteur d'amortissement.

#### IV.6.4 LES TRANSITIONS DES GAPS INDIRECTES

Les transitions indirectes des gaps d'énergies et tout comme les transitions directes influencent les relations de dispersion optiques des semi-conducteurs , les transitions optiques pour les gaps indirectes  $E_g^{ID}$  sont exprimées par une perturbation du second ordre .

La constante diélectrique  $\varepsilon_2(\omega)$ , et en tenant compte de la contribution des transitions indirectes est donnée par :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{D}{(\hbar\omega)^2} (\hbar\omega - E_g^{ID} \pm \hbar\omega_g)^2 H(1 - \chi_g) \quad (\text{IV.23})$$

avec :

$$\chi_g = \frac{E_g^{ID} \pm \hbar\omega_q}{\hbar\omega}.$$

D : paramètre de force.

$\hbar\omega_q$  : énergie du photon prenant part dans la transition indirecte.

Vu la nature parabolique des bandes qui s'étendent aux valeurs infinies de l'énergie, il est nécessaire de restreindre ce modèle en prenant une valeur critique de l'énergie qu'on note  $E_c$ , l'expression de  $\varepsilon_2(\omega)$  devient ainsi :

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{d}{(\hbar\omega)^2} (\hbar\omega - E_g^{ID} \pm \hbar\omega_q)^2 H(1 - \chi_g) H(1 - \chi_c) \quad (\text{IV.24})$$

avec :

$$\chi_c = \frac{\hbar\omega}{E_c}$$

En supposant que ‘‘D’’ est ind ependant de l’ nergie du photon et en appliquant les transformations k.k l’expression de  $\varepsilon_1(\omega)$  s’ critira :

$$\varepsilon_1(\omega) = \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ -\frac{(E_g^{ID})^2}{(\hbar\omega)^2} \ln\left(\frac{E_c}{E_g^{ID}}\right) + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E_g^{ID}}{\hbar\omega}\right) \ln\left(\frac{\hbar\omega + E_c}{\hbar\omega + E_g^{ID}}\right) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_g^{ID}}{\hbar\omega}\right) \ln\left(\frac{\hbar\omega - E_c}{\hbar\omega - E_g^{ID}}\right) \right\} \quad (\text{IV.25})$$

En introduisant l’effet d’amortissement la contribution des transitions indirectes dans  $\varepsilon(\omega)$  est donn ee par :

$$\varepsilon(\omega) = \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \begin{array}{l} -\frac{(E_g^{ID})^2}{(\hbar\omega + i\Gamma)^2} \ln\left(\frac{E_c}{E_g^{ID}}\right) + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E_g^{ID}}{\hbar\omega + i\Gamma}\right) \ln\left(\frac{\hbar\omega + i\Gamma + E_c}{\hbar\omega + i\Gamma + E_g^{ID}}\right) \\ + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_g^{ID}}{\hbar\omega + i\Gamma}\right) \ln\left(\frac{\hbar\omega + i\Gamma - E_c}{\hbar\omega + i\Gamma - E_g^{ID}}\right) \end{array} \right\} \quad (\text{IV.26}).$$

L’indice de r efraction ‘‘n’’ dans ce mod ele est donn e par l’expression :

$$n(\omega) = \left[ A \left[ f(\chi) + \frac{1}{2} \left( \frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right) f(\chi_{g_0}) \right] + B \right]^{0,5} \quad (\text{IV.27})$$

o u le premier terme repr esente la contribution des paires  lectron-Trou et des excitons apparaissant lors des transitions  $E_0$  et  $E_0 + \Delta_0$ . [54][66].

A : param etre relative aux transitions  $E_0$  et  $E_0 + \Delta_0$ .

B : param etre qui caract erise la contribution non dispersive des transitions de hautes  nergies.

## IV.7 EFFET EXCITONIQUE ET TRANSITIONS INTERBANDE

### INTRODUCTION :

L'état fondamental d'un semi-conducteur correspond à la situation où la bande de valence est pleine et la bande de conduction entièrement vide. Alors le premier état excité correspond donc à un électron dans le bas de la bande de valence.

Dans l'espace réel on a créé une paire électron-trou dans un état non lié, d'où l'absorption d'un photon d'énergie  $\hbar\omega = E_g$ .

Vu la nature des échanges de l'électron et le trou une attraction de nature coulombienne se manifeste et on conçoit qu'il puisse exister un état lié entre l'électron et le trou dont l'énergie est plus faible que celle de la paire électron-trou dissociée.

L'énergie de liaison de cette paire électron-trou qui constitue l'exciton est obtenue en résolvant un problème à deux particules chargées de type "Atome d'hydrogène" où les masses considérées sont des masses effectives  $m_e$ ,  $m_t$  et dont la constante diélectrique du milieu doit intervenir.

Dans le mouvement autour du centre de gravité, la masse réduite est à considérer.

$$m_r^{-1} = m_e^{-1} + m_t^{-1}.$$

L'énergie de liaison est :

$$E_{\text{exc}} = -\frac{m_r}{m_0} \frac{1}{\epsilon_r^2} \frac{E_1}{n^2} \quad (\text{IV.28}).$$

avec :

$$E_1 = -13,6 \text{ eV.}$$

$m_0$  = masse de l'électron libre.

A cette énergie excitonique s'ajoute l'énergie cinétique du centre de masse ( $m_e + m_t$ ) et par conséquent la plus basse énergie d'excitation optique sera :

$$\hbar\omega = E_g + E_{exc}.$$

Les états excitoniques existe pour chaque point critique grâce à l'interaction presque coulombienne des électrons et des trous, les effets excitoniques sur les spectres optiques des semi-conducteurs ont été l'objet de plusieurs études théoriques [68][69].

La contribution des transitions excitoniques dans  $\varepsilon(\omega)$  au bord direct  $E_0$  de la bande est présentée comme suit

les séries discrètes des raies excitoniques au gap  $E_0$  sont données par la forme Lorentzienne suivante :

$$\varepsilon(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{OX}^n (E_0 + E_{XO}^n - \hbar\omega - i\Gamma_0)^{-1} \quad (\text{IV.29})$$

$$E_{XO}^n = \frac{G^{3D}}{n^2} \quad (\text{IV.30})$$

Avec :

$A_{OX}^n$  : paramètre de force excitonique.

$A_{XO}^n$  : Energie excitonique.

$G^{3D}$  : Energie de Rydberg excitonique à (3D) .

Le paramètre  $A_{OX}^n$  de l'exciton type Wannier à (3D) est proportionnel à la fonction du  $n^{\text{ieme}}$  exciton on a :

$$|\phi_n^{3D}(0)|^2 = \frac{V_0}{\pi(a_B^{3D})^3 n^3} \quad (\text{IV.31})$$

avec :

$V_0$  : Volume de la maille élémentaire.

$a_B^{3D}$  : rayon de Bohr de l'exciton 3D.

Dans le cas des transitions  $E_1$  et  $E_1 + \Delta_1$ , les effets excitoniques dans la région spectrale  $E_1/E_1 + \Delta_1$  sont étudiés soit par :

- L'approximation de la masse effective (ME) [70][71].

soit par :

- La méthode de Koster-Slater (KS) [72][73].

dans le cas des points critiques (3D ) et à la limite  $m_L^{-1} \approx 0$  l'équation (ME) donne des séries d'excitons de type (2D) Wannier [ 71] . on a :

$$E_{X1}^n(E_{X\Delta}^n) = -\frac{G^{2D}}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} \quad (IV.32)$$

$$|\phi_n^{2D}(0)|^2 = \frac{16V_0}{\pi(a_B^{2D})^3(2n-1)^3} \quad (IV.33)$$

avec :

$E_{X1}^n(E_{X\Delta}^n)$  : énergie excitonique.

$|\phi_n^{2D}(0)|$  : fonction enveloppe du n<sup>ieme</sup> exciton.

La contribution des transitions 2D- excitons dans la fonction diélectrique est donnée par :

$$\varepsilon(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ B_{1X}^n (E_1 + E_{1X}^n - \hbar\omega - i\Gamma_1)^{-1} + B_{2X}^n (E_1 + \Delta_1 + E_{X\Delta}^n - \hbar\omega - i\Gamma)^{-1} \right] \quad (IV.34)$$

avec :

$B_{1X}^n, B_{2X}^n$  : paramètres de force excitonique.

Le terme excitonique 2D pour  $n = 1$  , contient 95 % de la force totale de l'oscillateur , Adachi [52] néglige les termes des états excités ( $n \geq 0$  ) . Il suppose aussi que  $E_{X1}^n = E_{X\Delta}^n = 0$ .

Dans la méthode de Koster- Slater (KS) l'interaction électron-trou (interaction colombienne ) est estimée par l'approximation des liaisons fortes, une expression approximation de la fonction diélectrique  $\varepsilon(\omega)$  fondée sue ce modèle et donnée par [67] .

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\tilde{\varepsilon}(\omega) - 1}{1 - g[\tilde{\varepsilon}(\omega) - 1]} \quad g > 0 \quad (IV.35)$$

avec :

$\tilde{\varepsilon}$  : fonction diélectrique d'un seul électron.

$g$  : paramètre proportionnel à la profondeur du potentiel (puits carré).

Une fois que les contributions des différentes transitions sont calculées, la fonction diélectrique d'un composé donné est obtenue par la sommation des différentes parties.

## IV.8 FONCTION D'ELARGISSEMENT

L'introduction de la fonction d'élargissement presque , Gaussien dans le modèle récent de la fonction diélectrique optique d'Adachi et Ozaki [47] , permet de décrire exactement l'absorption et la dispersion pour les composés III.V précisément dans la région du point critique E0 ou le même modèle avec l'élargissement Lorentzien est inexact .

### IV.8.1 EFFET DE LA FONCTION D'ELARGISSEMENT

Pour montrer l'effet de la fonction d'élargissement, on présente le formalisme de la fonction diélectrique pour un volume du solide en l'absence de l'élargissement de raie, et sa généralisation en tenant compte de cet élargissement avec l'approximation Lorentzien ou Gaussienne.

Dans l'absence de l'élargissement de raie, la fonction diélectrique longitudinale est donnée par l'expression [58] .

$$\varepsilon_1(\omega g) = 1 - \lim_{g \rightarrow 0} \frac{8\pi e^2}{g^2 \Omega_{\text{Clk}}} \sum_{\mathbf{V}, \mathbf{K}_1} \sum_{\mathbf{V}, \mathbf{K}'} \langle \mathbf{C}, \mathbf{K} | \mathbf{V}, \mathbf{K}' \rangle \left| \left( \frac{\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}+\mathbf{q}}}{\hbar\omega - E_{\mathbf{C}(\mathbf{k})} + E_{\mathbf{V}(\mathbf{k})} + i\eta} - \frac{\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}-\mathbf{q}}}{\hbar\omega + E_{\mathbf{C}(\mathbf{k})} - E_{\mathbf{V}(\mathbf{k})} + i\eta} \right) \right|^2 \quad (\text{IV.36})$$

avec :

$$\langle \mathbf{C}, \mathbf{K} | \mathbf{V}, \mathbf{K}' \rangle = \frac{1}{\Delta_{\text{Maille é le}}} \int d\mathbf{r} \mathbf{u}_{\mathbf{C}\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{V}\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.37}).$$

$\Omega_1$  : volume du solide.

$\Delta$  : volume de maille élémentaire.

$u_{cK}(\mathbf{r}), u_{vK'}(\mathbf{r})$  : parties périodiques des fonctions de Bloch dans (Bc) et (Bv).

$K, K'$  : Vecteurs de la première zone de Brillouin.

$\eta$  : infinitésimal positif.

La théorie des perturbations pour  $q$  petit donne :

$$\left| \langle C, K | V, K' \rangle \right|^2 = \left| \langle C, K | V, K \pm q \rangle \right|^2 = \left( \frac{\hbar q P_{cV}(K)}{m E_{cV}(k)} \right)^2 \quad (IV.38)$$

ou :

$$E_{cV}(K) = E_c(K) - E_v(K).$$

$$P_{cV}(K) = \frac{1}{\Delta} \left| \int \eta_{cK}^*(\mathbf{r}) P_\mu U_{vK}(\mathbf{r}) d^3r \right|.$$

avec :

$m$  : masse de l'électron.

$P_\mu$  : composante de l'opérateur impulsion dans la direction de  $\varphi$ .

En substituant l'équation (IV.38) dans l'équation (IV.36) on aura :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{8\pi\hbar^2 \cdot e^2}{m^2} \sum_{K \in C_{cV}} \left( \frac{P_{cV}(K)}{E_{cV}(K)} \right)^2 \frac{1}{\hbar\omega - E_{cV}(K) + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E_{cV}(K) + i\eta} \quad (IV.39)$$

qui peut s'écrire sous la forme :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{8\pi\hbar^2 \cdot e^2}{m^2} \sum_{K \in C_{cV}} \left( \frac{P_{cV}(K)}{E_{cV}(K)} \right)^2 \left( \int_0^\infty ds e^{i(\hbar\omega - E_{cV}(K) + i\eta)s} \right) - \int_0^\infty ds e^{i(\hbar\omega + E_{cV}(K) + i\eta)s} \quad (IV.40)$$

L'expression découlant directement du formalisme de Green

Une intégration de l'équation (IV.) sur l'énergie  $E - E_{cV}(K)$  et en introduisant la densité d'état conjointe  $J_{cV}(E)$  donne :

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{8\pi\hbar^2 \cdot e^2}{m^2} \sum_{cV} \int J_{cV}(E) dE \left( \frac{P_{cV}(E)}{E} \right)^2 \left( \int_0^\infty ds e^{i(\hbar\omega - E + i\eta)s} \right) - \int_0^\infty ds e^{i(\hbar\omega + E + i\eta)s} \quad (IV.41)$$

En remplaçant l'infinésimal  $\eta$  par une fonction d'amortissement  $\delta(S)$  on aura :

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{8\pi\hbar^2 \cdot e^2}{m^2} \sum_{CV} \int J_{CV}(E) dE \left( \frac{P_{CV}(E)}{E} \right)^2 \left( \int_0^{\infty} ds e^{i(\hbar\omega - E + i\eta(S))S} - \int_0^{\infty} ds e^{i(\hbar\omega + E + i\delta(S))S} \right) \quad (IV.42)$$

Un développement de la fonction  $\gamma(S)$  en série de puissance en  $s = \frac{t}{\hbar}$  et en se limitant à deux termes on aura :

$$\gamma(S) = \Gamma + 2\sigma^2 \cdot s \quad (IV.43)$$

Pour des raisons de simplicité on pose :

$$\gamma(S) = \Gamma. \quad (IV.44)$$

La fonction d'élargissement dans cette approximation est donnée par :

$$\phi_L(\hbar\omega \pm E) = -i \int_0^{\infty} ds e^{i(\hbar\omega \mp E + i\Gamma)S} \quad (IV.45)$$

où l'intégration diélectrique optique sera :

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{8\pi\hbar^2 \cdot e^2}{m^2} \sum_{C_{10}V} \int J_{CV}(E) dE \left( \frac{P_{CV}(E)}{E} \right)^2 \left( \frac{1}{\hbar\omega - E + i\Gamma} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\Gamma} \right) \quad (IV.46)$$

Dans le cas où l'élargissement est causée par la diffusion électron-photon [75] ou la diffusion électron-impuretés [76][77] une meilleur approximation de  $\delta(s)$  est une fonction linéaire du temps  $\delta(S) = \partial^2 s$ . Cette approximation conduit à la fonction d'élargissement Gaussien donnée par :

$$\phi_G(\hbar\omega \mp E) = -i \int_0^{\infty} ds e^{i(\hbar\omega \mp E + 2i\partial^2 S)s} \quad (IV.47)$$

où l'intégration donne :

$$\phi_G(\hbar\omega \pm E) = -i \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} e^{-\frac{(\hbar\omega \pm E)^2}{4\sigma^2}} \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(i \frac{\hbar\omega \pm E}{2\sigma}\right) \right] \quad (\text{IV.48})$$

La figure (IV.1) ci-dessous montre la comparaison des fonctions d'élargissement.

