



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT

MEMOIRE DE MASTER

Présenté par :

➤ *Mlle. YOUSFI Chaimaa*

Filière : PHYSIQUES

Spécialité : Nano-physique

Intitulé :

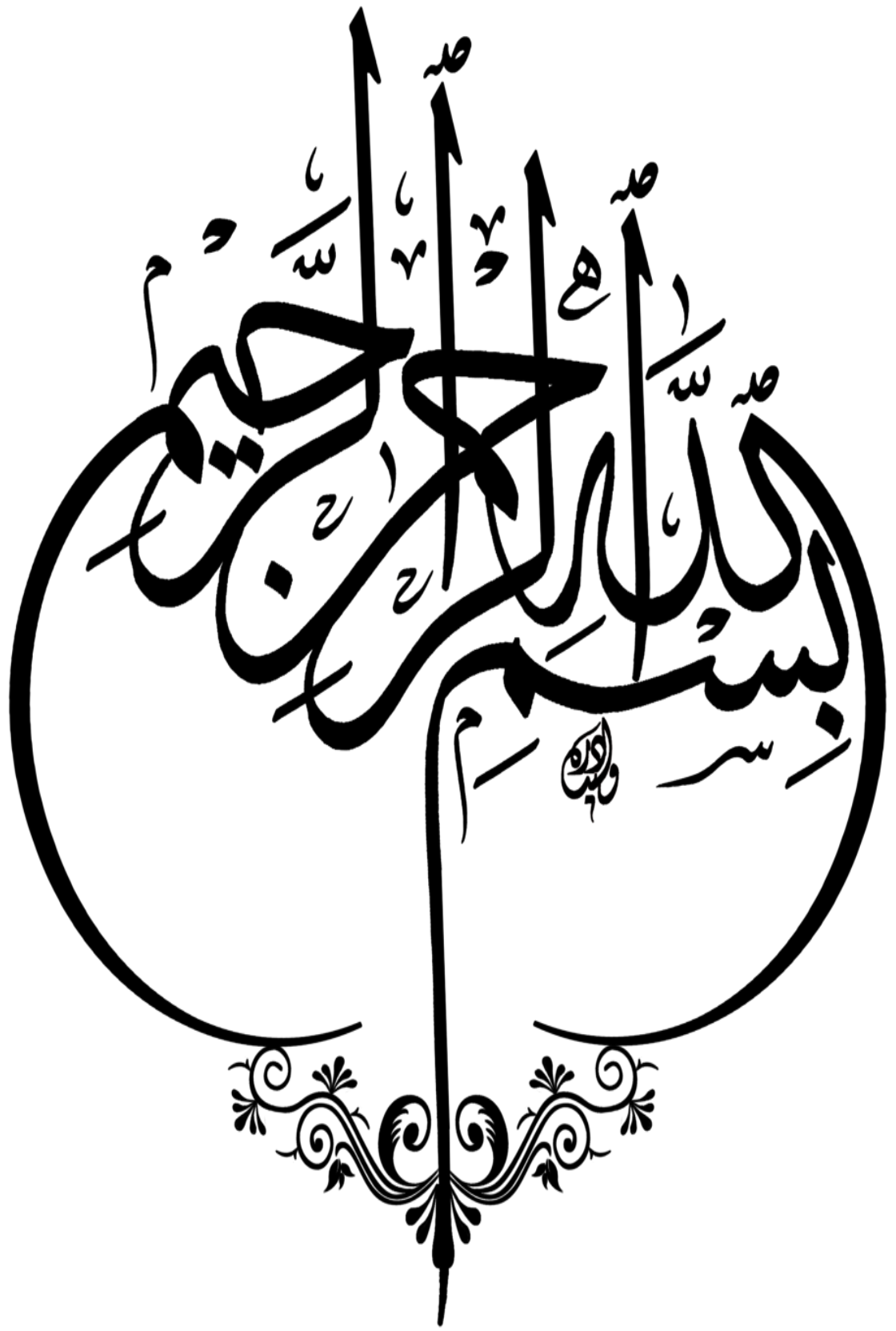
*Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques de
l'alliage semi-conducteur $InAs_{(1-x)}P_x$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) par*

La méthode (FP-LAPW)

Devant le jury composé de :

| | | | |
|---------------------------|--------------------------------|-------------|--------------------------------|
| Président | M. BENALIA SALAH EDINNE | PR. | C. Universitaire de Tissemsilt |
| Directeur de thèse | M. DJOUDI LAKHDAR | PR. | C. Universitaire de Tissemsilt |
| Examineur | M. ZERROUKI TAYEB | MAA. | C. Universitaire de Tissemsilt |

Année universitaire : 2019/2020





Dédicace

- ✓ A ma chère mère et mon cher père
- ✓ A ma sœur
- ✓ A mes frères
- ✓ A mon encadreur qui m'a beaucoup aidé: Pr. L. DJOUDI
- ✓ A mes chers amis surtout: K. AZIZI
- ✓ A tous mes enseignants du primaire à l'université surtout: Mme. MAHMOUDI



#Chaimaa



Remerciement

Je remercie **ALLAH** le tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience pour réussir un tel travail.

Je tiens à exprimer mes profondes gratitudees à tous les personnes qui m'ont donné leur soutien directement ou indirectement pour réaliser ce travail et qu'ils se sont intéressés au succès de cette modeste étude de près ou de loin.

Particulièrement:

✓ Les membres de jury:

M. BENALIA Salah Eddine "Le président de jury de mon mémoire".

M. ZERROUKI Tayeb "L'examineur de mon mémoire".

M. DJOUDI Lakhdar "L'encadreur de mon mémoire".

✓ Monsieur le directeur et tous les enseignants de département des sciences de la matière de CUT surtout: F. ZAMI et R. BELACEL.

En fin, je voudrais remercier ma famille, mes amis et mes parents pour leur soutien durant ces années d'étude. Que ce travail rende hommage à leur dévouement et à leur affection.

#Chaimaa



LISTE DES FIGURES

CHAPITRE I

Figure I-1 : Structure cristalline "Zinc Blende"

Figure I-2 : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende.

Figure I-3 : Représentation des bandes d'énergie

Figure I-4 : Structure de bande d'énergie du: A-gap indirect et B-gap direct

Figure I-5 : Première zone de Brillouin de la structure Rock-Salt avec la représentation des points et lignes de hautes symétries

Figure I-6 : Transitions optiques directes et indirectes

CHAPITRE II

Figure II-1 : Représente les structures d'InAs et InP zinc blende, positions atomiques In en $(0, 0, 0)$, As et P $(1/4, 1/4, 1/4)$

Figure II-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de d'InAs en phase zinc blende avec l'approximation GGA

Figure II-3 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'InP en phase zinc blende avec l'approximation GGA



Figure II-4 : Structures de bandes d'InAs et InP, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Figure II-5 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

Figure II-6 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

Figure II-7 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

Figure II-8 : Variation de paramètre de réseau en fonction de la concentration (x)

Figure II-9 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Figure II-10 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Figure II-11 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.75}$, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Figure II-12 : Partie réelle de la fonction diélectrique d'InAs et InP en phase zinc blende

Figure II-13 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d'InAs et InP en phase zinc blende

Figure II-14 : Partie réelle de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ en phase zinc blende



Figure II-15 : Partie réelle de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ et $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende

Figure II-16 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ et $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ en phase zinc blende

Figure II-17 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende



LISTE DES TABLEAUX

CHAPITRE I

Tableau I-1: Extrait de la classification périodique des éléments.

Tableau I-2: Paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V.

Tableau I-3: Indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à $T=300\text{k}$

CHAPITRE II

Tableau II-1: Rayons muffin-tin R_{MT} et le nombre des points K

Tableau II-2: Paramètre de réseau (a) et le module de compression B et sa dérivée B' pour InAs et InP dans la phase Zinc Blende

Tableau II-3: Gap direct $E_g(\Gamma - \Gamma)$ pour InAs et InP dans la phase zinc blende

Tableau II-4: Paramètre de réseau (a) et le module de compression B et sa dérivée B' pour $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$.

Tableau II-5: Gap direct $E_g(\Gamma - \Gamma)$ $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$



ملخص

الهدف المرجو من هذا البحث هو تقديم دراسة للسبائك الثلاثية $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ بتركيز مختلفة ($x=0-1$) عن طريق دراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية و الضوئية في بنية zinc blende باستخدام طريقة الأمواج المستوية الخطية ذات أساس كموني كامل (FP-LAPW) ضمن نظرية الكثافة الدالية المطبقة في برنامج WIEN2K مع الطريقة التقريبية (GGA) لعلاج التبادل وإمكانية الارتباط.

وبناءً على ما سبق لاحظنا انخفاض معامل شبكة السبائك الثلاثية $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ بتركيزات مختلفة، حيث اظهر حساب نطاق الطاقة وجود فجوة مباشرة مع زيادة في طاقات الفجوة التي تؤثر على الخصائص البصرية للسبائك.

الكلمات المفتاحية: نظرية الكثافة الدالية، $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ ، الطريقة التقريبية (GGA)، الامواج المستوية الخطية ذات اساس كموني كامل (FP-LAPW)، فوسفيد الإنديوم، زرنيخ الإنديوم.



Abstract

In this study, we produce the structural, electronic and optical of the ternary alloy $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ at different concentrations ($x=0-1$) in the zinc blende structure, using the Density Functional Theory (DFT) and the Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave method (FP-LAPW), with Generalized Gradient Approximation (GGA) implemented in WIEN2K code. Lattice parameter decreases of the ternary alloy has been observed at different concentration effecting the calculation of the energy band showed that $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ has a direct gap with an augmentation in the gap energies influencing the optical properties of the $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ alloy.

Key Word: DFT, indium phosphide, indium arsenide, FP-LAPW, GGA
 $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$



Résumé

Dans cette étude, nous prédisons les propriétés structurales électroniques et optiques de l'alliage ternaire $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ à différentes concentrations ($x=0-1$) dans la structure zinc blende, on utilisant la théorie fonctionnel de la densité (DFT) et la méthode des ondes planes augmentées linéarisée (FP-LAPW) en particulier l'approximation du gradient généralisé (GGA) implémentée dans le code WIEN2K. une diminution des paramètres du réseau de l'alliage ternaire a été observée à différents concentrations effectuer le calcul de la structure de bande d'énergie a démontré que l' $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ possède un gap direct avec un augmentation dans les énergies de la bande influençant les propriétés optiques de l'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$

Mots-clés: DFT, Phosphure d'indium, Arséniure d'indium, GGA, FP-LAPW
 $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$



Tables des matières

Dédicace

Remerciement

Liste des figures

Liste des tableaux

Abstract

Résumé

Tables des matières

Introduction Générale..... I

Chapitre I : Généralités sur les semi-conducteurs III-V

I-1 Introduction 1

I-2 Définitions des semi-conducteurs III-V 2

I-3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs
III-V 2

I-4 Propriétés structural des alliages semi-conducteurs III-V 4

I-4-1 Structures cristallines 4

I-4-2 Constante du réseau 5

I-4-3 Réseaux réciproques 6



| | |
|--|----|
| I-5 Propriétés électroniques des alliages semi-conducteurs III-V | 7 |
| I-5-1 Gap énergétiques | 7 |
| I-5-2 Gap direct et gap indirect | 8 |
| I-6 Premier zone de Brillouin | 8 |
| I-7 Propriétés optiques des alliages semi-conducteurs III-V..... | 11 |
| I-7-1 L'indice de réfraction | 12 |
| I-8 Phosphure d'indium | 13 |
| I-9 Arséniure d'indium | 14 |
| I-10 Conclusion | 14 |
| Références | 15 |

Chapitre II : RESULTATS ET DISCUSSION

| | |
|--|----|
| II-1 Introduction..... | 19 |
| II-2 Détails de calcul | 19 |
| II-3 Résultats et discussions | 20 |
| II-3-1 Composés binaires | 20 |
| II-3-1-1 Propriétés structurales | 20 |
| II-3-1-2 Propriétés électroniques | 24 |
| II-3-2 L'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ | 25 |

Tables des matières



| | |
|---|-----------|
| II-3-2-1 Les propriétés structurales | 25 |
| II-3-2-2 Les propriétés électroniques | 29 |
| II-3-3 Propriétés optiques | 31 |
| Références | 40 |
| Conclusion Générale | 42 |



La Science dans des matériaux comporte un grand nombre de domaines d'application importants, elle constitue à ce titre un domaine très actif de la recherche et technologie moderne.

Un intérêt tout à fait particulier a depuis longtemps déjà été porté aux semi-conducteurs qui sont rappelés à la base de nombreuses technologies de pointe en électronique, en optique, optronique, électronique quantique et énergie solaire. De ce fait leur rôle dans les futures industries ne cessera de prendre de plus en plus d'importance [1].

Les composés semi-conducteurs sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à la richesse de leurs propriétés structurales, électroniques, optiques et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants optoélectroniques [2].

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs forment une classe bien définie, avec des propriétés physiques spécifiques qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs inséparables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs. Les semi-conducteurs III-V et leurs alliages correspondants occupent actuellement une position privilégiée dans plusieurs domaines d'applications tels que l'optoélectronique. Le domaine de l'optoélectronique a connu un essor considérable grâce à l'utilisation des matériaux semi-conducteurs III-V (GaAs, InP et alliages associés) à gap direct [3].



Notre travail de mémoire est consacré à l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage semi-conducteurs ternaire $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ du type III-V cristallisant dans la structure zinc blende, déposés sur deux substrats InAs et InP.

Pour ce faire, nous avons subdivisé ce travail en deux chapitres:

Après une introduction générale, dans le premier chapitre nous essayerons de donner quelques généralités sur les propriétés physiques des composés binaires.

Le deuxième chapitre représente la partie pratique de ce travail nous exposerons nos résultats correspondants aux propriétés structurales électroniques et optiques des binaires et leurs alliages semi-conducteurs ternaires $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ leur interprétation et leur comparaison aux autres travaux théoriques et expérimentaux.

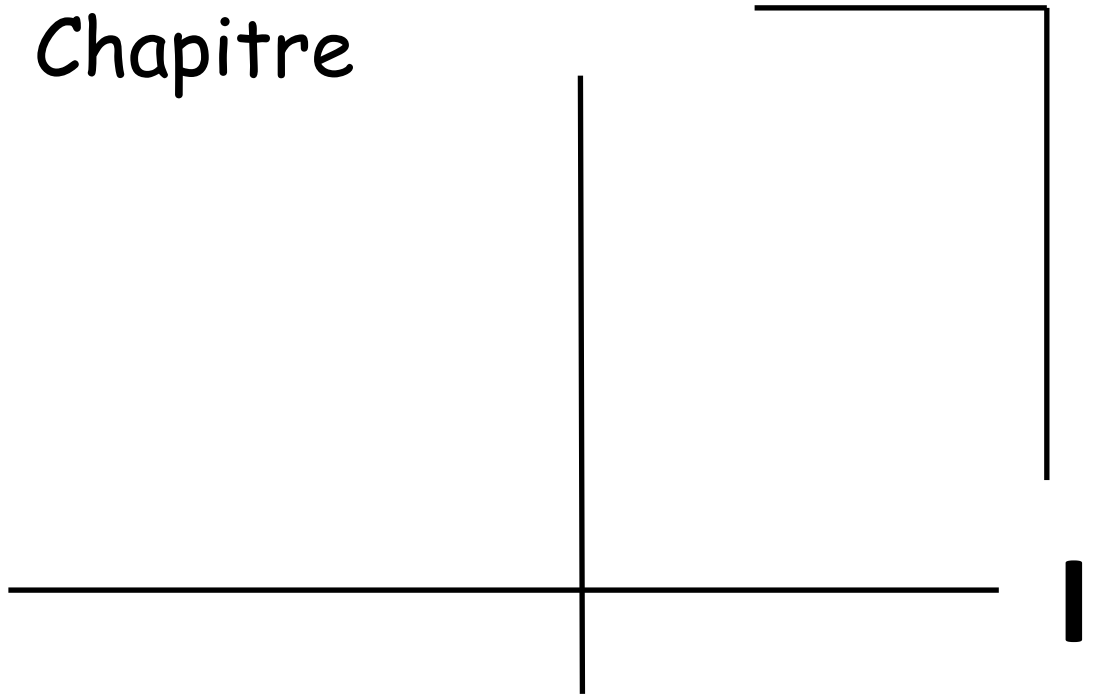
Finalement, nous terminerons par une conclusion générale.



Références

- [1] A. Zaoui. Thèse de magister. Univ Djilali Liabes, Sidi-Bel-Abbes (2000)
- [2] Benatmane Kaled, Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V. Mémoire de magister. Université de Batna, (2011)
- [3] M. BOUANANI, mémoire de Master "Prediction des propriétés structurales et électroniques de phosphure d'indium dope en manganese" Université Dr Moulay Tahar, Saida, (2017)

Chapitre



Généralités sur semi-conducteurs

III-V



I.1 INTRODUCTION

En conséquence des extraordinaires résultats marqués dans la technologie du quatrième élément dans la classification périodique (Silicium) dans le domaine de la microélectronique, la recherche d'autres composants électroniques qui présentant des propriétés de transport excellentes à celles du Silicium, conduit la plupart des grands manufactures et laboratoire de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

Les composées III-V à l'état nanostructure font un sujet de nouveauté vis les multiples applications technologiques, Les alliages de ces semi-conducteurs ont des propriétés qui peuvent être mises à profit pour des applications en micro et nanoélectronique, optoélectronique, ou même photovoltaïque [1].

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

- La modulation de dopage.
- La variation de composition d'un alliage.
- La combinaison des deux méthodes précédentes.

Dans ce chapitre nous allons donner une définition de semi-conducteur et les composés binaires, ternaires et quaternaires. Ainsi que les propriétés structurales, électroniques et optiques d'un semi-conducteur. On le terminera par une petite conclusion.



I-2 DEFINITIONS DES SEMI-CONDUCTEURS III-V

Les matériaux semi-conducteur de type III-V sont composés à partir d'un élément de la 3^{ème} colonne et d'un élément de la 5^{ème} colonne de la classification périodique par exemple: les composé à base d'Aluminium (AlP, AlAs, AlSb), les composé à base de Galium (GaN, GaSb) d'indium (InN, InAs, InSb)

Le tableau suivant regroupe un extrait de la classification périodique de Mendeliv :

Tableau I-1: Extrait de la classification périodique des éléments.

| III | IV | V |
|------------------|------------------|------------------|
| ⁵ B | ⁶ C | ⁷ N |
| ¹³ Al | ¹⁴ Si | ¹⁵ P |
| ³¹ Ga | ³² Ge | ³³ As |
| ⁴⁹ In | ⁵⁰ Sn | ⁵¹ Sb |

I-3 LES COMPOSES BINAIRES, TERNAIRES ET QUATERNAIRES DES SEMICONDUCTEURS III-V

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [2], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour



l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [3].

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Gallium (**GaAs**, **GaSb**) ou d'indium (**InP**, **InAs**, **InSb**) dont les propriétés sont les plus intéressantes [4].

Les alliages semi-conducteurs sont classés en plusieurs groupes suivant le nombre de constituants :

Ternaires : s'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit :

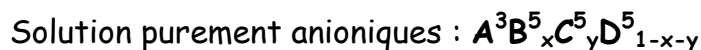


Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x .

Quaternaires 1+3 : s'il y a substitution de 3 atomes sur l'un des sous réseaux, soit :



Solution triangulaires :



Ces alliages sont caractérisés par la présence du coefficient stœchiométrique x et y .



I-4 PROPRIETES STRUCTURAL DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS III-V

I-4-1 Structures cristallines

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée dans la Figure I.1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C), elle est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale, d'une quantité $(a/4, a/4, a/4)$ a étant le paramètre cristallin (paramètre de réseau) c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire.

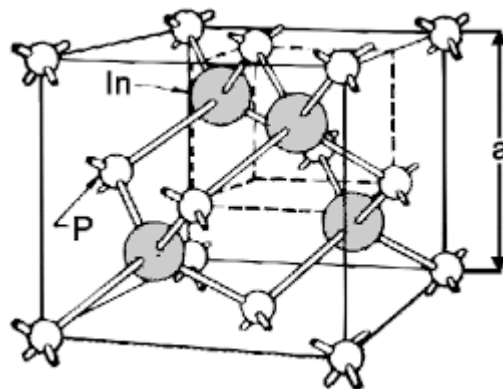


Figure I-1 : Structure cristalline "Zinc Blende"

De ce fait, dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons. Cette composante ionique de la liaison est importante ; elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde [5].



I-4-2 Constante du réseau

En cristallographie, la constante de réseau (souvent notée a) définit la distance entre atomes dans les réseaux cristallins [6]. Les expériences révèlent que la constante du réseau de l'alliage (ternaire, quaternaire) est donnée par les concentrations moyennes de leurs composés binaires. Cette constante suit la loi de Vegard [7].