En conséquence, les modèles fondés à la base de la fonction d'élargissement Laurentzien présentent une absorption excessive au voisinage du gap fondamentale.

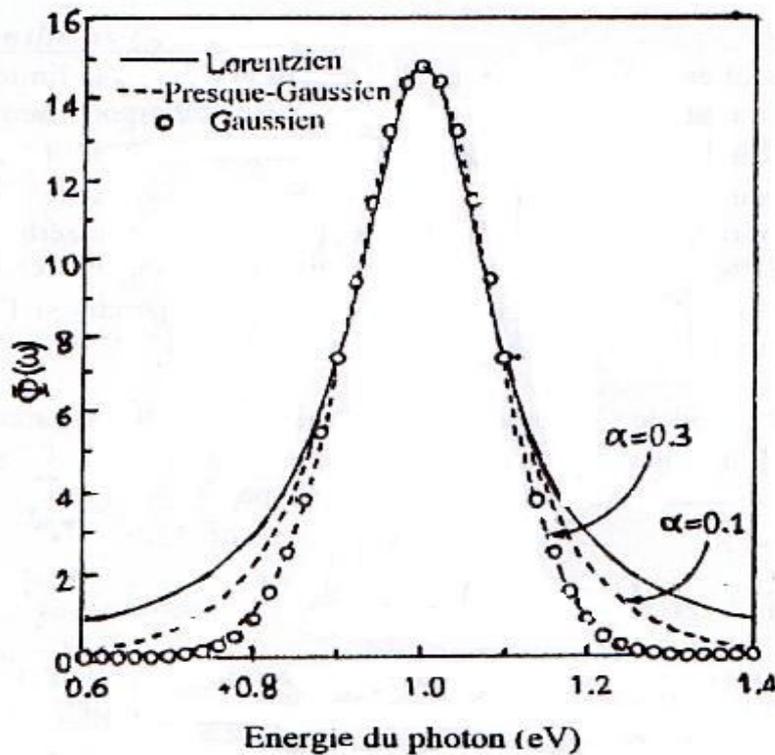


Figure (IV-1) : Elargissement Laurentzien, Gaussien et presque Gaussien[75]

## INTRODUCTION :

Après avoir faire une étude théorique générale sur les alliages semi-conducteurs quaternaires leur classification, modélisation et leurs propriétés électroniques et optiques, on s'intéresse dans ce chapitre à la structure électronique, en calculant les structures de bandes électroniques et les densités de charges sous conditions normales d'une part et de l'autre part aux propriétés optiques et plus particulièrement l'indice de réfraction pour l'alliage quaternaire Ga In As Sb et ces constituants.

## V ETUDE DE L'ALLIAGE QUATERNAIRE Ga In As Sb

Ce matériau est un alliage semi-conducteur de type (III-V) d'une solution quadratique ou les anions et les cations sont combinés. Cet alliage peut être réalisé à l'aide de l'une des techniques de croissance épitaxiales (voir chapitre N°1) ou la constante du réseau est un paramètre très important, on cherche toujours à avoir un très bon accord de maille.

Le paramètre du réseau de notre alliage est estimé de la loi de Végard, il est fonction linéaire des paramètres des réseaux des constituants binaires et des compositions  $x, y$ .

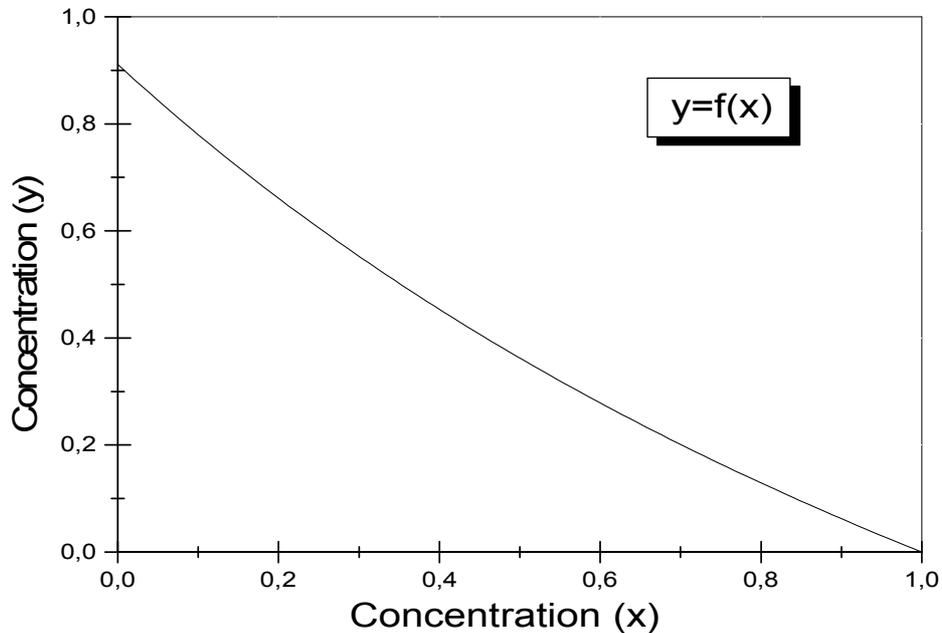
$$a(x,y) = xy a(\text{GaAs}) + x(1-y) a(\text{GaSb}) + (1-x)y a(\text{InAs}) + (1-x)(1-y) a(\text{InSb})$$

La croissance épitaxiale de l'alliage Ga In As Sb est réalisée sur substrat GaSb. Elle dépend aussi des coefficients stœchiométriques  $x, y$ . En se basant sur la loi de Vegard, la relation d'adaptation des compositions  $x, y$  pour le  $\text{Ga}_x \text{In}_{1-x} \text{As}_y \text{Sb}_{1-y} / \text{GaSb}$  est donnée par :

$$y = \frac{0.3835 - 0.3835 x}{0.4210 + 0.216 x} \quad (V.1)$$

avec :  $(0 \leq x \leq 1)$

La figure (V-1) représente la variation de la concentration  $x$  en fonction de la concentration  $y$



**Figure (V-1) : variation de la concentration  $y=f(x)$**

L'étude des propriétés de l'alliage Ga In As Sb est faite dans la zone de Brillouin, et sachant que l'alliage en question cristallise en une structure zincblende ou on a dans cet espace réduit du réseau réciproque des points de haute symétrie joints par des lignes de haute symétrie, on cite le point  $\Gamma$  centre de la zone de Brillouin, le point  $X$  centre d'une face carrée de la zone et le point  $L$  centre d'une face hexagonale.

Les lignes de haute symétrie correspondant à ces points sont :

$\Delta(1.1.0)$  : reliant les points  $\Gamma$  et  $X$

$\Lambda(1.1.1)$  : reliant les points  $\Gamma$  et  $L$

L'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage GaInAsSb est basée sur celles de ces éléments parents, les données concernant ces éléments et prenant part dans nos calculs sont :

**GaAs :**

Paramètre du réseau A(u.A)	Facteurs de forme Symétriques	Facteurs de forme anti-symétriques
10.6827	-0.2662	0.0146
	0.0140	0.0380
	0.0643	0.0010

**Tableau (V-1)**

**InAs :**

Paramètre du réseau A(u.A)	Facteurs de forme Symétriques	Facteurs de forme anti-symétriques
11.448116	-0.2116	0.0492
	0.0000	0.0450
	0.0457	0.0100

**Tableau (V-2)**

**GaSb :**

Paramètre du réseau A (u.A)	Facteurs de forme Symétriques	Facteurs de forme anti-symétriques
11.565281	-0.1911	0.0454
	0.0050	0.0300
	0.0434	0.0000

**Tableau (V-3)**

**InSb :**

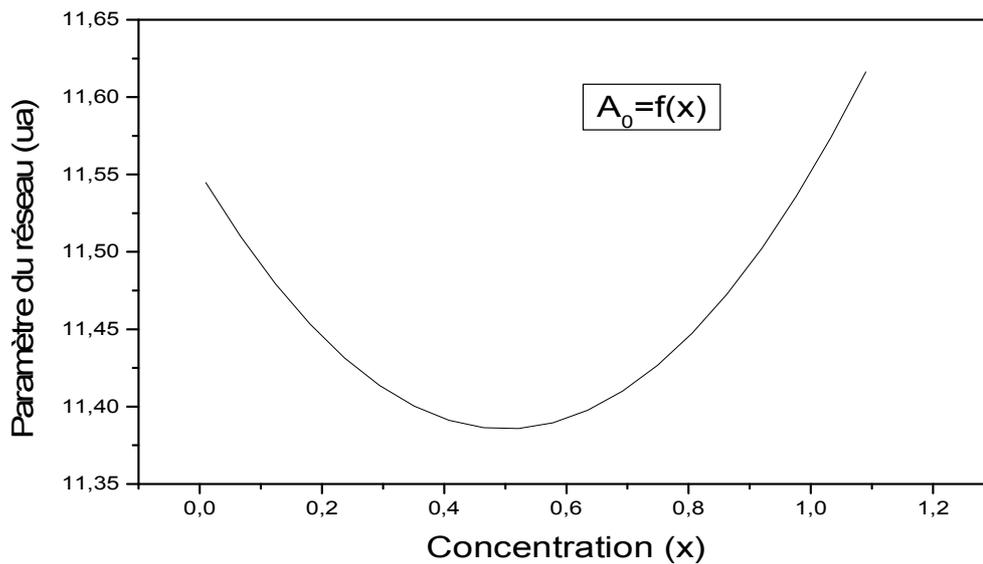
Paramètre du réseau A(u.A)	Facteurs de forme <i>Symétriques</i>	Facteurs de forme anti-symétriques
12.2437024	-0.2032	0.0601
	0.0100	0.0300
	0.0294	0.0150

**Tableau (V-4)**

**TABLEAUX (V-1,2,3,4) : Facteurs de forme ajustés des éléments parents**

**Les facteurs de forme ont été ajustés par la méthode des moindres carrés itérative non linéaire qui nécessite la connaissance des gaps d'énergie expérimentaux des constituants binaires.**

La figure (V-2) montre la variation du paramètre du réseau en fonction de la concentration x de l'alliage quaternaire ajusté sur le substrat.



**Figure (V-2) : variation du paramètre du réseau en fonction de la concentration (x)**

**La comparaison des paramètres des réseaux du substrat et celui de l'alliage montre le bon accord de maille.**

## V.1 PROPRIETES ELECTRONIQUES DE L'ALLIAGE Ga In As Sb

Ce matériau est un alliage semi-conducteur quaternaire d'une solution quadratique ou les constituants binaires sont : GaAs, GaSb, InAs, InSb.

L'étude des propriétés électroniques de l'alliage traite indispensablement les structures de bandes électroniques, la densité de charge et la densité d'états des éléments parents et de l'alliage ainsi formé d'une part et de l'alliage ajusté sur le substrat de l'autre part.

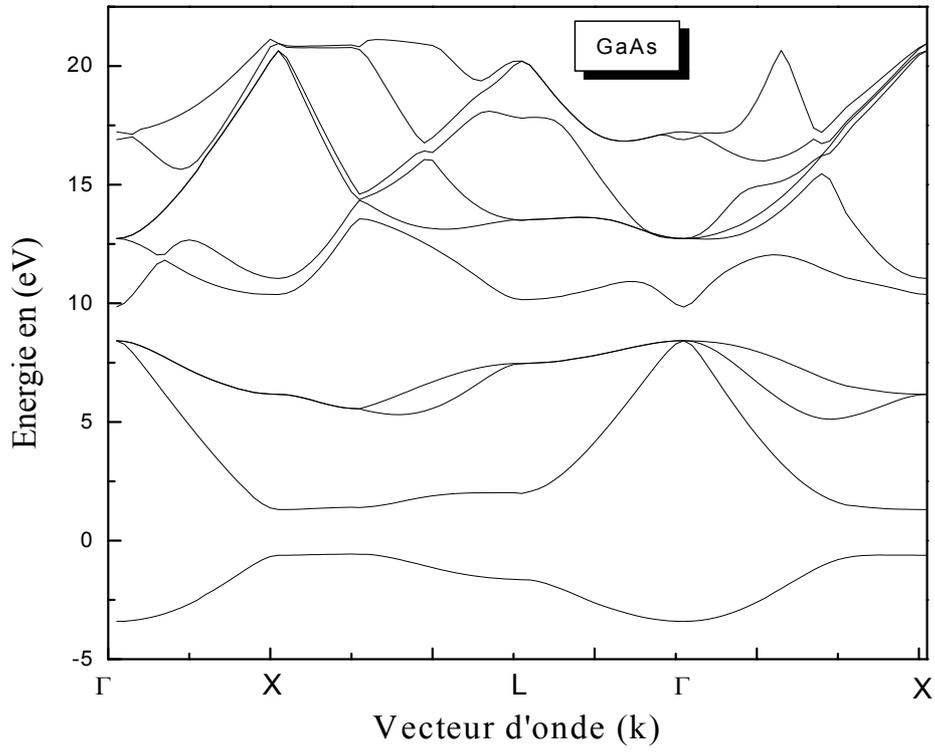
### V.1.1 STRUCTURE DE BANDES DES ELEMENTS PARENTS

#### V.1.1.a STRUCTURE DE BANDE DU GaAs

**Le GaAs est un composé (III-V) ayant une structure zincblende, son paramètre de réseau est de (10.68 u.a). Sa structure de bande électronique est donnée par la figure (V-3).**

On remarque qu'il s'agit d'un semi-conducteur à gap direct au point Gamma, la valeur de l'énergie gap est de 1.42 eV.