Tableau I-2 : Paramètre de maille et la structure cristalline des semi-conducteurs III-V.

| Matériau | $a(\text{Å})$ | Structure |
|----------|---------------|-------------|
| GaP | 5,4508 | Zinc blende |
| GaN | 3,1896 | Zinc blende |
| GaAs | 5,65330 | Zinc blende |
| InN | 3,548 | Wurtzite |
| InP | 5,8690 | Zinc blende |
| InSb | 6,47937 | Zinc blende |
| InAs | 6,0583 | Zinc blende |

La constante est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (**AC** et **BC**) lui formant l'alliage

Alliage ternaire anionique $A^3B^5C^5_{1-x}$

$$a(x) = x \cdot a_{AB} + (1-x) \cdot a_{AC} \tag{I-1}$$

Alliage ternaire cationique $A^3_x B^3_{1-x} C^5$

$$a(x) = x \cdot a_{AC} + (1-x) \cdot a_{BC} \tag{I-2}$$



Alliage quaternaire quadratique $A^3_{1-x}B^3_xC^5_yD^5_{1-y}$

$$a(x,y) = x \cdot (1-y) \cdot a_{BD} + (1-x) \cdot y \cdot a_{AC} + x \cdot y \cdot a_{BC} + (1-x) \cdot (1-y) \cdot a_{AD} \quad (I-3)$$

Alliage quaternaire triangulaire purement anionique $A^3B^5_xC^5_yD^5_{1-x-y}$

$$a(x,y) = x \cdot a_{AB} + y \cdot a_{AC} + (1-x-y) \cdot a_{AD} \quad (I-4)$$

Alliage quaternaire purement cationique $A^3_xB^3_yC^3_{1-x-y}D^5$

$$a(x,y) = x \cdot a_{AD} + y \cdot a_{BD} + (1-x-y) \cdot a_{CD} \quad (I-5)$$

$a(x)$: est la constante de réseau de l'alliage ternaire.

$a(x,y)$: est la constante de réseau de l'alliage quaternaire.

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

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

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

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

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

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

I-4-3 Réseaux réciproques

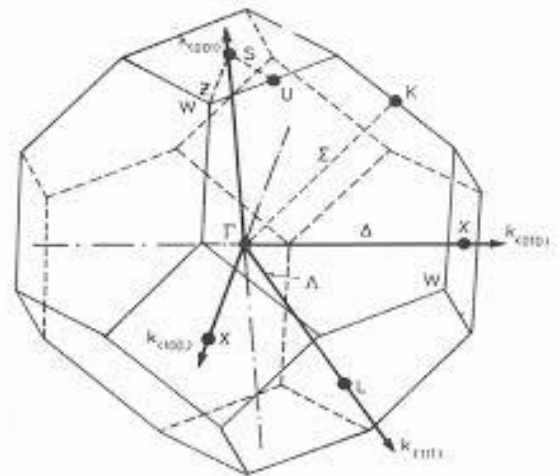
Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire qui correspond à la première zone de Brillouin a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (figure I-2).



Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et des axes de symétrie :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ).
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ).
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ).

Figure I-2 : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende.



Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

I-5 PROPRIETES ELECTRONIQUES DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS III-V

I-5-1 Gap énergétique

Un matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande[8]:



- La bande de valence: c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.
- La bande de conduction : est définie comme le premier niveau énergétique au-dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.
- La bande interdite : cette bande représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction.

La figure I.3 présente la structure de bande d'énergie.

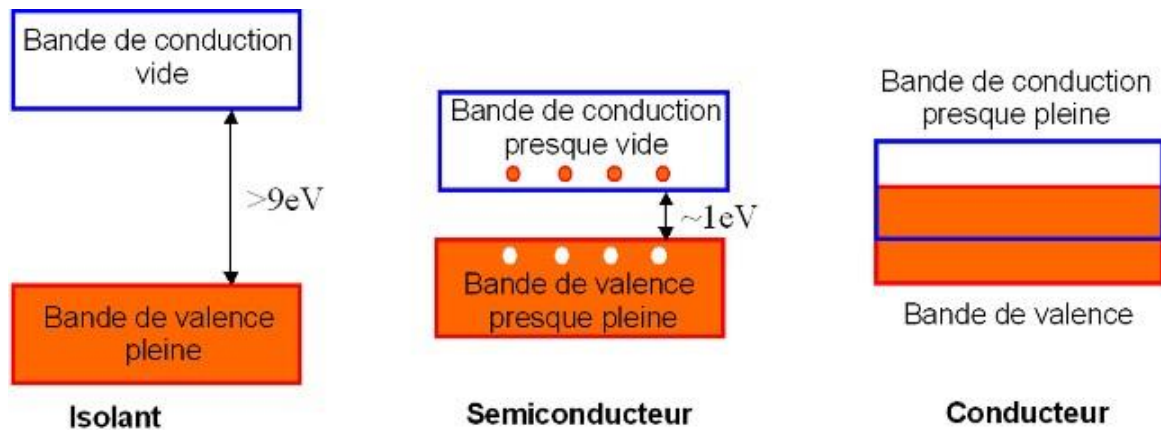


Figure I-3 : Représentation des bandes d'énergie

Le gap énergétique $E_g(x)$ de l'alliage ternaire est donné par :

$$E_g(x) = \overline{Eg(x)} + bx \cdot (1-x) \quad (\text{I-6})$$

$$\overline{Eg(x)} = x \cdot E_{AC} + (1-x) E_{BC} \quad (\text{I-7})$$

$\overline{Eg(x)}$ La moyenne des gaps d'énergie.

Avec : E_{AC} est le gap du composé AC.

E_{BC} est le gap du composé BC.

b est le paramètre de courbure optique (souvent positif)

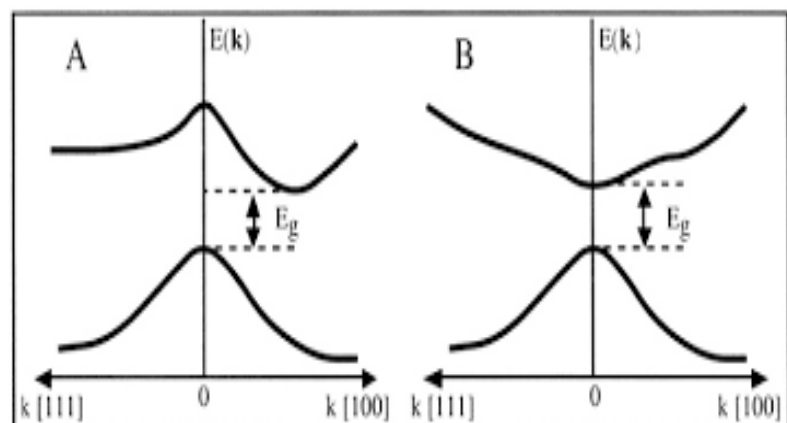


I-5-2 Gap direct et gap indirect

Les semi-conducteurs à gap indirect, dont lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents de l'espace des k et les semi-conducteurs à gap direct pour lesquels ces extrema sont situés au même point de l'espace des k (au centre de la zone de Brillouin, en $k=0$) [9].

Dans les semi-conducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Par contre ceux qui ont un gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité.

Figure I.4 :
Structure de bande
d'énergie du : A-gap
indirect et B-gap direct



I-6 PREMIERE ZONE DE BRILLOUIN

Par définition, la maille primitive de Wigner-Seitz du réseau réciproque est appelée première zone de Brillouin. Les termes «maille de Wigner-Seitz» et «première zone de Brillouin» se réfèrent à des constructions géométriques identiques, en pratique, le dernier terme n'est appliqué qu'à la maille de l'espace des k [10].



La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué (figure I-5).

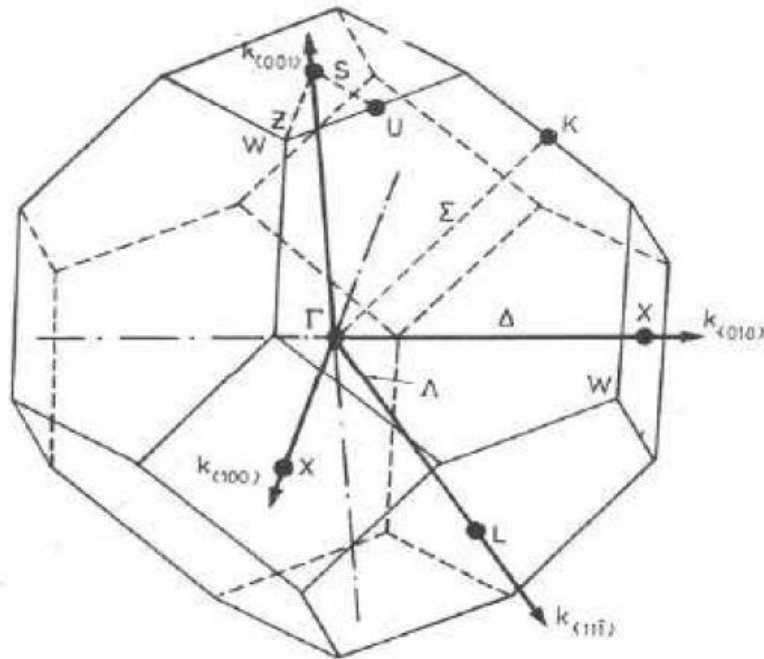


Figure I.5 : Première zone de Brillouin de la structure Rock-Salt avec la représentation des points et lignes de hautes symétries

✓ Les points de haute symétrie

Les points de haute symétrie sont les suivant:

Γ : Ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_{\Gamma}(0,0,0)$

X : Ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes k_x, k_y, k_z avec l'une des faces carrées, nous avons donc:

$$K_x = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, 0)$$

$$K_y = \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1, 0)$$



$$K_z = \frac{2\pi}{a}(0,0,\pm 1)$$

L: ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont :

$$K_L = \frac{2\pi}{a}(1,1,1)$$

W: ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées. Les coordonnées sont :

$$K_W = \frac{2\pi}{a}(0,1/2,0)$$

Z: ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées

$$K_Z = \frac{2\pi}{a}(1,1/2,1)$$

✓ Les lignes de haute symétrie

Δ : Cette ligne représente la direction $\langle 1.0.0 \rangle$. Elle relie le centre Γ au point X

Σ : C'est un point appartenant au plan de symétrie $K_x=K_y$ ou $K_y=K_z$ ou $K_x=K_z$

Λ : Cette ligne est la direction $\langle 1.0.0 \rangle$.

Elle relie le centre de la zone (Γ) ou centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre.

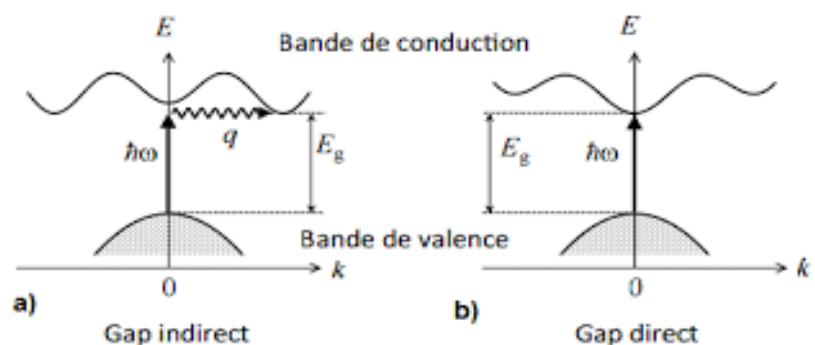
I -7 PROPRIETES OPTIQUES DES ALLIAGES SEMI-CONDUCTEURS III-V

Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont intimement liées à leur structure électronique dans la mesure où elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques [11].



L'interaction d'un électron avec un photon se fait, comme toute interaction, avec conservation de l'énergie et du vecteur d'onde. Les transitions optiques directes entre les extrêmes des bandes de valence et de conduction apparaissent verticales radiatives dans le diagramme de bande des électrons. Dans le cas d'un semi-conducteur à bande interdite indirecte, les transitions optiques à travers le gap ne peuvent avoir lieu que grâce à une interaction supplémentaire: transitions obliques (non radiatives). (Figure I-6)

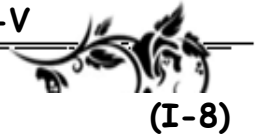
Figure I-6 :
Transitions optiques directes et indirectes



Cette étude devient très intéressante, pour cela la connaissance des propriétés optiques est d'une importance majeure dans l'analyse de la conception des dispositifs optoélectroniques.

I -7-1 L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est un nombre qui caractérise le pouvoir qu'un matériau à posséder pour ralentir et à dévier la lumière. Cet indice de réfraction (noté n) est le rapport entre la vitesse de la lumière dans le vide ($c=299\,792\text{ Km/s}$) et la vitesse de la lumière dans le matériau, on peut exprimer l'indice de réfraction sous une forme complexe comme suite [12].



$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$$

(I-8)

$n(\omega)$: Etant l'indice de réfraction réelle.

$ik(\omega)$: Est l'indice d'atténuation appelé aussi coefficient d'extinction.

Tableau I-3: Indice de réfraction de quelques matériaux semi-conducteurs à $T=300\text{K}$

| Matériau | n |
|----------|------|
| GaP | 2.92 |
| InP | 3.1 |
| GaAs | 3.3 |
| InAs | 3.5 |

I -8 PHOSPHORE D'INDIUM

Le phosphore d'indium est un composé inorganique de formule InP. C'est un semi-conducteur binaire de type **III-V**, constitué d'indium et de phosphore. Il possède une structure cubique à faces centrées (cfc) de chacun des deux composants imbriquées et décalées d'un vecteur $(1/4;1/4;1/4)$. Les propriétés physiques de l'InP telles que : l'énergie de gap 1.42 eV [13], la mobilité des électrons $5400 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, paramètre de maille 5.869 \AA [14], le point de fusion 1062°C , la conductivité thermique 0.68 W/cm.K , l'indice de réfraction (de 3.1 à 3.55).

Notamment, le phosphore d'indium est distingué par leur grande mobilité électronique et leur bande interdite direct. Sa grande mobilité électronique permet d'obtenir des dispositifs à haut rapidité de commutation en électronique. Ces propriétés, commun à la plupart des matériaux **III-V** sont très prisées dans l'élaboration de dispositif optoélectroniques, comme par exemple dans la



fabrication des diodes laser. L'amélioration des techniques de croissance de semi-conducteur a rendu accessible une panoplie de composée III-V de paramètre de maille, d'énergie de bande interdite et de composés chimique varie. Cette vaste gamme de propriétés permet de fabriquer des hétérostructures émettant aux longueurs d'onde de télécommunication. Celles-ci choisies en raison des pertes en transmission des fibres optiques [15].

I -9 ARSENIURE D'INDIUM

L'arséniure d'indium est un composé inorganique de formule InAs. C'est un semi-conducteur binaire de type III-V, constitué d'indium et d'arséniure. Ils sont assez similaires à l'arséniure de gallium et les propriétés en sont assez proches, il possède un gap direct. Les propriétés physiques de l'InAs telles que: L'énergie de gap 0.354 eV [16], la mobilité des électrons 40000 cm²/V.s paramètre de maille 6,036 Å [17], l'indice de réfraction 3.52 [18], la conductivité thermique 0.30W/cm.K [19].

Il possède une mobilité électronique élevée, il peut s'avérer un matériel important pour l'utilisation dans l'électronique à grande vitesse [20,21]. Il a des propriétés supérieures pour la fabrication des appareils de haute fréquence et des émetteurs de photons et autres applications comme les télécommunications à fibre optique, les diodes lasers, les diodes électroluminescentes (Light Emitting Diodes LED), les circuits intégrés et les photo-détecteurs [16,22]

I -10 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons regroupé quelques propriétés générales des matériaux semi-conducteurs. La connaissance de ces propriétés représente un intérêt fondamental dans la détermination des structures électroniques et atomiques de ces semi-conducteurs.



Référence :

- [1] A. LOUAZANI, Thèse de Master "Etudes des propriétés structurales élastiques et électroniques, des semi-conducteur III-V GaAs, InP ", Université Dr. Taha Moulay, Saida, (2014, 2015)
- [2] R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique technologie et règle de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989)
- [3] S. Laval. Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique (2002)
- [4] M. BENAICHA, Thèse de Magister "Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque", Université Colonel Hadj Lakhdar, Batna, (2007)
- [5] Francis Levy. Traité des matériaux (18). Physique et technologie des semi-conducteurs. Presses polytechniques et universitaires Romandes (1995)
- [6] BECHIRI. Abderrachid. Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V. Thèse doctorat. Université mentouri. UMC (ALGERIE). 2006
- [7] L. Vegard, Z. Phys. 5, 17 (1961)
- [8] C. Kittel, physique de l'état solide, édition Dunod, Paris (1998)
- [9] Nawal. BAGHDADLI étude des propriétés optoélectroniques des semi-conducteur III-Va base de Gallium. Thèse magister. Tlemcen. 2009
- [10] Nawal. BAGHDADLI. Evolution Du paramètre exciton de BOHR EN FONCTION DES propriétés Optoélectroniques des semi-conducteurs III-V. Thèse doctorat

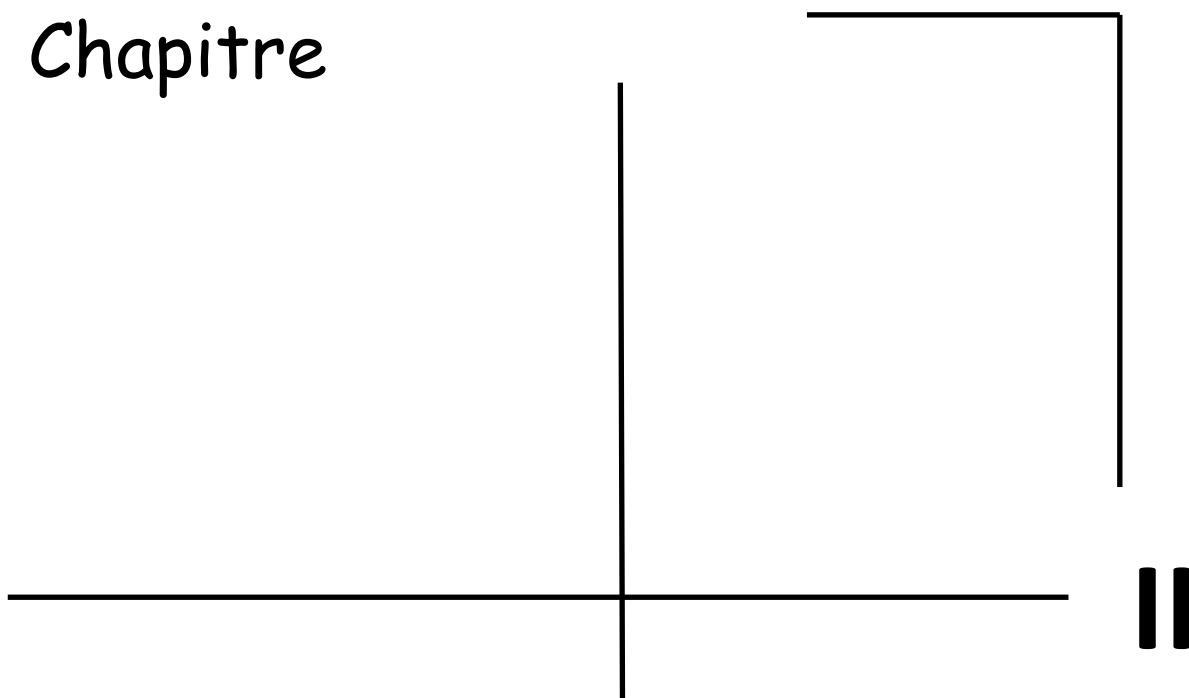


- [11] N. W. Ashcroft, N. David Mermin, physique des solides, édition original Saunders College publishing (1976)
- [12] O. BAHY, Mémoire de Master "les semi-conducteur binaires utilisés dans les composants optoélectronique". Université KASDI MERBAH, OUARGLA, (2013 2014)
- [13] S. Adachi, "Properties of Group- IV, III-V and II-VI semi-conductor" Wiley, chichester, (2005)
- [14] R. W. G. Wyckoff, Crystal structures, second ed, Krieger, Malabar. 1986
- [15] M. Kutz, Handbook of Materials Selection (John Wiley & Sons, New York) chap. 43, P. 1307
- [16] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, Band parameter for III-V compound semi-conductors and their alloys, J. Appl. Phys. Vol.89, 2001, PP. 5815
- [17] R. Ahmed, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed, F. e-Aleem, Ab initio Study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds, Computational Materials Science, Vol. 39, 2007, PP. 580-586
- [18] J. Piprek, Semi-conductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation, Ed. Elsevier Science (2003)
- [19] S. Adachi, Proprieties of semi-conductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semi-conductors, Ed. John Wiley & Sons (2009)
- [20] L. F. Luo, R. Beresford and W. I. Wang, Appl. Phys. Lett. 53 (1998) 2320
- [21] C. R. Bolognesi, M. W. Dvorak, D. H. Chow and J. Vac, Sci. Technol. A 16 (1998) 843



[22] S. Augy, C. Guerin and J. Lamour, Atelier Santé Environnement-ENSP-
(2006).