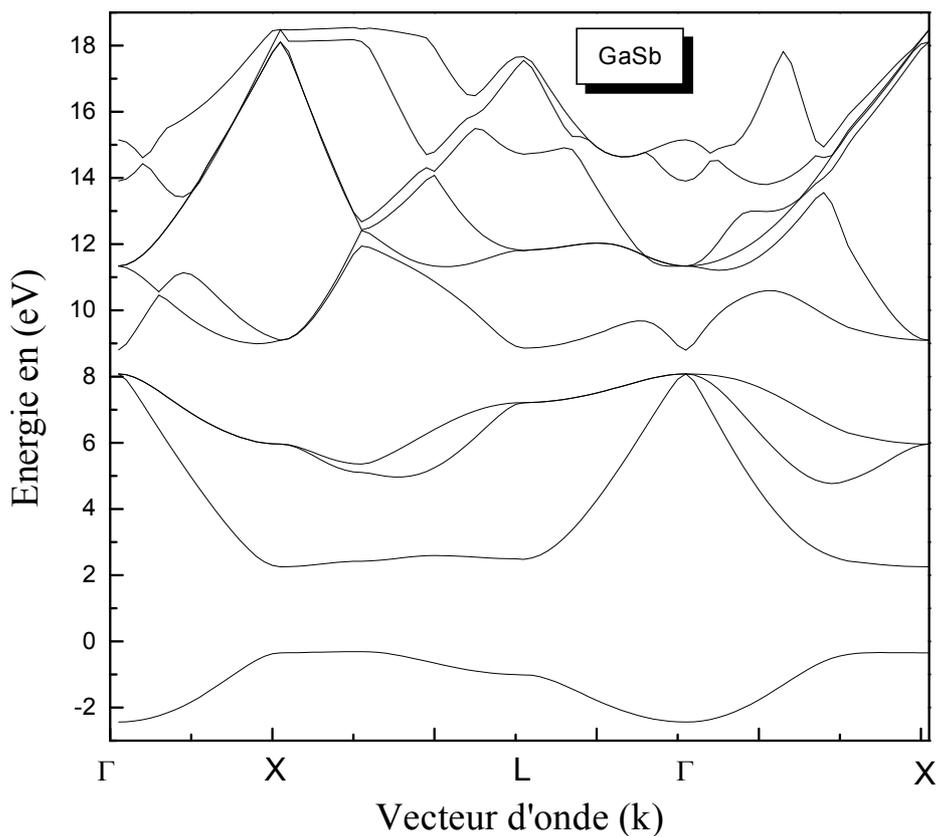
Les gaps sont indirects aux points X et L leurs valeurs sont 1.95eV et 1.73eV respectivement.(voir tableau V-5)



**Figure (V-3) : structure de bandes électroniques du GaAs**

### V.1.1.b STRUCTURE DE BANDE DU GaSb

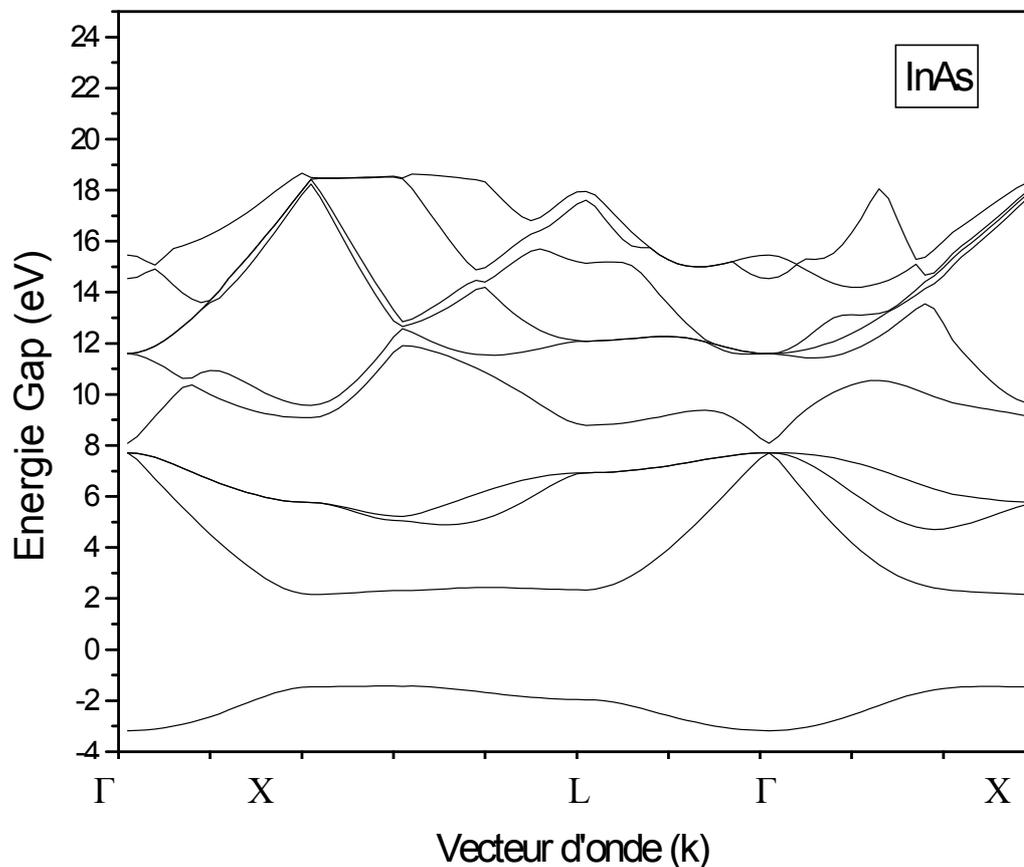
Le GaSb est de sa part un composé (III-V) cristallisant dans une structure zincblende, son paramètre de réseau est de 11.56 u a. La figure (V-4) illustre sa structure de bande électronique, il est à gap direct au point Gamma, l'énergie gap est de 0.71eV. Les gaps sont indirects aux points X et L et prennent respectivement les valeurs 1.87eV et 0.77eV. (voir tableau V-5)



**Figure (V-4) : structure de bandes électroniques du GaSb**

### V.1.1.c STRUCTURE DE BANDE DE L'InAs

L'InAs est un composé (III-V) qui cristallise dans la structure zincblende, son paramètre de réseau vaut 11.44 ua . Sa structure de bande est donnée par la figure (V-5) . Le gap est direct au point Gamma sa valeur est 0.36ev, il est indirect aux points X et L , les gaps ainsi correspondants sont respectivement 1.37ev et 1.02ev .(voir tableau V-5)

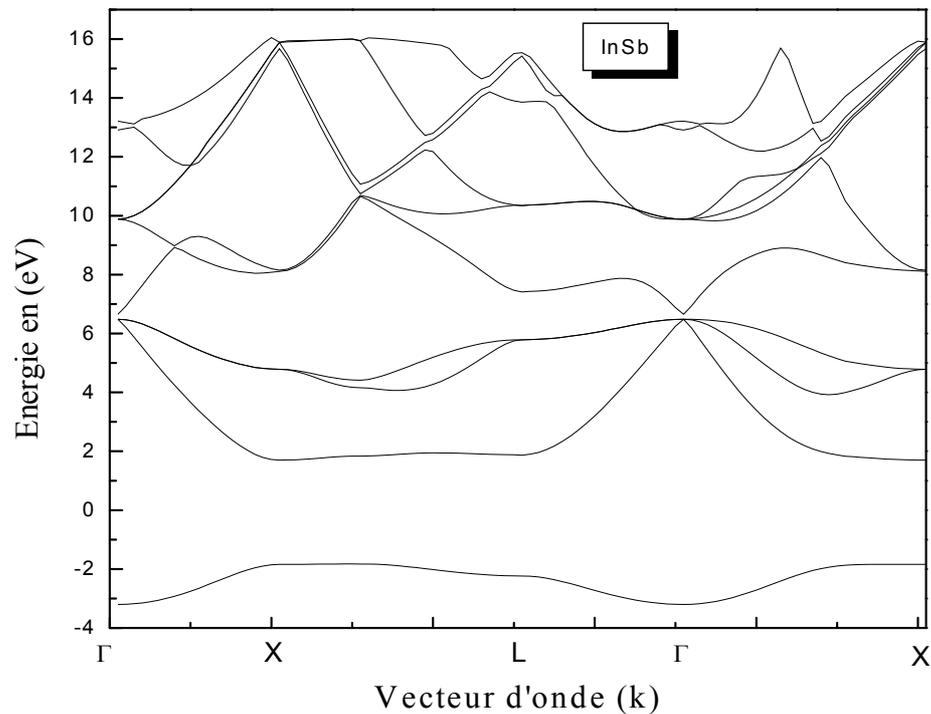


**Figure (V-5) : structure de bandes électroniques de l'InAs**

### V.1.1.d STRUCTURE DE BANDE DE L'InSb

Il s'agit d'un semi-conducteur (III-V) de structure cristalline zincblende, le paramètre de réseau est de 12.24 ua, sa structure de bande est

illustrée dans la figure (V-6), qui montre clairement que l'InSb est à gaps direct au point Gamma et la valeur du gap est de 0.17ev. Le gap de ce matériau est indirect aux points X et L . Les gaps indirects dans ces points sont respectivement 1.63ev et 0.96ev (voir tableau V-5)



**Figure (V-6) : structure de bandes électroniques de l'InSb**

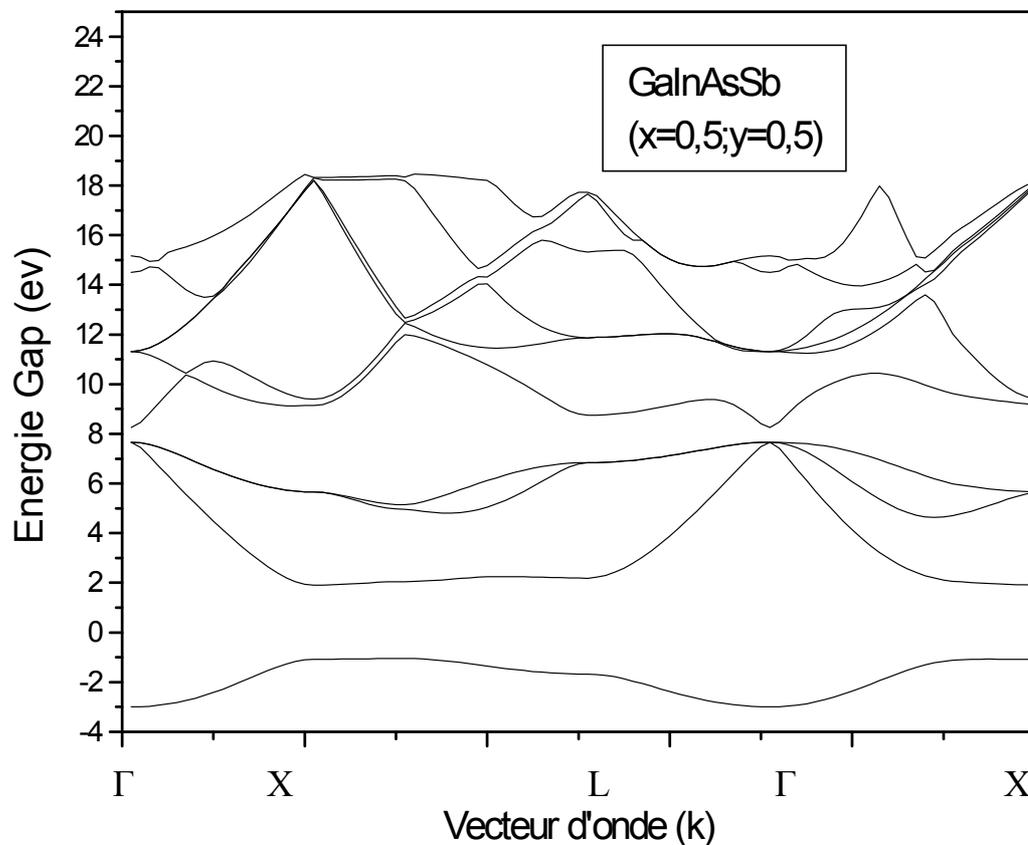
### **Conclusion :**

On constate que les structures de bandes électroniques des quatre constituants binaires de notre alliage se ressemblent du point de vue qualitative. Ils sont à gap direct au point Gamma et indirect aux points X et L , la différence est quantitative, les gaps directs et indirects diffèrent d'un élément à l'autre.

### V.1.1.e STRUCTURE DE BANDE DE L'ALLIAGE GaInAsSb(x=0.5,y=0.5)

L'alliage ainsi formé des quatre éléments binaires précédents est un quaternaire qui se cristallise dans la structure zincblende, le paramètre de réseau pour une concentration (x=0.5, y=0.5) est de (11.48u.a). La figure (V-7) donne la structure de bande de cet alliage.

Il est à gap direct au point Gamma de valeur 0.59ev et à gaps indirects aux points X et L de valeurs 1.48ev et 1.08ev respectivement.