Chapitre



RESULTATS ET DISCUSSIONS



II.1 INTRODUCTION

Le travail réalisé dans cette thèse est l'étude des propriétés structurales, électroniques et optiques de l'alliage semi-conducteur $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$).

Pour faire notre calculs on utilise la méthode FP-LAPW (ondes planes augmentées linière) basé sur la DFT et les calculs ont été effectuées dans ce travail avec le logiciel Wien2K. L'énergie d'échange et de corrélation et déterminée par l'approximation GGA.

II.2 Détails de calcul

Dans ce travail, les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) [1] implémentée dans le code Wien2K [2]. La contribution de l'échange et la corrélation a été décrite par l'approximation du gradient généralisé (GGA) telle que développée par Perdew Burke et Ernzerhorf [3]. Cependant pour les propriétés électroniques. Dans la méthode FP-LAPW l'espace est divisée en deux régions, une interstitielle (IR) et une seconde composée de sphères de rayons R_{MT} (Rayon Muffin-Tin) entourant les sites atomiques.

Les valeurs des rayons muffin-tin R_{MT} et le nombre des points K spéciaux de la zone irréductible de Brillouin pour les différentes binaires pour la structure Zinc Blende, sont représentées dans le tableau (II-1)

Tableau II-1: Rayons muffin-tin R_{MT} et le nombre des points K

| Binaires | Nombres des points K | R_{MT} (Bohr) | |
|----------|----------------------|------------------------|---------|
| InAs | 500 | In=2.4 | As=2.28 |
| InP | 500 | In=2.5 | P=1.98 |



II.3 RESULTATS ET DISCUSSIONS

II.3.1 Composés binaires

II.3.1.1 Propriétés structurales

Structure cristallographie des composés: InAs et InP, se cristallisent dans la phase stable zinc blende 216_F_43m.

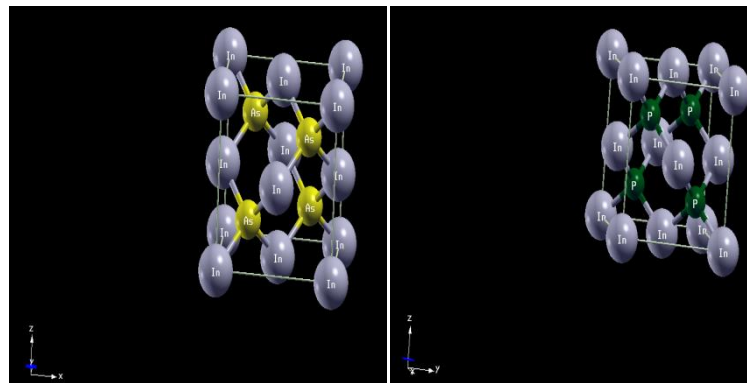


Figure II-1 : Représente les structures d'InAs et InP zinc blende positions atomiques In en (0, 0,0), As et P (1/4,1/4,1/4)

Dans cette première partie, l'étape la plus importante pour développer les calculs qui suivent, car les autres propriétés dépendent du paramètre cristallin optimisé.

Cette étape consiste à déterminer le paramètre du réseau à l'équilibre (a), le module de compressibilité (B) et sa dérivée par rapport à la pression (B') on a effectué un calcul auto-cohérent de l'énergie totale pour différentes valeurs du paramètre du réseau prises au voisinage du paramètre expérimental.

Les propriétés structurales ont été déterminées en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume par l'équation de Murnaghan [4] donnée par :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{BV}{B'(B'-1)} \right] \times \left[B' \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (\text{II-1})$$



E_0 et V_0 sont l'énergie et le volume d'équilibre. B et B' , le module de compressibilité et sa dérivée par rapport à la pression.

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

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{II-2})$$

La dérivée du module de compressibilité B' est donnée par relation qui suit :

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (\text{II-3})$$

Le paramètre du réseau d'équilibre (a) pour InAs et InP est donné par le minimum des courbes obtenues de la variation de l'énergie totale d'InAs et InP en fonction du volume avec l'approximation *GGA*, Figure II-2, Figure II-3 respectivement

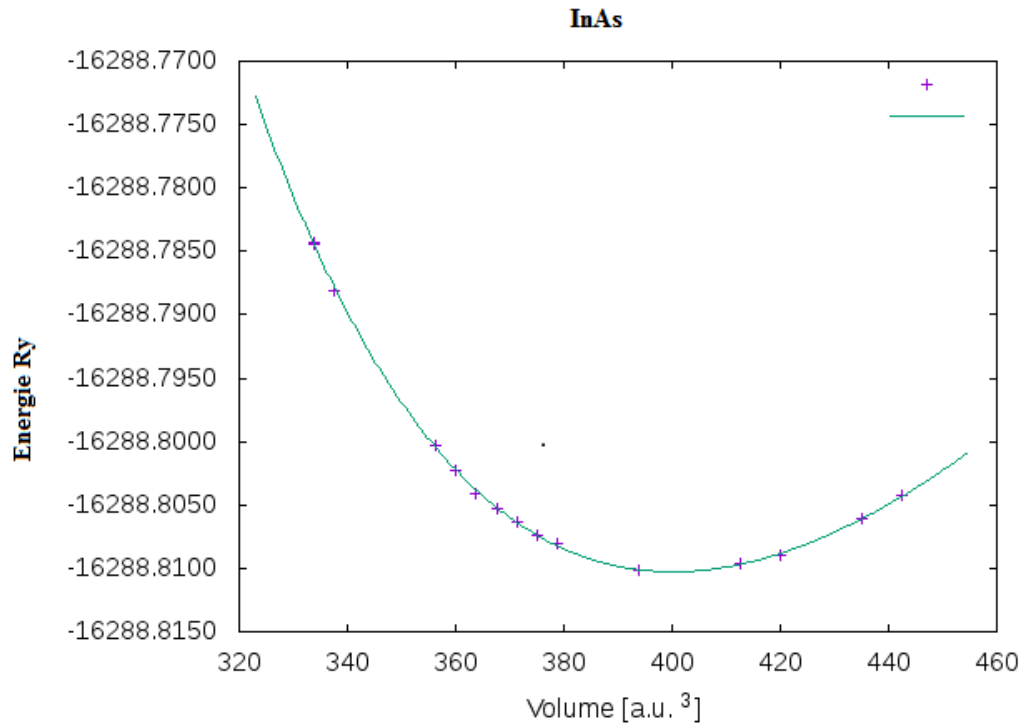


Figure II-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'InAs en phase zinc blende avec l'approximation GGA

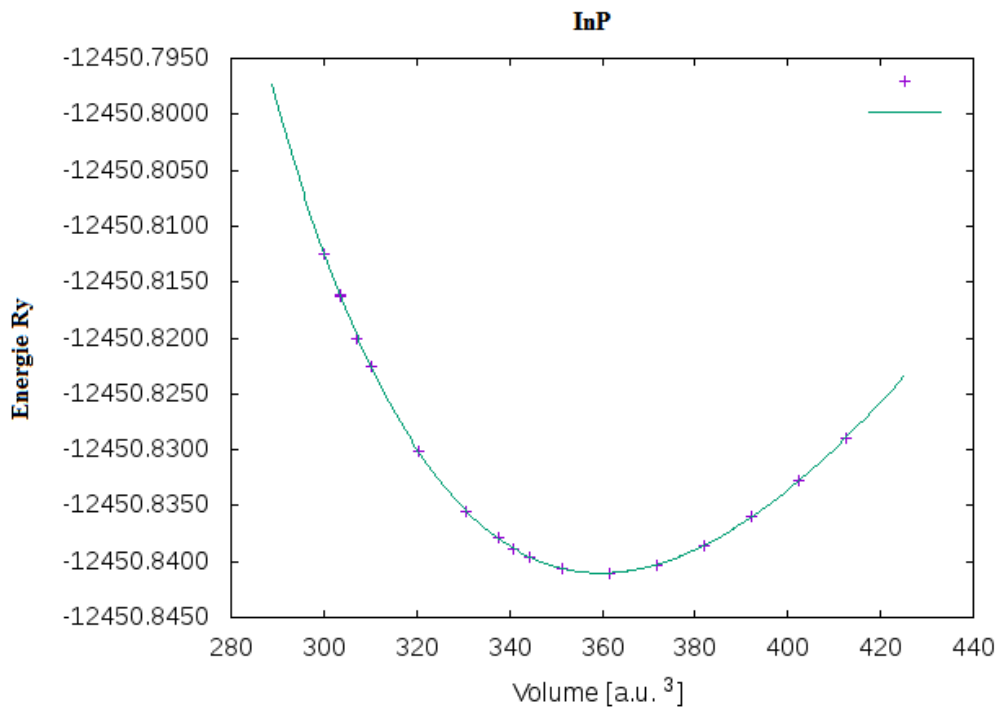


Figure II-3 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l'InP en phase zinc blende avec l'approximation GGA



Le paramètre du réseau, le module de compressibilité ainsi que sa dérivée des composées InAs et InP dans la structure Zinc Blende présentés et comparés avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques dans le Tableau II-2. Les calculs sont effectués en utilisant l'approximation *GGA* de Cohen. La détermination de ces paramètres permet d'accéder par la suite aux autres propriétés électroniques et optiques.

Tableau II-2 : Paramètre de réseau (a) et le module de compression B et sa dérivée B' pour InAs et InP dans la phase Zinc Blende

| | | Notre calcul | Travaux expérimentaux | Autres calculs |
|------|-----------------|--------------|-----------------------|--------------------|
| | | <i>GGA</i> | | |
| InAs | $a(\text{Å})$ | 6.190 | 6.036 [5, 6] | 6.0911[7] 6.015[8] |
| | $B(\text{GPa})$ | 47.45 | 58 [5] | 55.120[7]60.3 [8] |
| | B' | 4.93 | 4.79 [5] | 4.734 [7]4.9 [8] |
| InP | $a(\text{Å})$ | 5.974 | 5.869[6] | 5.981[9]5.968 [10] |
| | $B(\text{GPa})$ | 59.152 | 72[6] | 59.85 [9] 62 [10] |
| | B' | 4.7137 | | 5.18 [9] 4.04 [10] |

En confrontant nos valeurs optimisées à celles disponibles dans la littérature, on voit bien que celles-ci concordent bien avec les résultats théoriques. Cependant comparativement aux résultats expérimentaux, nous rencontrons le comportement bien connu de l'approximation *GGA* qui sur estime les constants du réseau par rapport à celles trouvées expérimentalement. Cette sur estimation est de l'ordre de 0.016% et 1.78% pour InAs et InP respectivement. Globalement nous pouvons dire que cette approximation choisie nous a donné des résultats concordant bien avec les mesures expérimentales et les résultats théoriques obtenus par d'autres travaux utilisant différentes



méthodes DFT. Nous remarquons une bonne concordance de nos résultats avec les autres travaux théoriques.

II.3.1.2 Propriétés électroniques

La structure de bande électronique des composés InAs et InP dans la phase Zinc blende avec l'approximation *GGA*. Les courbes (Figure II-3 (a et b)) représentent l'énergie le long des lignes de haute symétrie dans la première zone de Brillouin de InAs et InP, respectivement

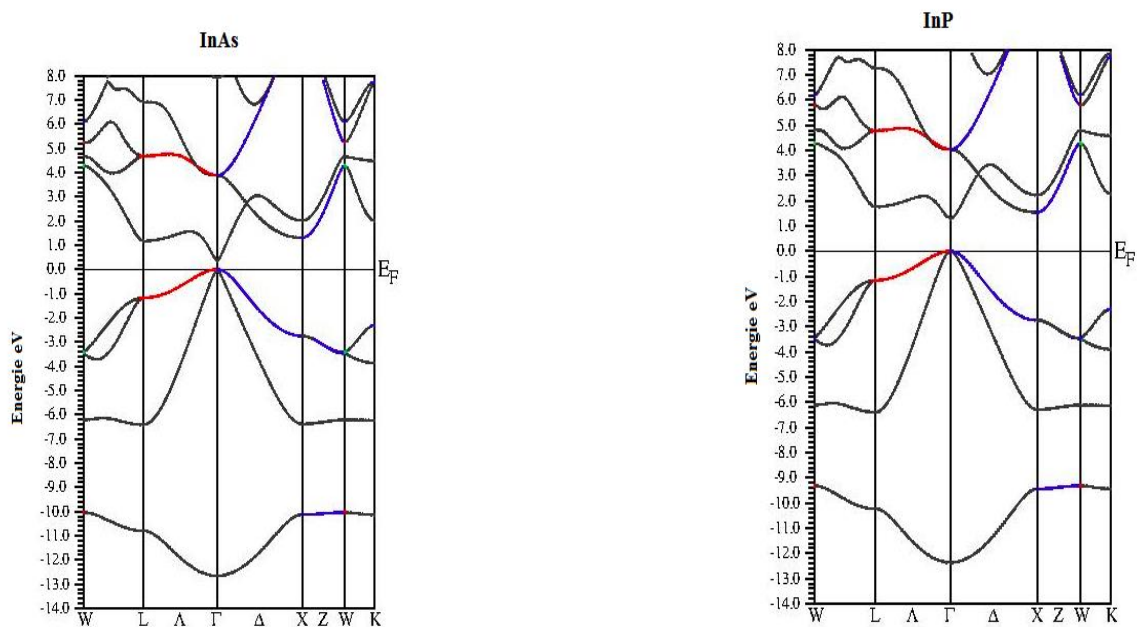


Figure II-4 : Structures de bandes d'InAs et InP, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Le gap d'énergie est la différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. Dans notre étude, nous avons trouvé que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouvent au point de symétrie Γ pour InAs et InP. Donc, ces composés possèdent une transition directe (gap direct).



Nos résultats sont comparés avec des données expérimentales et théoriques disponibles dans le tableau II-3. On notera que les résultats obtenus par l'approximation *GGA* sont en accord avec d'autres résultats trouvés dans la littérature et en désaccord avec ceux de l'expérience. Les approximations *GGA* généralement sous-estiment les gaps d'énergie.

Tableau II-3 : Gap direct $E_g(\Gamma-\Gamma)$ pour InAs et InP dans le phase zinc blende

| | | Notre calcule <i>GGA(WC)</i> | Autre calcule | Travaux expérimentaux |
|------|----------------------------|---------------------------------|---------------------|--------------------------|
| InAs | $E_{g(\Gamma-\Gamma)}(eV)$ | 0,34 | 0.4 [11] 0.349[12] | 0.42[13] 0.359[14] |
| InP | $E_{g(\Gamma-\Gamma)}(eV)$ | 1,298 | 1.377[15] 1.35 [16] | 1.423 [17] |

II.3.2 L'alliage $InAs_{(1-x)}P_x$

II.3.2.1 : les propriétés structurales:

Nous avons calculé les propriétés structurales des composés ternaires $InAs_{(1-x)}P_x$ dans la structure zinc blende en utilisant (*GGA*). L'optimisation du volume a été effectuée par minimisation de l'énergie totale par rapport au volume de la maille, en utilisant l'équation d'état de Murnaghan [18]. Le paramètre du réseau d'équilibre (a) pour $InAs_{(1-x)}P_x$ est donnée par le minimum des courbes obtenues de la variation de l'énergie $InAs_{0.75}P_{0.25}$, $InAs_{0.50}P_{0.50}$ et $InAs_{0.25}P_{0.75}$ en fonction du volume avec l'approximation *GGA* dans les figures II-4, II-5 et II-6 respectivement.

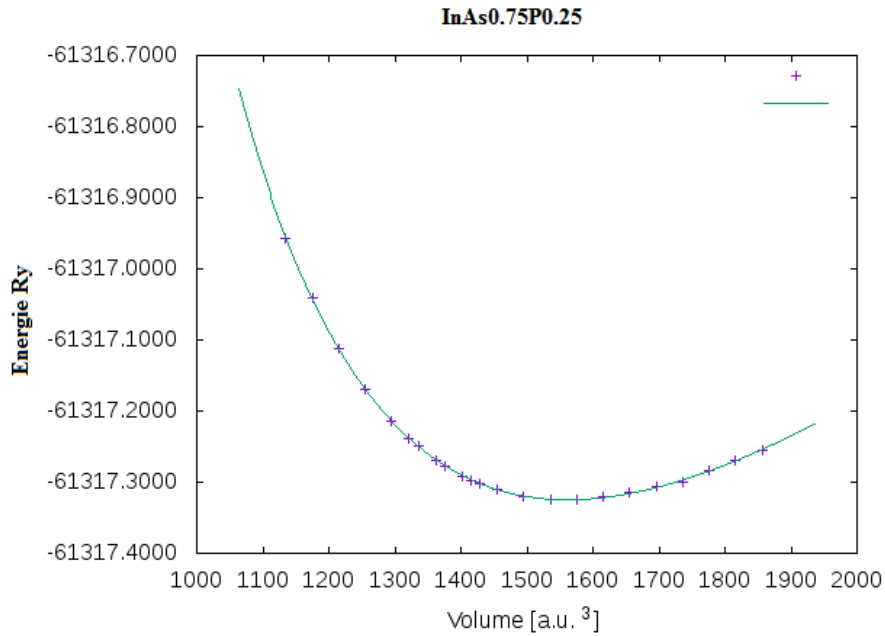


Figure II-5 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

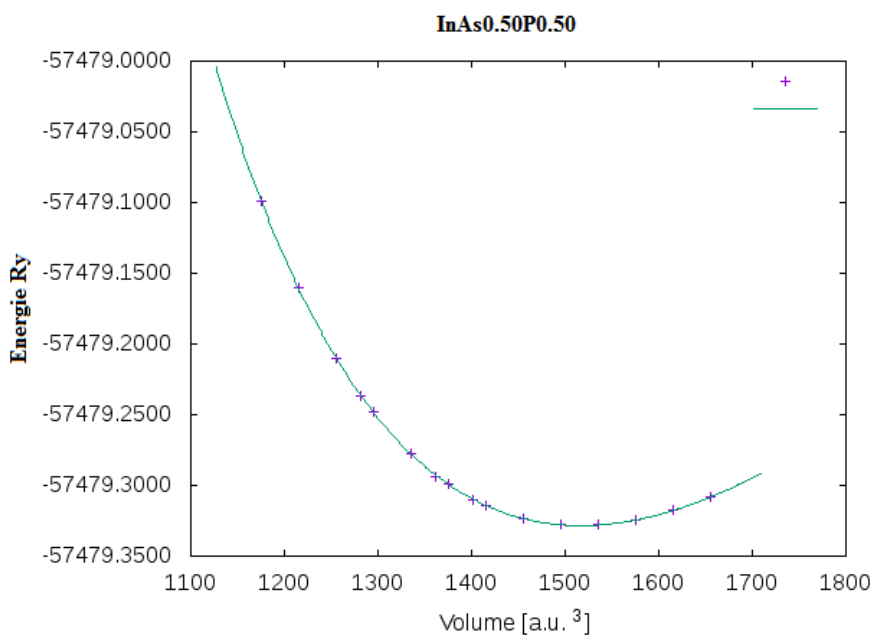


Figure II-6 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

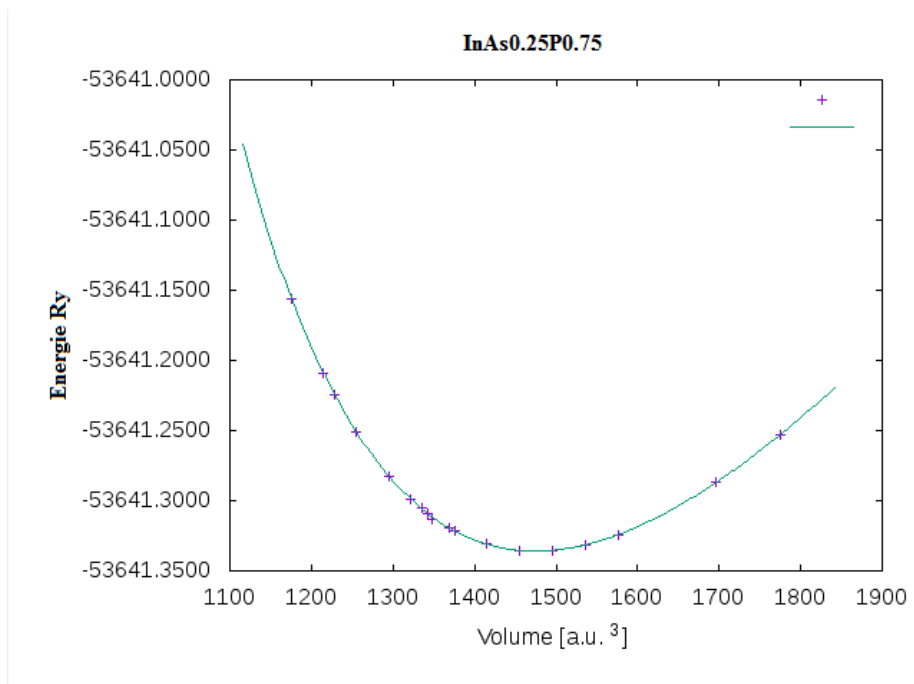


Figure II-7 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de l' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende avec l'approximation *GGA*