**Figure (V-7) : structure de bandes électroniques du GaInAsSb pour une concentration (x=0,5 ; y=0,5)**

## CONCLUSION :

**De même, l'alliage quaternaire possède une structure de bande similaire à ceux des éléments parents du point de vue qualitative mais l'énergie gap est différente.**

### V.1.1.f STRUCTURE DE BANDE GaInAsSb/GaSb

Cet alliage présente un intérêt capital dans le domaine de la réalisation des dispositifs opto-électroniques grâce à ces différentes applications.

L'étude est faite pour différentes concentrations. cela est du à l'importance technologique accordé à ce matériau dans les derniers temps.

Les structures de bande de cet alliage pour différentes concentrations restent similaires qualitativement au moment où le gap direct varie de 0,40 (ev) à 0,71(ev) ce qui correspond à des longueurs d'ondes allant de 1.74 jusqu'à 3.1  $\mu$  m.

La structure de bande est représentée dans la figure (V-8) pour une concentration ( $x=0,5$  et  $y=0,6$ ) où le gap direct a pour valeur 0,63(ev).

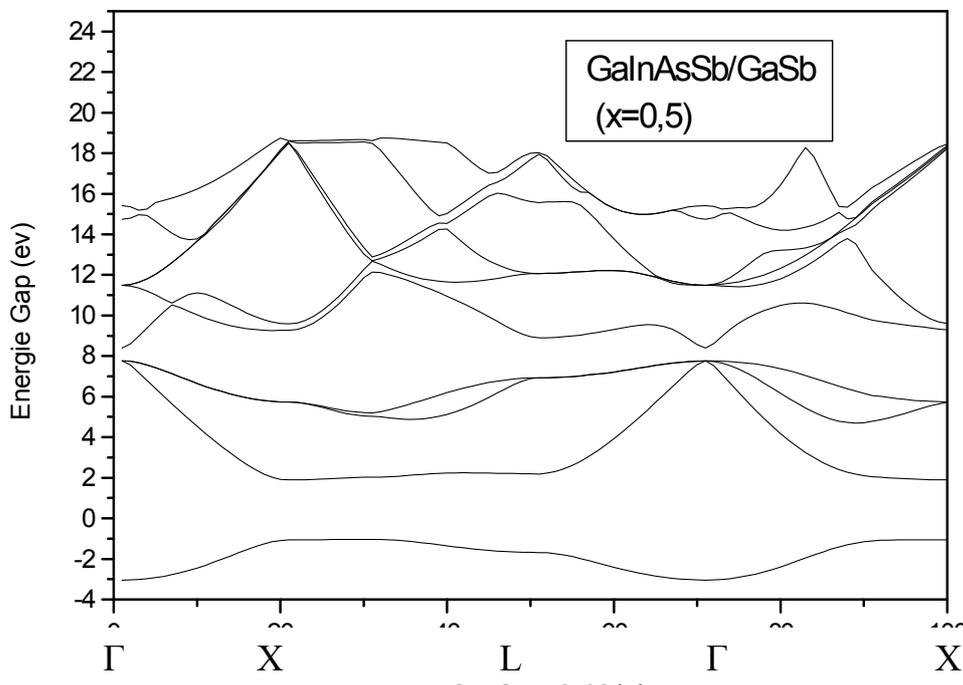


Figure (V-8): structure de bandes électroniques du GaInAsSb/GaSb

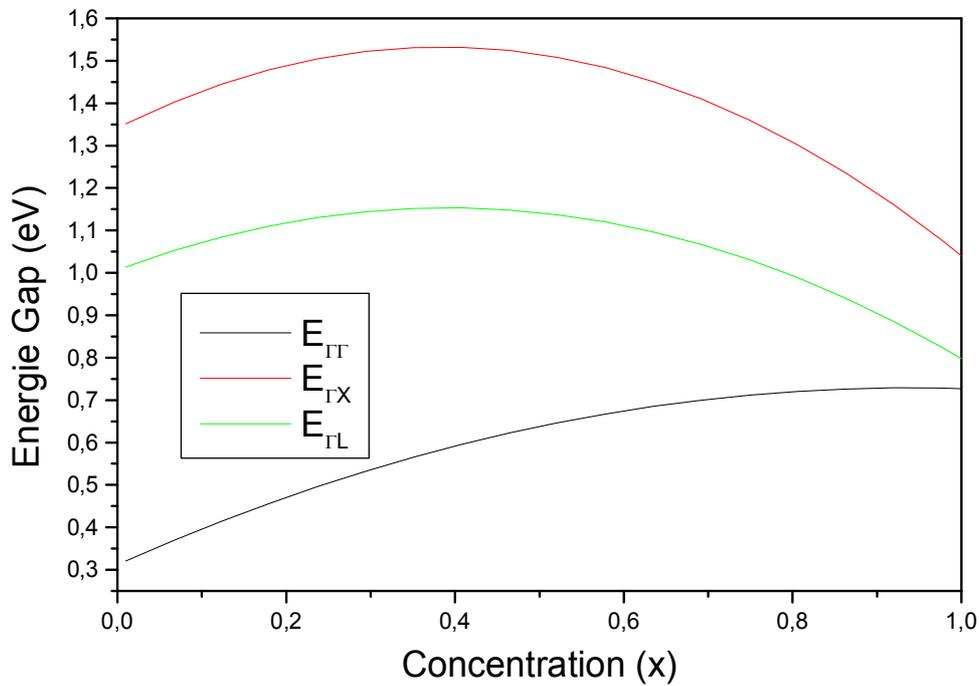
## V.1.2 VARIATION DE L'ENERGIE GAP DE L'ALLIAGE SUR SUBSTRAT EN FONCTION DE LA CONCENTRATION

La variation de l'énergie gap de l'alliage GaInAsSb/GaSb est étudiée en fonction de la concentration, le tableau (V-5) donne les valeurs des énergies gaps aux points Gamma, X et L pour chaque concentration.

Concentration (x)	$E_{\Gamma\Gamma}$ (ev)	$E_{\Gamma X}$ (ev)	$E_{\Gamma L}$ (ev)
0.1	0.40617	1.45053	1.08893
0.2	0.46816	1.48302	1.11369
0.3	0.52762	1.50505	1.13123
0.4	0.58329	1.51380	1.13933
0.5	0.63359	1.50581	1.13517
0.6	0.67652	1.47668	1.11530
0.7	0.70960	1.42090	1.07543
0.8	0.72980	1.33153	1.01034
0.9	0.73333	1.19973	0.91364
1.0	0.71538	1.01374	0.77788

Tableau (V-5) : Energies gaps aux points  $\Gamma$ , X, L

**Les courbes représentant les variations des énergies gaps  $E_{\Gamma\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma X}$ ,  $E_{\Gamma L}$  en fonction de la concentration x sont données dans la figure (V-9).**



**Fig(V-9) : Variation de l'énergie gap aux points  $\Gamma$ , X, L**

Une interpolation polynomiale quadratique des valeurs des énergies gaps données dans le tableau (V-5), donne les équations :

$$E_{\Gamma\Gamma} : 0.3122 + 0.8864 X - 0.4713 X^2$$

$$E_{\Gamma X} : 1.3414 + 0.9951 X - 1.2952 X^2$$

$$E_{\Gamma L} : 1.0027 + 0.7511 X - 0.9591 X^2$$

On constate qu'il y a une augmentation de l'énergie gap  $E_{\Gamma\Gamma}$  en fonction de la croissance de la concentration  $x$ , alors que les gaps d'énergies  $E_{\Gamma X}$  et  $E_{\Gamma L}$  passent par des maximums.

### REMARQUE :

Le matériau  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/GaSb$  reste à gap direct pour toute concentration, ce qui permet de l'utiliser comme un matériau émetteur de la lumière (LED, diode Lazer,...).

### V.1.3 LA DENSITE DE CHARGES ELECTRONIQUE

Le calcul de la densité de charges se base sur celui des fonctions d'ondes, la structure de bande détermine les propriétés électroniques d'un matériau, mais l'évaluation de la densité de charges électronique qui est une distribution des électrons dans un volume bien défini lors de la formation d'une liaison (hybridation de deux orbitales) est aussi très importante.

Cette hybridation qui est une combinaison des fonctions d'ondes des atomes 1 et 2 peut avoir deux formes différentes :

1. Liante ( $\Psi_1 + \Psi_2$ ).
2. Antiliante ( $\Psi_1 - \Psi_2$ ).

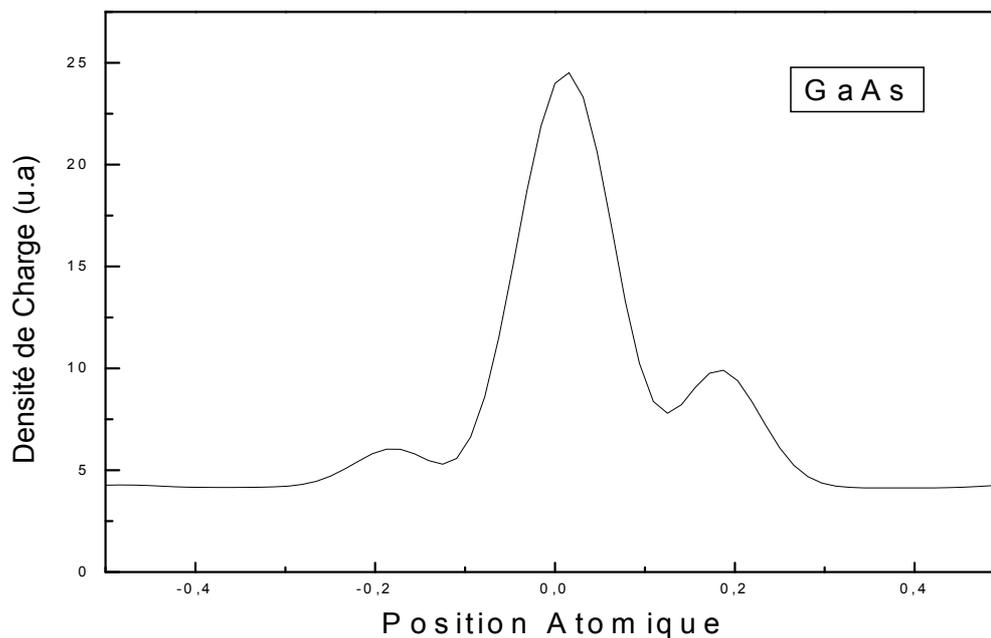
Où  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  sont les fonctions d'ondes des atomes 1 et 2 respectivement, d'une manière générale les liaisons liantes ont une symétrie sphérique, alors que les liaisons antiliantes possèdent une symétrie elliptique. Le caractère de la liaison est à l'origine de la cohésion de tout matériau.

Le calcul de la densité de charges électronique qui est fait généralement dans un plan et selon une direction nous informe de la nature de la liaison dans le matériau à savoir l'ionocité est la covalonicité.

Vu l'importance de la connaissance de la nature de la liaison dans le matériau, la densité de charges électronique a été calculée pour les quatre éléments parents et pour l'alliage  $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{As}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$  et pour l'alliage ajusté sur le substrat GaSb.

### V.1.3.a DENSITE DE CHARGES DU GaAs

**La figure (V-10) représente la densité de charges électronique du GaAs ou le maximum de la densité de charges est situé presque au milieu des deux atomes 1 et 2 ce qui indique que la liaison présente un caractère covalent et ionique à la fois. Le facteur ionique de l'échelle de phillips pour le GaAs est :  $F_I=0.310$  confirme ce résultats, le décalage vers l'anion As est de 0.016**

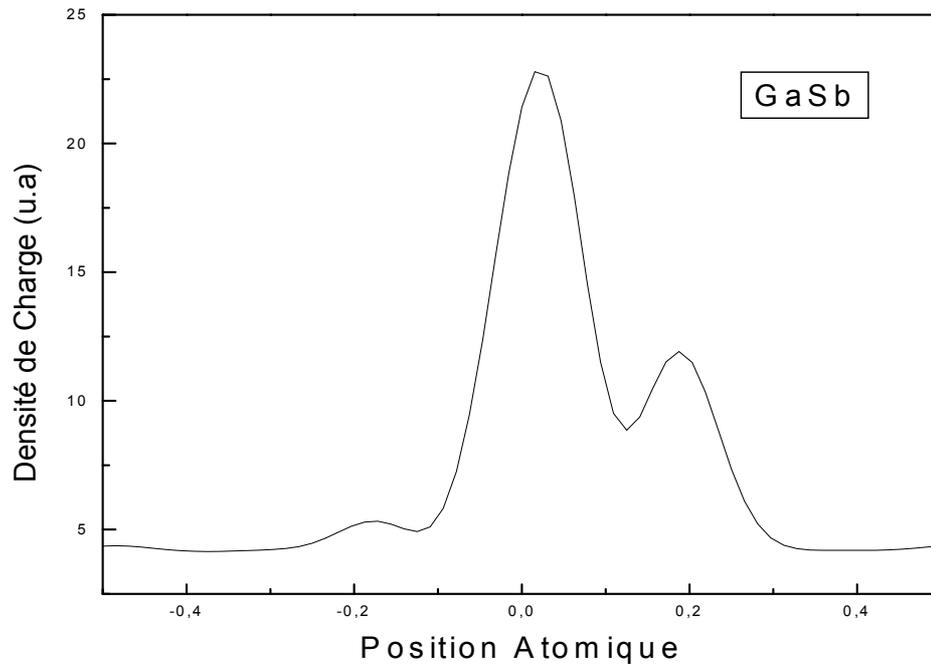


**Fig(V-10) : Densité de charges du GaAs**

### V.1.3.b DENSITE DE CHARGES DU GaSb

La densité de charges électronique du GaSb est représentée par la figure (V-11). On constate que le maximum est situé presque au milieu, mais il est légèrement décalé vers l'anion Sb. C'est à dire que la liaison présente les deux caractères covalent et ionique, le deuxième pic est localisé du côté de l'anion, indiquant ainsi que la distribution des

charges est d'autant plus forte en s'approchant du site anionique, mais le caractère covalent de la liaison est le plus important et cela coïncide avec la valeur de l'échelle de Phillips qui donne une valeur du facteur ionique pour le GaSb de 0.261. Le décalage du maximum dans nos calculs est de 0.020.