A cet effet, les paramètres de structure à l'équilibre, tels que le paramètre du réseau, module de compressibilité B et sa dérivée B' ont été affichés dans le tableau II-3



Tableau II-4: Paramètre de réseau (a) et le module de compression B et sa dérivée B' pour $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$.

| | | Notre calcul GGA | Autre calculs |
|--|--------|---------------------|-------------------------------|
| InAs _{0.75} P _{0.25} | a(Å) | 6.1389 | 6.1360 ^a |
| | B(Gpa) | 50.776 | |
| | B' | 4.3737 | |
| InAs _{0.50} P _{0.50} | a(Å) | 6.079 | 6.0821 ^a 5.98 [14] |
| | B(Gpa) | 54.508 | 61.239[14] |
| | B' | 4.331 | 4.6824 [14] |
| InAs _{0.25} P _{0.75} | a(Å) | 6.02 | 6.0282 ^a |
| | B(Gpa) | 55.737 | |
| | B' | 4.644 | |

a: notre travail en utilisant la loi de Vegard

la constante de réseau de l'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ et généralement exprimée sous une relation linéaire (loi de Vegard) [19] de (x) concentration comme indiqué dans l'équation suivante :

$$a(x) = x a_{AC} + (1-x) a_{BC} \quad \text{(II-4)}$$

La figure II-7 représente la variation de paramètre de réseau en fonction de la concentration (x), nos résultats sont en bon accord avec les résultats calculés par la loi de vegard

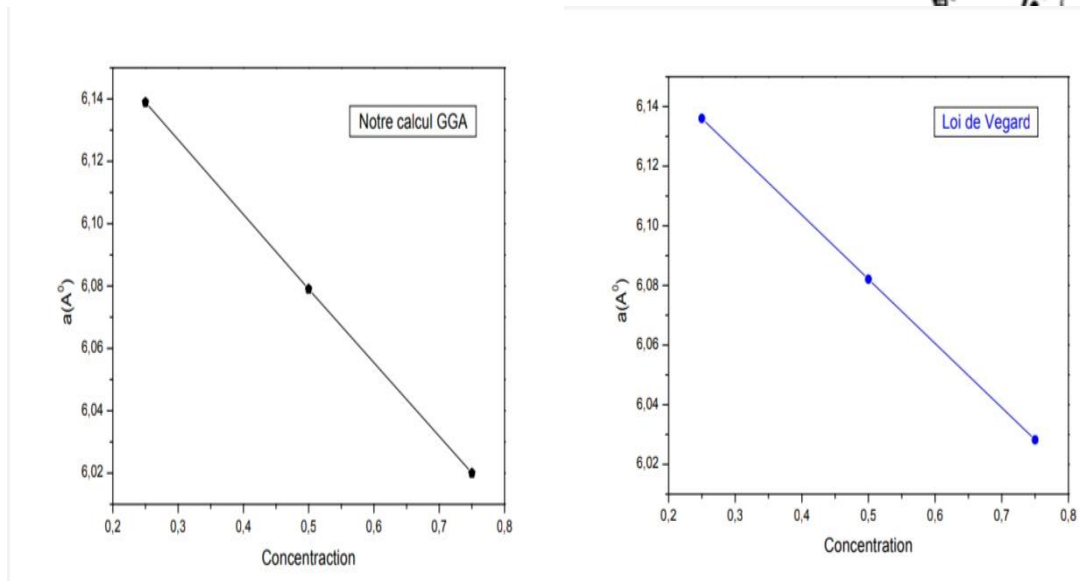


Figure II-8 : Variation de paramètre de réseau en fonction de la concentration (x)

II.3.2.2 : les propriétés électroniques:

L'énergie de transition directe $E_{\Gamma-\Gamma}$ d'alliage ternaire $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ ont été calculée par l'approximation (GGA). Les structures de bandes le long des directions de hautes symétries dans la zone de Brillouin pour les ternaires $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$, sont calculées aux paramètres de mailles d'équilibres et sont représentées dans les figure II-5, II-6 et II-7. Les résultats obtenus de l'énergie de gap sont comparés avec quelles que valeurs théoriques rencontrés dans la littérature et sont regroupés dans le tableau II-5 .En raison du fait que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouvent au même point de haute symétrie Γ , donc les alliages obtenus sont des semi-conducteurs à transition directe (gap direct). Les valeurs des énergies de gap direct montrent une légère augmentation lorsque l'atome P se déplace vers les concentration $x=0.25, 0.5, 0.75$ dans l'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$.

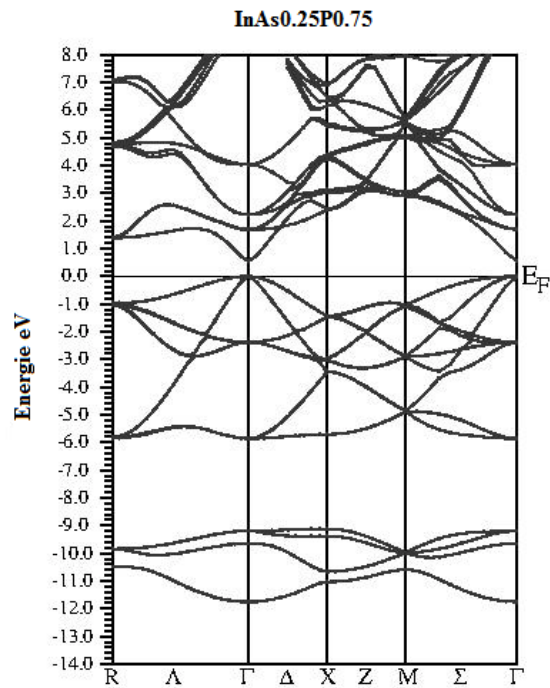


Figure II-9 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

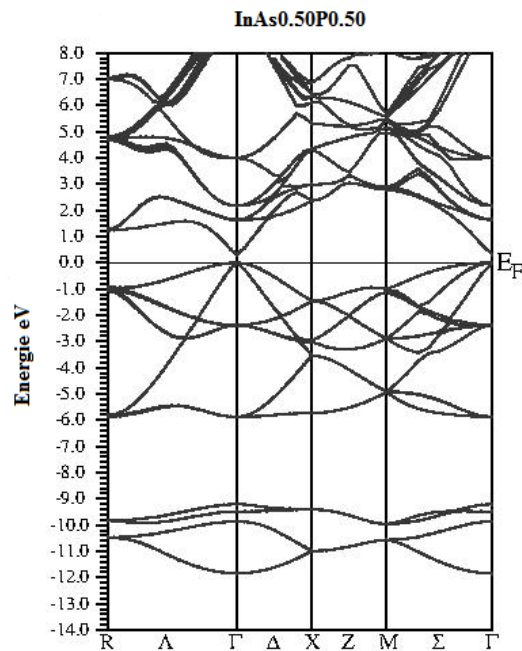


Figure II-10 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

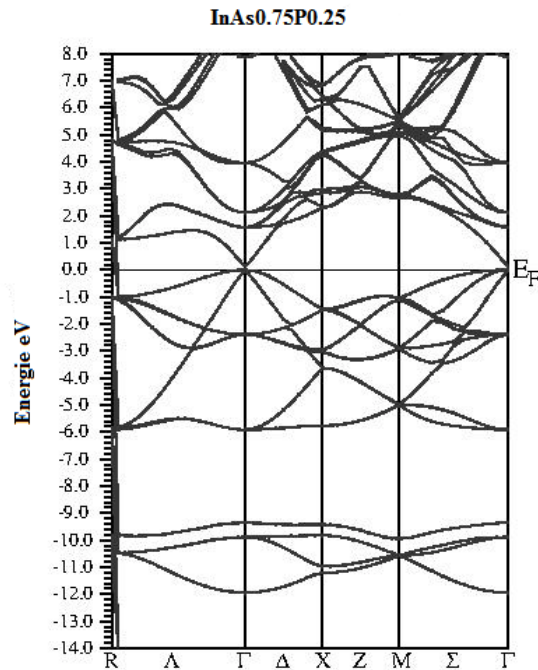


Figure II-11 : Structures de bandes d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$, en phase zinc blende obtenue par l'approximation *GGA*

Tableau II-5: Gap direct $E_{g(\Gamma-\Gamma)}$ $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$

| | | Notre calcule <i>GGA</i> | Calcule par la loi de Vegard |
|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------|---------------------------------|
| $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ | $E_{g(\Gamma-\Gamma)}(\text{eV})$ | 0.96 | 0.5795 ^a |
| $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ | $E_{g(\Gamma-\Gamma)}(\text{eV})$ | 1.075 | 1.1964 [14] 0.819 ^a |
| $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ | $E_{g(\Gamma-\Gamma)}(\text{eV})$ | 1.230 | 1.0585 ^a |

a: notre travail en utilisant la loi de Vegard

II.3.3 : Propriétés optique

La connaissance précise des propriétés optiques est nécessaire pour une compréhension des matériaux et de leurs applications en optoélectronique. Récemment, il a été montré que dans les solides, sous l'influence des photons, la



répartition des électrons parmi leurs états d'énergie quantifiés est transitoirement modifiée. La compréhension de ces effets a des conséquences importantes d'un point de vue aussi bien technologique que fondamentale. En effet, on arrive à exploiter les propriétés optiques des cristaux semi-conducteurs qui permettent la réalisation des composants optoélectroniques lesquels servent à la fabrication de détecteurs de lumière, de diodes émettrices de lumière et de cellules solaires [20]. A cet égard, nous avons étudié les propriétés optiques de l'alliage ternaire $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ ($x=0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$). Les fonctions optiques de l'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ sont obtenues à partir de la fonction diélectrique complexe $\varepsilon(\omega)$, qui est utilisée pour décrire le comportement d'un cristal soumis à champ électromagnétique. Elle met à contribution une partie réelle $\varepsilon_1(\omega)$ et une autre imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{II-5})$$

La partie réelle de la fonction diélectrique, $\varepsilon_1(\omega)$ est donnée par la transformation de Kramers-Kronig [21, 22]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{II-6})$$

La connaissance des deux parties réelle $\varepsilon_1(\omega)$ et imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique nous permet de déterminer d'autres constantes optiques importantes.