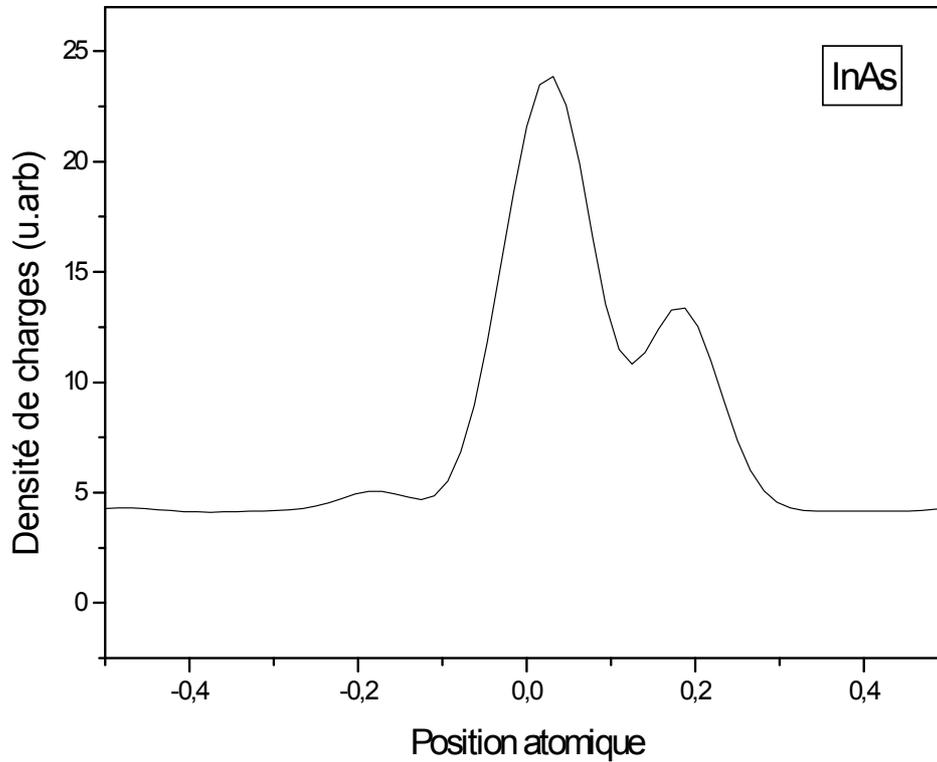


**Fig(V-11) : Densité de charge du GaSb.**

### **V.1.3.c DENSITE DE CHARGES DE L'InAs**

La densité de charges électronique de l'InAs présente un maximum légèrement décalé vers le site anionique As et par voie de conséquence la liaison chimique présente le caractère covalent et ionique, le décalage est de 0.030 . Ce qui est confirmé par la valeur de l'échelle de Phillips qui est de l'ordre de 0.357.

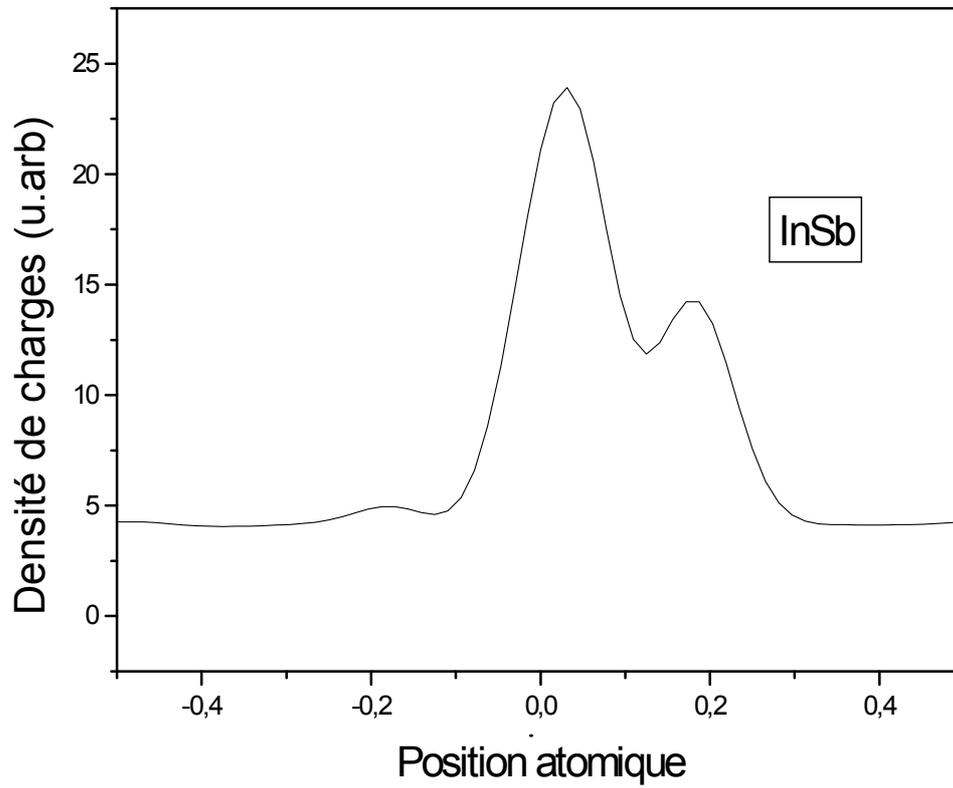
La figure (V-12) illustre la densité de charges électronique de l'InAs.



Fig(V-12) : Densité de charges de l'InAs

#### V.1.3.d DENSITE DE CHARGES DE L'InSb

On trouve la même situation que dans le cas des éléments précédents. Le maximum de la densité de charges est localisé presque au milieu des deux atomes, la liaison présente donc le caractère ionique et covalent, mais la distribution de charges est plus dense du côté de l'anion, chose qui indique la présence de charges du côté de l'anion. Le facteur ionique de l'InSb donné par l'échelle de Phillips est  $F_I = 0.321$  confirme cette situation, le décalage du maximum est de 0.029 . La figure (V-13) illustre la densité de charges de l'InSb.



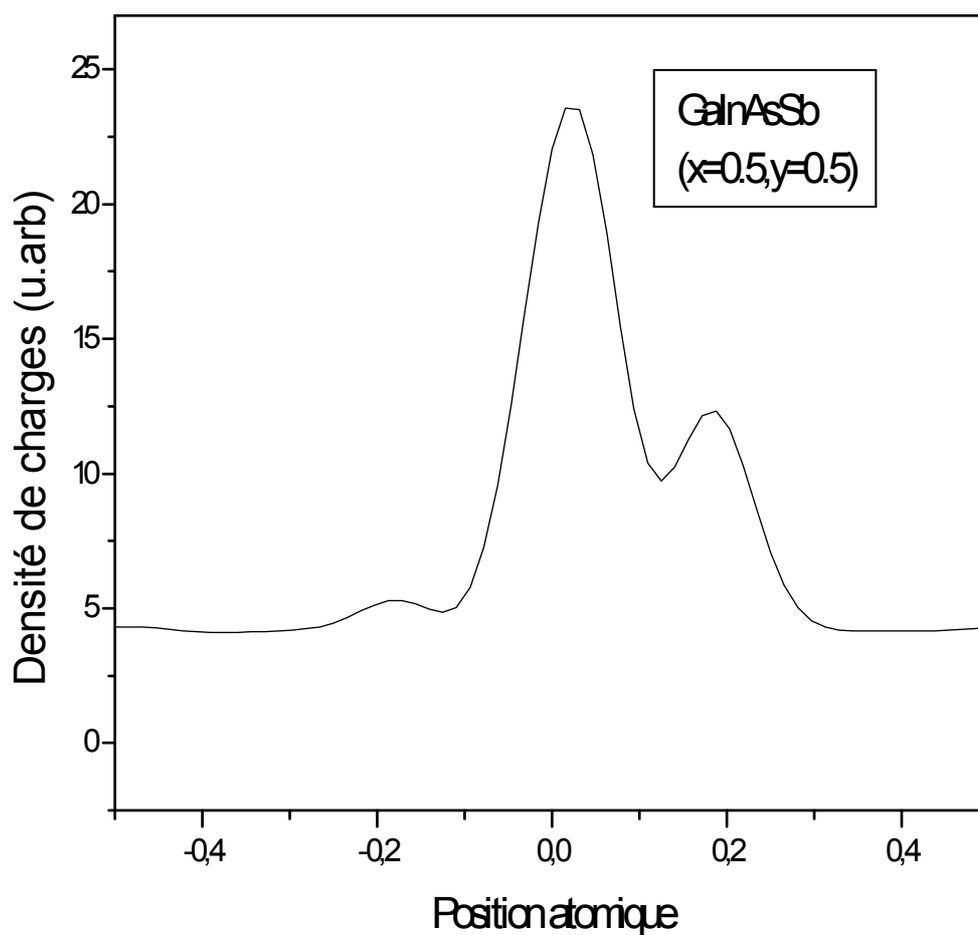
**Fig(V-13) : Densité de charges de l'InSb**

**Remarque :**

La situation rencontrée dans le cas des quatre éléments est due à la différence des électronégativités.

### V.1.3.e DENSITE DE CHARGES DU $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$

La densité de charges de l'alliage quaternaire pour une concentration ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ ) est illustrée dans la figure (V-14). Le maximum est légèrement décalé vers le site anionique, et de ce fait la liaison présente le caractère covalent et ionique, le décalage vers le site anionique est de 0.026.

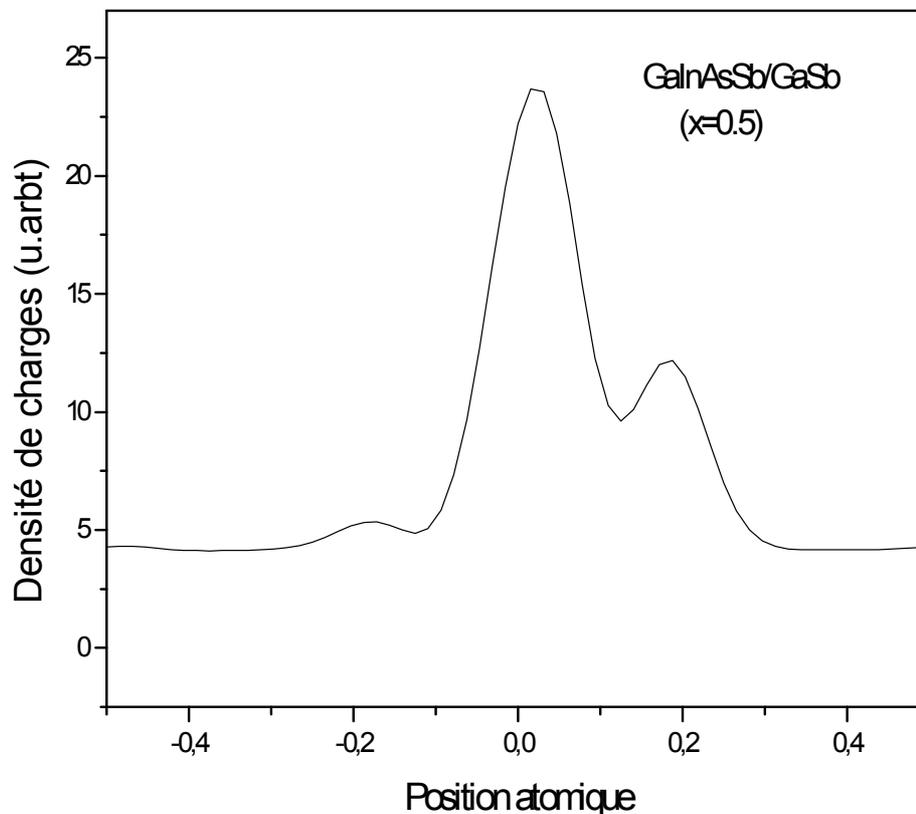


**Fig(V-14) : Densité de charges du  $\text{GaInAsSb}$  ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ )**

### V.1.3.f DENSITE DE CHARGES DU GaInAsSb/GaSb

La densité de charges de l'alliage quaternaire ajusté sur un substrat GaSb pour une concentration  $x=0.5$  est donnée dans la figure (V-15). Elle présente la même allure que celle de l'alliage sans substrat, la différence est quantitative : Le maximum de la densité de charges de l'alliage sur substrat est plus grand (valeur).

La densité de charges est donc plus importante, la liaison présente le caractère covalent et ionique, le décalage est de 0.047.



**Fig(V-15) : Densité de charges du GaInAsSb/GaSb (x=0.5)**

### V.1.4 DENSITE D'ETAT

L'étude des propriétés électroniques de notre matériau est complété par l'examen de la densité d'état des constituants binaires et du quaternaire.

Les figures (V-16,17,18,19,) montrent les densités d'état des quatre composés et de l'alliage quaternaire pour une concentration de (x=0.5, y=0.5).

Les densités d'état ont été calculées pour les quatre bandes de valence les hautes et les quatre bandes de conduction les plus basses.

On constate que la densité d'état des bandes de valence calculée est séparée en deux parties : La première partie est caractérisée par un grand pic correspondant à la première bande de valence avec une largeur qui varie d'un composé à l'autre.

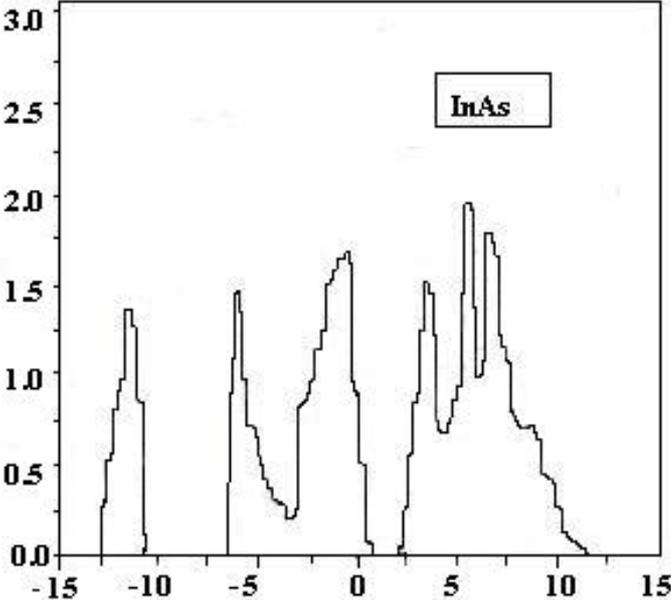
Une deuxième partie est caractérisée par deux pics correspondant aux bandes de valence (2,3,4) dont la largeur varie aussi d'un élément à l'autre.

Les densités d'état des bandes de valence calculées sont comparées aux valeurs expérimentales, la comparaison est faite à la base des énergies aux points  $\Gamma$ , X, L pour les différentes bandes de valence.

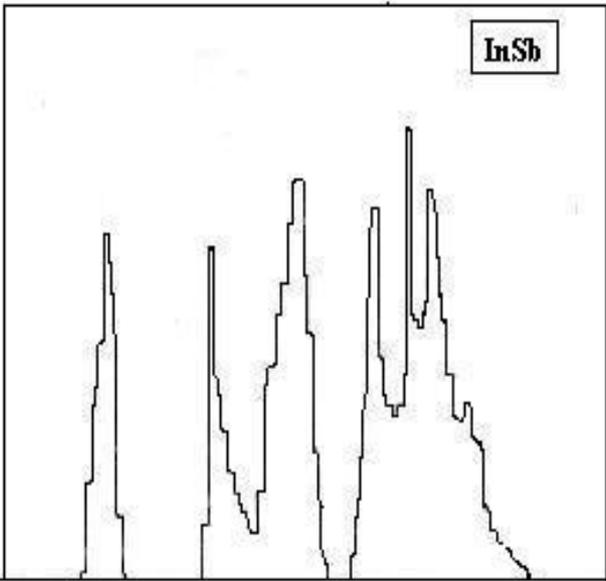
Le tableau (V-6) illustre cette comparaison.

Point de haute Symétrie	<i>GaAs</i>	<i>GaSb</i>	<i>InAs</i>	<i>InSb</i>
	<u>Calc</u> <u>Exp</u>	<u>Calc</u> <u>Exp</u>	<u>Calc</u> <u>Exp</u>	<u>Calc</u> <u>Exp</u>
$\Gamma_1(1BV)$	-11.83 -12.9± 0.5a	-9.67 -11.6±0.3b	-10.89 -12.3± 0.4a	-9.69 -11.7± 0.3a
$X_1(1BV)$	-9.04 -10.0± 0.2a	-10.97 -9.4± 0.2b	-9.17 -9.8± 0.3a	-8.33 -9.5± 0.2a
$X_3(2BV)$	-7.12 -6.90± 0.2a	-7.78 -6.9± 0.3b	-5.55 -6.3± 0.2a	-4.78 -6.4± 0.2a
$X_5(3-4BV)$	-2.26 -----	-4.19 -2.7 ± 0.2b	-1.95 -2.4± 0.3a	-1.70 -2.4± 0.4a
$L_3(3-4BV)$	-0.96 -0.80±0.2a	-2.89 -1.3± 0.2b	-0.79 -0.9± 0.3a	-0.70 -1.4± 0.3a

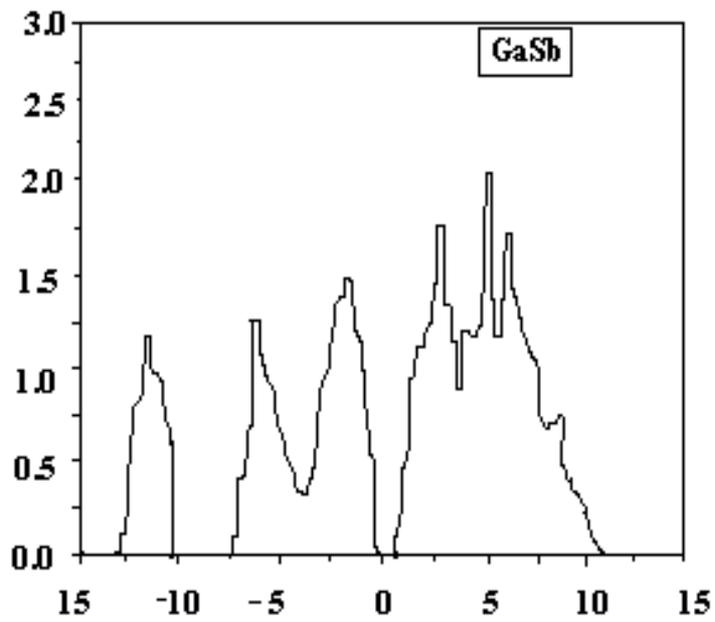
**Tableau (V-6) :**Les caractéristiques de la densité d'états des bandes de valence calculées et expérimentales des composés GaAs, GaSb, InAs et InSb (a et b sont des références dans [77]). Les valeurs des énergies en (ev).



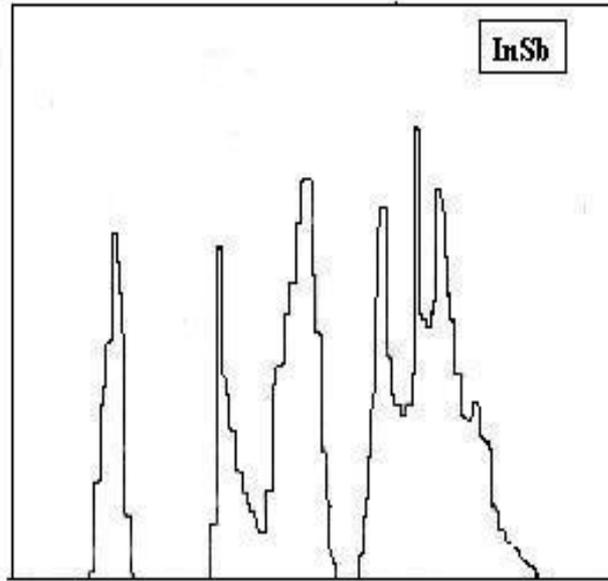
**Figure (V.16) :** Densité d'états électronique de l'InAs



**Figure (V.17) : Densité d'états électronique de l'InSb**



**Figure (V.17) : Densité d'états électronique du GaAs**



### DENSITE D'ETATS DU QUATERNAIRE (GaInAsSb) :

La figure (V-20) illustre la densité d'états de l'alliage quaternaire pour une concentration ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ ).

On constate que la densité d'états est similaire à ceux des éléments parents du point de vu qualitative, mais avec une énergie gap différente.

La densité d'états des bandes de valence est séparée tout comme dans le cas des composés binaires en deux parties, ou la première est caractérisée par un grand pic correspondant à la première bande de valence et ayant une largeur d'énergie égale 2.6 ev.

Une deuxième partie est caractérisée par deux pics correspondant aux bandes de valence (2-3-4) et ayant un écart d'énergie plus important.

De même que pour les éléments parents, la densité d'états des bandes de valence calculées sont comparées avec la densité d'états calculée par la méthode CPA (voir figure V-20 et V-21).

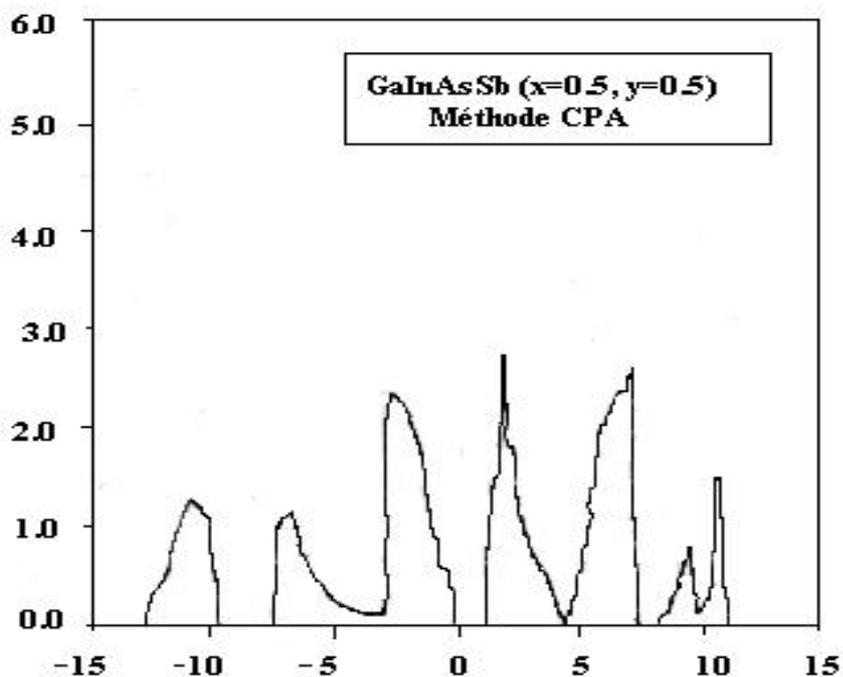


Figure (V-21) : Densité d'états du GaInAsSb ( $x=0.5, y=0.5$ )  
par la méthode CPA.

### LA FONCTION DIELECTRIQUE :

L'évaluation des constantes optiques  $\epsilon_1, \epsilon_2$  est d'ordre qualitatif. Dans ce travail, on a envisagé la constante diélectrique  $\epsilon_2$  du quaternaire  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  pour une concentration ( $x=0.5, y=0.5$ ). On constate qu'elle commence par un seuil d'énergie, ce seuil correspond à la valeur de l'énergie du gap direct du matériau qui est égale à 0.63 (eV), confirmant ainsi la valeur du gap direct calculé .

Les pics correspondent aux gaps d'énergies directs et indirects aux points X , L, XX, XL,  $\Gamma$ X et  $\Gamma$ L.

La figure (V-22) illustre l'allure de la constante d'électrique  $\epsilon_2$  en fonction de l'énergie.

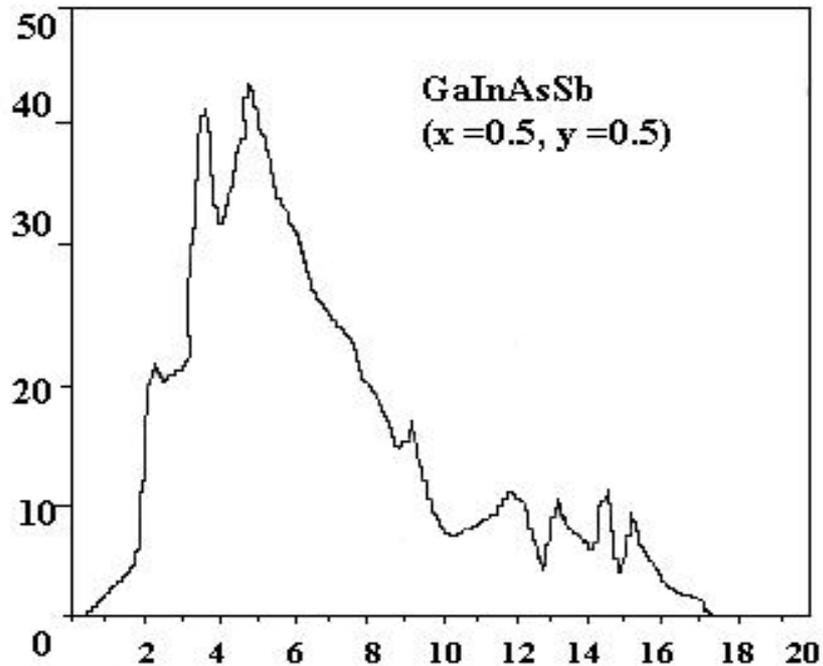


Fig (V-22) : Fonction diélectrique de l'alliage quaternaire  
GaInAsSb ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ )

### V.3 INDICE DE REFRACTION

#### V.3.1 INDICE DE REFRACTION DES COMPOSES BINAIRES

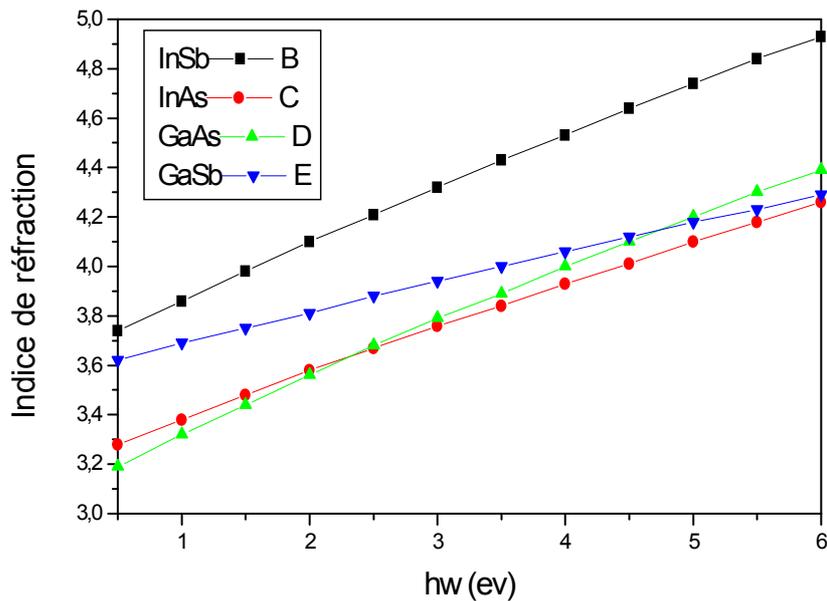
**L'indice de réfraction est la caractéristique optique la plus importante d'un matériau, et pour cela et en utilisant le model d'Adachi, on a calculé les indices de réfraction des quatre composés binaires :**

**Le tableau (V-7) donne les constantes A , B et le spin-orbite splitting des éléments parents de notre alliage.**

Constituants Binaires	Constante [A]	Constante [B]	Splitting [ $\Delta$ ]
<b>GaAs</b>	6.3	12.66	0.34
GaSb	4.05	9.4	0.82
InAs	5.14	10.15	0.38
InSb	7.91	13.07	0.81

**Tableau (V-7) : constantes A , B et le spin-orbite splitting [ ]**

La figure (V-23) illustre les courbes représentant les indices de réfraction des éléments parents du quaternaire en fonction de l'énergie.



**Fig (V-23) :Indice de réfraction des composés binaires**

Les indices de réfraction des quatre composés augmentent en fonction de l'augmentation de l'énergie  $hw$ .

### V.3.2 INDICE DE REFRACTION DU QUATERNAIRE

**Dans le model d'Adachi, et pour l'alliage quaternaire l'indice de réfraction est calculée en fonction de la concentration et des paramètres des constituants binaires.**

**V.3.2.a INDICE DE REFRACTION DU  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$**

**Pour une concentration ( $x=0.5, y=0.5$ ) l'indice de réfraction est calculée en fonction de l'énergie. Le spin orbite spliting du matériau est estimé en utilisant la loi de Vegard qui donne :**

$$\Delta (0.5,0.5) = 0.58 \text{ ev}$$

**De même les constantes A et B sont données par :**

$$A (0.5,0.5) = 5.85$$
$$B (0.5,0.5) = 11.32$$

**En introduisant ces valeurs dans l'expression donnée par l'équation (IV-27) et en faisant varier l'énergie  $\hbar\omega$  et sachant que l'énergie gap du matériau vaut 0.59 ev, on obtient l'allure illustrée dans la figure (V-24) :**

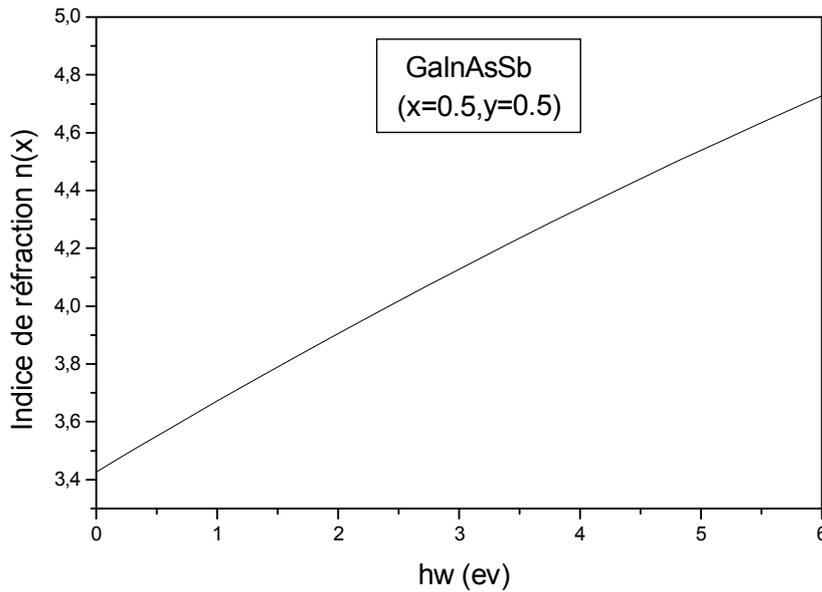


Fig (V-24 ) :Indice de réfraction du GaInAsSb  
(x=0.5,y=0.5)

### V.3.2.b INDICE DE REFRACTION DU $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$

**Pour calculer l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire avec un substrat GaSb , on a estimé le spin orbite splitting ainsi que les constantes A et B à partir de ceux des constituants binaires tout en supposant que la loi de Vegard est vérifiée.**

**On a donc :**

$$\Delta (x,y) = xy\Delta (\text{GaAs}) + y(1-x) \Delta (\text{InAs}) + (1-x)(1-y) \Delta (\text{InSb}) + x (1-y) \Delta (\text{GaSb})$$

$$A (x,y) = xyA (\text{GaAs}) + y(1-x) A (\text{InAs}) + (1-x)(1-y) A (\text{InSb}) + x (1-y) A (\text{GaSb})$$

$$B (x,y) = xyB (\text{GaAs}) + y(1-x) B (\text{InAs}) + (1-x)(1-y) B (\text{InSb}) + x (1-y) B (\text{GaSb})$$

**Un fittage polynomial quadratique donne :**

**1) pour le splitting :**

$$\Delta (x) = 0.42 + 0.52 x - 0.12 x^2$$

2) pour la constante A :

$$A(x) = 5.56 + 2.79 x - 4.34 x^2$$

3) pour la constante B :

$$B(x) = 10.44 + 2.98 x - 0.77 x^2$$

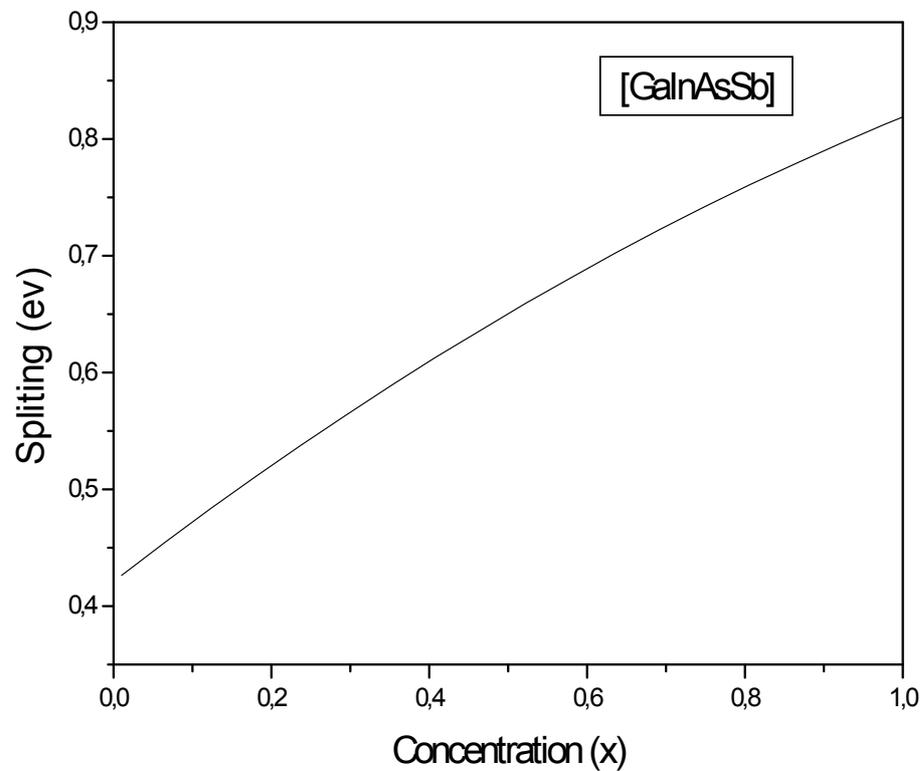


Figure (V-25) :Variation du splitting  $\Delta$  en fonction de la concentration x

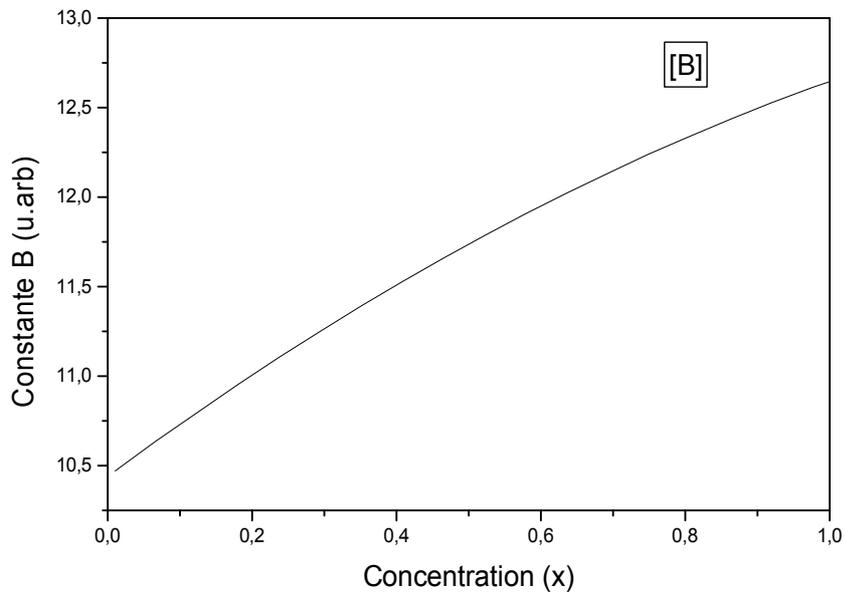
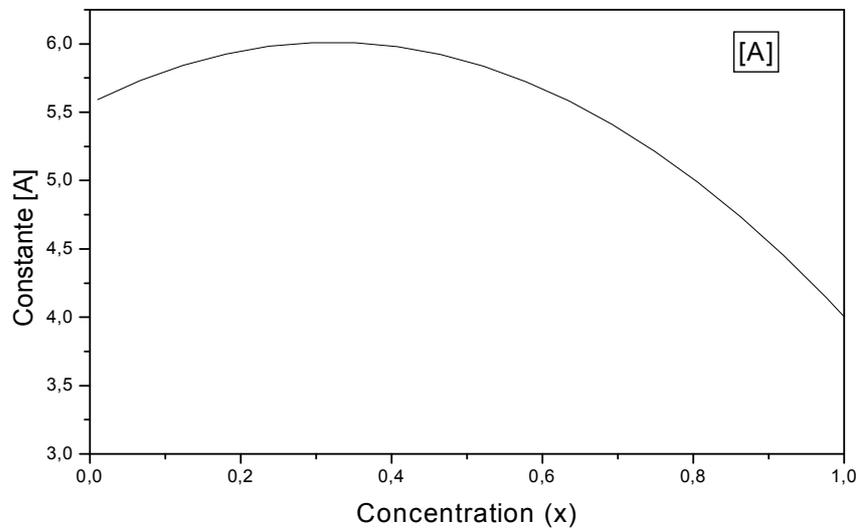


Figure (V-26) :Variation de la constante B en fonction de la concentration x

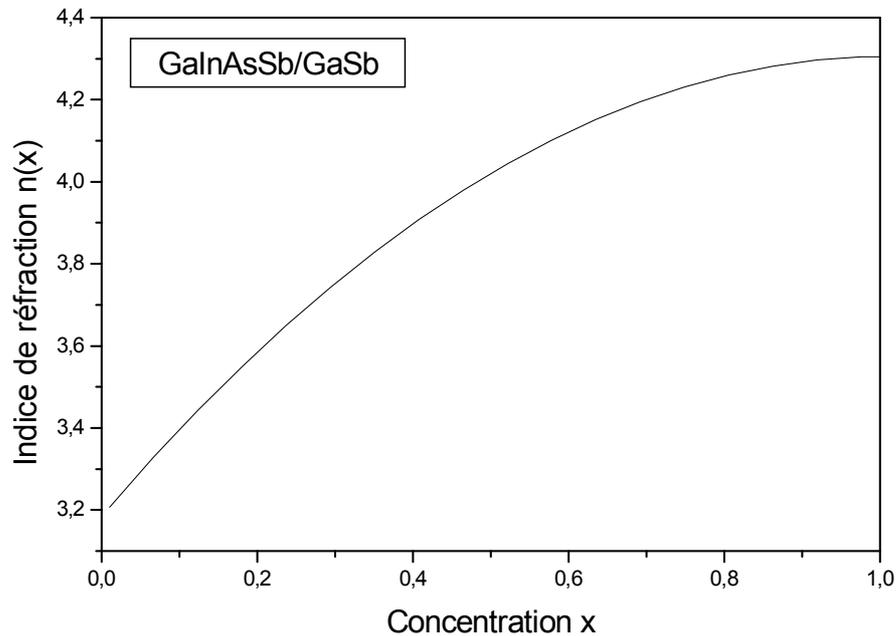
Figure (V-27 ) :Variation de la constante A en fonction



de la concentration x

**Pour évaluer l'indice de réfraction du quaternaire  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$ , on fait varier l'énergie  $hw$  de 0.5 à 5 ev par pas de 0.5.**

**La figure (V-28) représente l'indice de réfraction en fonction de la composition x.**



**Fig (V-28) :Indice de réfraction du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$  En fonction de la concentration (x)**

**Afin de mieux expliciter le sens de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration, on étudier l'indice de réfraction en fonction de la composition x pour les valeurs de**

**l'énergie hw suivantes :**

$$\text{hw} = 0.5 \text{ ev, } x = 0.1, 0.2 \dots 1$$

$$\text{hw} = 1.5 \text{ ev, } x = 0.1, 0.2 \dots 1$$

$$\text{hw} = 3 \text{ ev, } x = 0.1, 0.2 \dots 1$$

$$\text{hw} = 4.5 \text{ ev, } x = 0.1, 0.2 \dots 1$$

$$\text{hw} = 6 \text{ ev, } x = 0.1, 0.2 \dots 1$$

**La figure (V-29) illustre les courbes représentant les indices de réfraction de l'alliage quaternaire  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$  en fonction de la composition x pour des valeurs fixes choisies dans l'intervalle [0.5, 6] ev.**

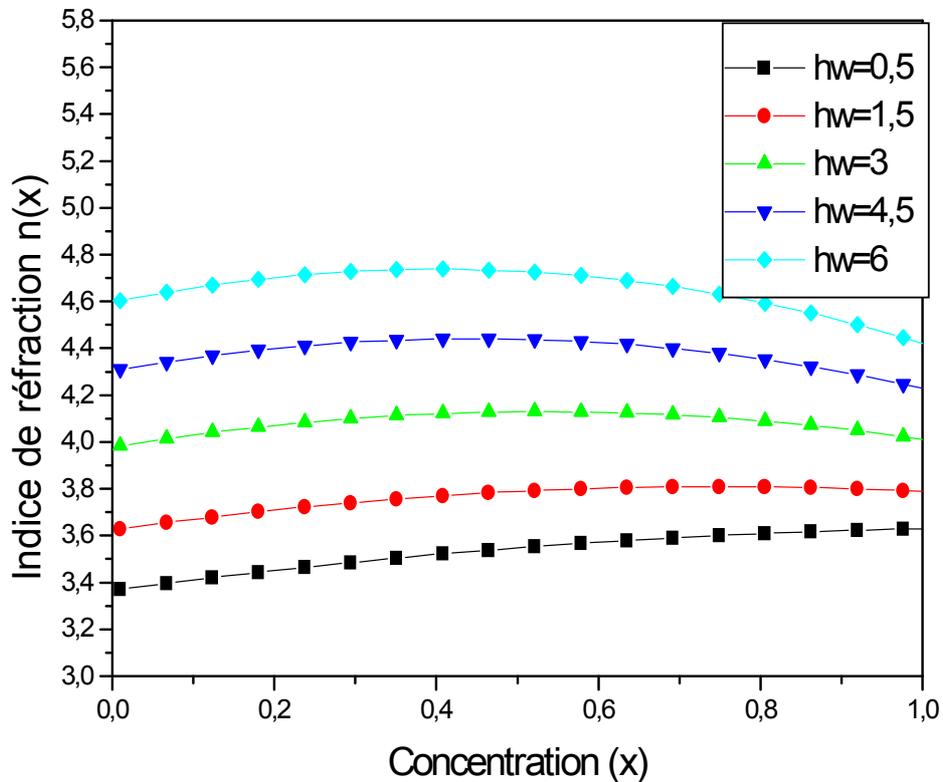


Fig (V-29) : Indice de réfraction en fonction de la concentration (x) pour différentes valeurs de l'énergie

**L'indice de réfraction de l'alliage quaternaire ajusté sur le substrat GaSb croît au fur et à mesure que l'énergie hw et la concentration x croissent. Un fittage polynomiale quadratique des valeurs obtenues donne :**

$$n(x)_{hw} = 3.18 + 2.22 x - 1.10 x^2$$

**L'indice de réfraction n(x) pour une concentration fixe x = 0.5 augmente en fonction de la croissance de l'énergie hw. Le fittage polynomiale des résultats calculés donne :**

$$n(x)_{hw} = 3.42 + 0.25 x - 0.006 x^2$$

la dernière étape a été consacrée à l'étude de la variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration  $x$  pour des énergies fixes, la figure (V-29) illustre les variations de l'indice de réfraction dans chaque cas.

On constate que pour une énergie :

1)  $hw = 0.5 \text{ eV}$

L'indice de réfraction croit en fonction de la concentration  $x$ ,

$n(x)$  est donnée par :

$$n(x)_{hw=0.5} = 3.36 + 0.46 x - 0.20 x^2$$

2)  $hw = 1.5 \text{ eV}$

L'indice de réfraction croit en fonction de la concentration  $x$ , et en se stabilisant pour les concentrations élevées, l'expression de  $n(x)$  est donnée par :

$$n(x)_{hw=1.5} = 3.62 + 0.49 x - 0.33 x^2$$

3)  $hw = (3, 4.5, 6) \text{ eV}$

L'indice de réfraction croit jusqu'à où elle atteint un maximum, ensuite elle décroît, les courbes représentant l'indice de réfraction passent donc par des maximums.

Les expressions donnant  $n(x)$  sont les suivantes :

$$n(x)_{hw=3} = 3.98 + 0.57 x - 0.54 x^2$$

$$n(x)_{hw=4.5} = 4.30 + 0.62 x - 0.69 x^2$$

$$n(x)_{hw=6} = 4.59 + 0.71 x - 0.88 x^2$$

## CONCLUSION GENERALE

**Le progrès technologique, et le développement excessive dans le domaine électronique et notamment l'optoélectronique exige des composants et des dispositifs de hautes performances.**

**Les semi-conducteurs classiquement connus, ne peuvent répondre à de telles exigences. Les physiciens et les technologistes tournent vers de nouvelles filières de matériaux et en particulier les alliages semi-conducteurs binaires, ternaires et quaternaires.**

**Les alliages semi-conducteurs quaternaires II-6 et III-5 Sont les plus récemment développés et à la différence des composés binaires et ternaires, les quaternaires se caractérisent par deux coefficients stœchiométriques  $x, y$ .**

**Dans ce travail, on a présenté une études théorique générale sur les alliages semi-conducteurs où on a envisagé la préparation, la classification, la modélisation et les propriétés structurales et électroniques de ses matériaux.**

**En deuxième lieu, on a cité les méthodes de calculs les plus couramment utilisées. Le détail à été réservé à la méthode des pseudo-potentiels empirique couplée avec la méthode du cristal virtuel (VCA) employée dans nos calculs.**

**Comme les propriétés optiques d'un matériau sont les plus importantes du point de vu optoélectroniques, une étude qualitative à été accordée à la fonction diélectrique où les différents models développés dans ce sens ont été cités.**

**Une attache particulière à été accordée au model de Sadao . Adachi qui se base sur les transitions interbandes.**

Dans le dernier chapitre, on a développés les calculs relatifs à l'alliage quaternaire  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  et ces éléments constitutifs. Ces calculs montrent que :

- Les composés binaires GaAs, InAs, InSb, GaSb sont tous à gaps direct, le gap varie d'un composé à l'autre.

- Le gap du quaternaire  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  reste direct pour toute concentration  $x$  allant de 0.1 à 1.

- Les énergies  $E_{\Gamma\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma X}$ ,  $E_{\Gamma L}$  calculées en fonction de la concentration passent par des maximums.

- Les densités de charges électroniques montrent que les éléments parents et l'alliage quaternaire possèdent des liaisons qui présentent l'aspect covalent et ionique.

- Les densités d'états électroniques des éléments parents et celle du quaternaire sont semblables du point de vu qualitatif, la différence réside dans les largeurs de bandes.

Concernant, l'indice de réfraction et en utilisant le model d'Adachi pour les éléments binaires, on constate que les indices de réfractions croissent en fonction de l'augmentation de la concentration.

De même, pour l'alliage quaternaire et pour une concentration fixe ( $x=0.5$ ,  $y=0.5$ ) l'indice de réfraction augmente en fonction de l'énergie.

L'indice de réfraction de l'alliage quaternaire ajusté sur un substrat GaSb à été évaluée en fonction de la concentration  $x$  pour différentes valeurs de l'énergies. Dans ce cas on a constaté que l'indice de réfraction croit au fur et à mesure que l'énergie et la concentration croissent.

Afin de mieux observer le comportement de l'indice de réfraction, on l'a calculée en fonction de la concentration pour des valeurs fixes de l'énergie. Le comportement de l'indice de réfraction était comme suit :

- 1) Pour les faibles valeurs de l'énergie de notre intervalle, l'indice de réfraction croît en fonction de la concentration.
- 2) Pour des valeurs un peu plus élevées, l'indice de réfraction augmente et en se stabilisant pour les concentrations élevées.
- 3) Pour les énergies hautes de notre plage, l'indice de réfraction passe par un maximum.

### *REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES*

- [1] R.A.Wood and R.J.Pasko. *J. Vac. sci. technol A*<sub>1</sub>, 1608 (1983).
- [2] D.D Edwal. E.R. Gertner, W.E. Tennant. *Appl. phys.* 55.1453 (1984).
- [3] S.K. Ghaudi and I. Bhat. *Appl. phys* 44, 779 (1984).
- [4] G.B. Stringfellow. *Prog .phys.* 45 (1982).
- [5] J.P. Hirtz et al. *Inst. phys. conf.* 56 (1981).
- [6] M.J. Ludwise. *J. Appl. phys.* 58.1231 (1985).
- [7] K.L. Hess, H.M. Manasevit, *J. Electron. Mater* 11.1115 (1982).
- [8] C.Y Feng. W. Weber, *phys. Rev.* B12.5387 (1976).
- [9] A. Baldereschi and K. Maschke, *solid state commun* 16.99 (1975).
- [10] A.G. Thomson et J.C. Wooly, *J. phys* 45, 255 (1967).
- [11] S. Adachi, *physical properties of III-V compounds* (1992).
- [12] Y.P. Feng, K.L. Teo, M.F. Li... , *J. Appl. phys* 74(6) 3948 (1993).
- [13] Sylvester. N. Ekpenuma, C.W. Mules and Jeffery . *R.G. phys. Rev.* V41(6) 3582.
- [14] V.B. Gera. Rita. G and K.P. Jain . *phys. Rev* B36 N°18, 9657.
- [15] A. Sasaki, Nishima and Y. Takeda, *Jpn, Journal of applied physics*, V19 N°9 .p1695-1702 (1980)
- [16] H.W.M. Rompa, M.F.H Shuurmans and Williams *phys. Rev lett.* 58(8) (1984).
- [17] H. Aourag and al. *Mcp* 31, p359-364 (1991).
- [18] N. Badi, N. Amrane, H. Abid, M. Driz, B. Souidini, B. Khelifa and H. Aourag and al, *phys. stat. sol (b)* (185-379), (1994).
- [19] K.C. Hass, R.J. Lempert and al, *Enriech, phys. Rev. lett.* 52 ,77 (1983).
- [20] C. Mikelssen, B. Boyce, *phys. Rev lett* 49, 1412 (1982), *phys, Rev.* B28, 7130 (1986).
- [21] H. Oyanagui. Y. Takeda, T. Yao and A. Sasaki. *solid state commun* 67. 453 (1988)
- [22] Y. Takeda, H. Oyanagui and A. Sasaki, *J. Appl phys* 68.4519 (1990).
- [23] S.M. Islam, and B. Benker, *phys. Rev.* B58.606 (1989).
- [24] C.K. Shih, W.E Spieer, W.A. Harrison and A. Sher *phys. Rev* B31.1139

- (1985).
- [25] J.L.Martins and Zinger, *phys.Rev* B30.6270 (1984).
  - [26] G.P.Srivestava, J.L.Martins.Z.Zinger, *phys Rev* B31 2561 (1985).
  - [27] J.M Baranowski, *J. phys.C*17. 6287 (1984).
  - [28] Y.Cai and M.F Thorpe, *phys Rev* B46 .15872 (1992).
  - [29] M.Hegems, M.B.Panish, *J.phys.chem..solids* V35(409-420), (1974).
  - [30] K.Onab, *Jpn.Journal of applied physics* V22,N°4,(663-673), (Apr1983).
  - [31] R.E Nahory and M.A.Pollack, *J.electrochem* .(125), (1978).
  - [32] G.B.Strigffellow, *J.Growth*, 27.21 (1974).
  - [33] A.Marbeuf, J.C Guillaum, *J.phuys.Col* 5 .supl.N°12.T43.(5-19), (dec1982).
  - [34] d ;Brust, M.L.Cohen, J.C Phillips, *phys .Rev.lett.*9.389 (1967).
  - [35] J.R Chelikowsky and M.L Cohen, *phys.Rev* B14(2). (1976).
  - [36] M.L Cohen, T.K Bergstresser, *phys.Rev* 141(2). (1966).
  - [37] D.Brust, *phys.Rev.A*114, 1357 (1964).
  - [38] M.L Cohen and V.Heine, *sol.stat.phys.*24.37 (1970).
  - [39] H.Abid, M.Rezki, H.Aourag. *Mat.Sci and Engineering* B41(314-321) (1996).
  - [40] S.J.Lee, T.S.Kwon, M.Kyum and Chul Koo Kim *J.phys.cond.matter*, 2. 3250 (1990).
  - [41] F.Bassani, *Electronic states and optical transition in solids* (1973).
  - [42] J.Friedel, G.Harbeke, M.Balkanski... , *optical properties of solids*.ed.F.Ables (North-Holland), (1972)
  - [43] D.E Aspnes, *optical properties of solids*.Ed.B.O.Seraphin 799 (1976).
  - [44] Vann Hove, *phys. Rev.*89, 1189 (1953).
  - [45] J.Phillips, *phys.Rev.*104, 1263 (1956).
  - [46] C.Kittel *physique de l'etat solide*, Ed5 (1983).
  - [47] S.Ozaki, S.Adachi *J.Appl.phys.*V78 N°5.3380 (1995).
  - [48] F.Wooten *optical properties of solids*, Academic.N.Y (1972).
  - [49] F.L.Terry, *J.Appl phys*70, 409 (1991).
  - [50] M.Cardona, *Modulation spectroscopy*, supl.11 of solid state physics. Academic.N.Y (1969).
  - [51] D.E.Aspnes in *handbook on semiconductors*.Ed.M.Balkanski, North-Holland.Amst V2 109 (1980).
  - [52] S.Adachi *phys.Rev.*B35, 7454 (1987).
  - [53] D.W.Jenkins, *J.Appl phys.*68, 1848 (1990).
  - [54] S.H.Wempele, M.Didomenico, *phys Rev.*B3, 1338 (1971).
  - [55] F.Stern, *phys Rev.*133 A1653 (1964).
  - [56] M.A.Afromowitz, *solid state commun* 15, 167 (1950).
  - [57] M.Erman, J.B.Theeten and al, *Sci.Technol* B1,328 (1983).
  - [58] H.Ehrenreich and M.H.Cohen, *phys Rev.*115, 286 (1959).
  - [59] T.S.Moss, *prog.phys.soc* B63, 167 (1950).
  - [60] P.Herve and L.J.K.Vandamme, *infrared physical technol* 35, 609 (1994).
  - [61] S.Adachi, *phys Rev.*B39, 12612 (1989).

- [62] S.Adachi and T.Taguchi, *phys.Rev.B*43, 9569 (1991).
- [63] S.Adachi, *phys.Rev.B*38, 12345 (1988).
- [64] S.Adachi, *J.Appl.phys* 66 , 813 (1989).
- [65] S.Adachi, *phys.Rev.B*41, 1003 (1990).
- [66] S.Adachi, T.Kimura and M.Suzuki, *J.Appl.phys.*74, 3435 (1993).
- [67] K.L.Teo, Y.P.Feng, T.C.Chong, J.B.Xia, *J.Appl.phys* 74 (8) 349 (1995)
- [68] R.J.Elliot, *phys.Rev.*108, 1384 (1957).
- [69] M.Del castillo-Mussot and I.J.Sham, *phys.Rev.B*31, 2092 (1985).
- [70] E.O.Kane, *phys.Rev.*180, 852 (1969).
- [71] B.Veicky and J.Sak,*phys.status solid.*16, 147 (1966).
- [72] J.E.Rowe and D.E Aspnes, *phys.Rev.lett.*25, 162 (1970).
- [73] R.M.Martin, J.A.Van Vechten, J.O.Rowe and D.E.Aspnes, *phys.Rev B*6. 2500 (1972).
- [74] S.Adachi, *phys.Rev.B Vol 35, N°14* (1986).
- [75] S.Y.Toyozawa, *prog.Theor.phys.*20, 53 (1958).
- [76] S.F.Edwards and Y.B.Gulyaev .*prog.phys.soc.London* 83, 496 (1964).
- [77] T.Lukes and K.T.Somaratra, *J.phys.c3*, 2044 (1970)
- [78] C. Albert et al . *phys Rev B*27.4926 (1983).