La figure II-12, II-13 montrent que le passage de la partie réelle et la partie imaginaire de la fonction diélectrique pour le binaire InAs et InP de la structure zinc blende. La partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon_1(\omega)$ diminue



lorsque l'énergie augmente à partir de 1.59 eV pour atteindre une valeur négative à 2.20 eV pour InAs et de 1.82 eV à 2.90 eV pour InP, avec la constante diélectrique $\epsilon_1(0)$ statique égale à 4.64, 4.88 eV pour InAs et InP respectivement, alors que la partie imaginaire augmente tout à coup lorsque l'énergie augmente à partir d'un point de seuil d'absorption à 1.10 eV, 0.28 eV jusqu'à un pic principal à 4.96 eV, 4.56 eV pour InP et InAs respectivement, les énergies de ces pics sont reliées à la transition direct.

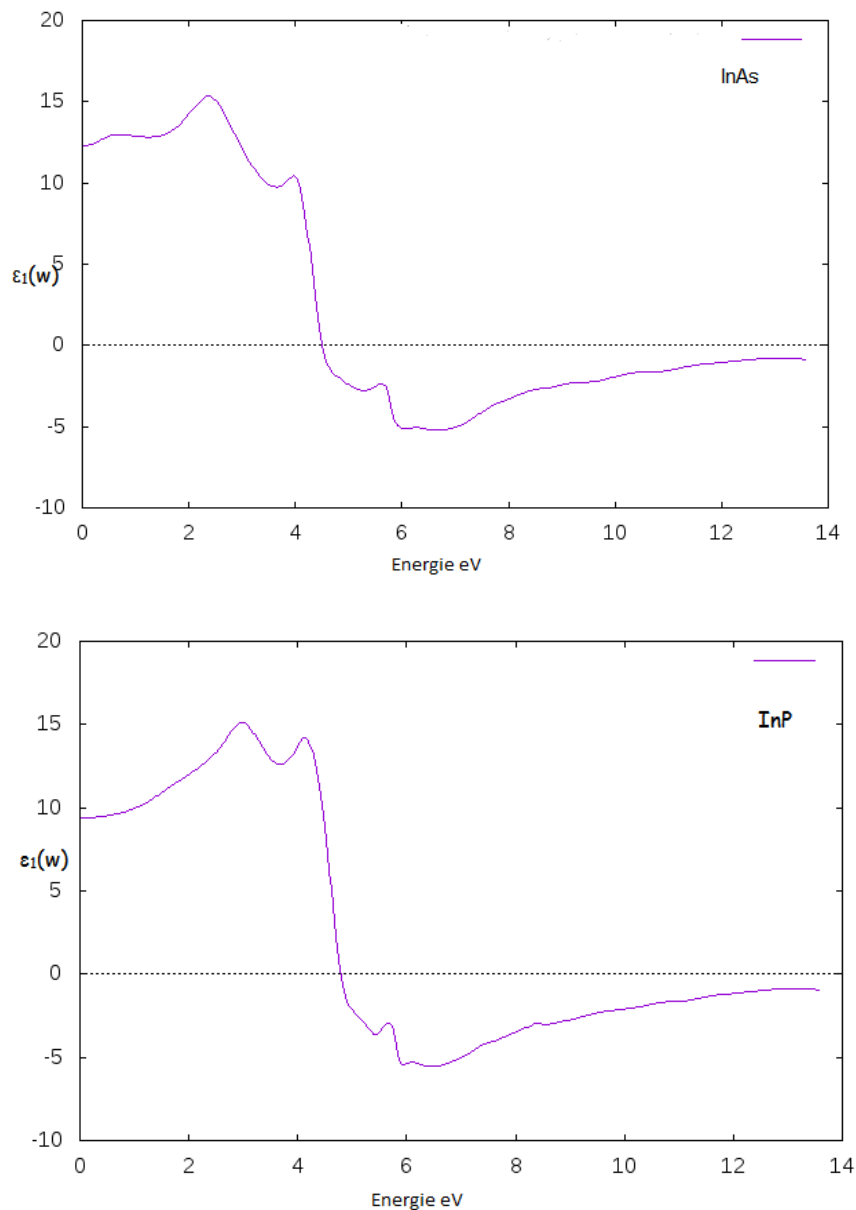


Figure II-12 : Partie réelle de la fonction diélectrique d'InAs et InP en phase zinc blende

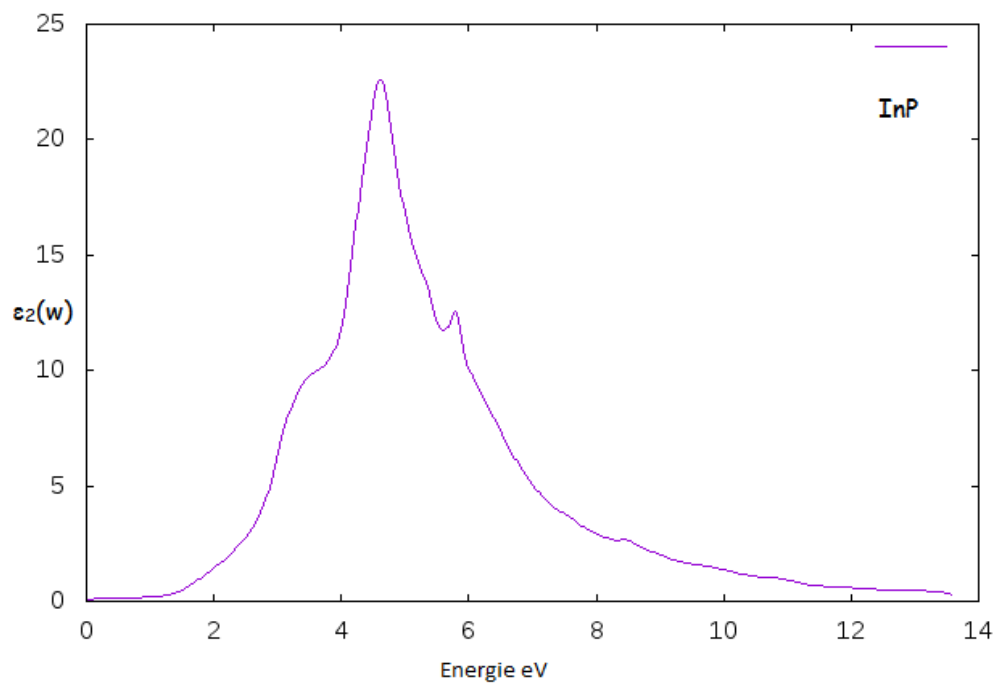
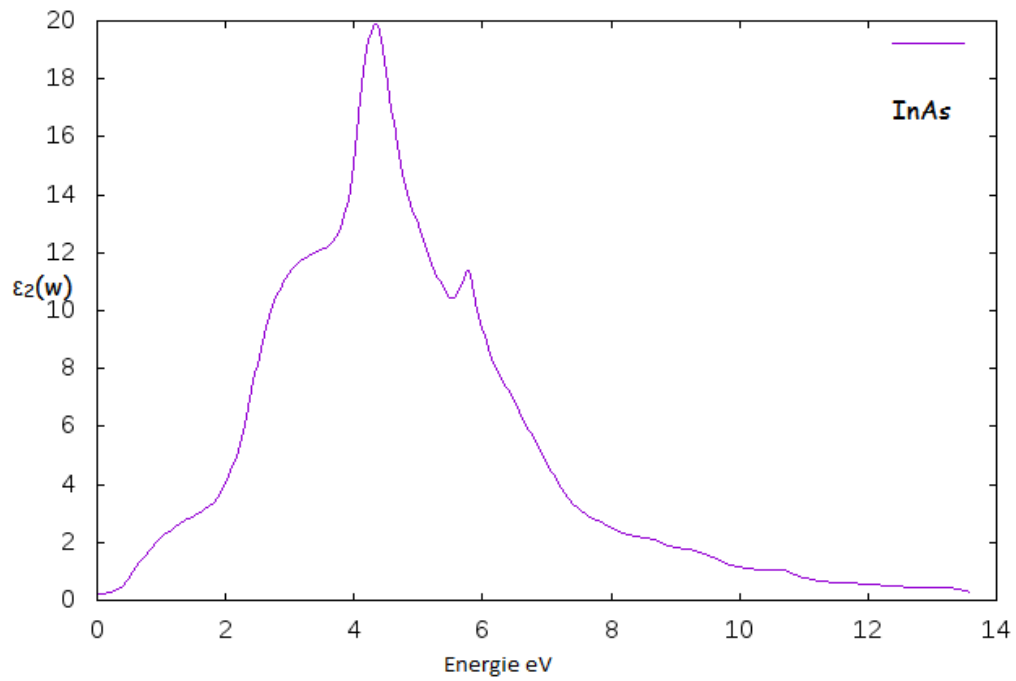


Figure II-13 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d'InAs et InP en phase zinc blende



Pour l'alliage ternaire avec différentes concentrations ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) des parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique sont représentées dans Les figures II-14, II-15, II-16, II-17 on trouve deux pics pour la partie réelle $\epsilon_1(\omega)$ à 2.01 eV, 3.65 eV pour $x = 0.25$ et 2.10 eV, 3.79 eV pour $x = 0.5$ et 2.35 eV, 3.95 eV pour $x = 0.75$ alors un baisse de l'amplitude $\epsilon_1(\omega)$ à une valeur négative à 4.29 eV, 4.35 eV et 4.56 eV lorsque l'énergie augmente pour $x = 0.25, x = 0.5, x = 0.75$ respectivement. Alors que dans la partie imaginaire $\epsilon_2(\omega)$ de la fonction diélectrique, nous trouvons le seuil d'absorption à 0.25 eV, 0.32 eV et 0.43 eV pour $x = 0.25, x = 0.5, x = 0.75$ respectivement. Plus de ces point, la contribution $\epsilon_2(\omega)$ augmente tout à coup lorsque l'énergie augmente pour atteindre un pic principal à 4.17 eV, 4.28 eV 4.46 eV pour $x = 0.25, x = 0.5, x = 0.75$ respectivement.

On voit que le plus petit seuil d'absorption à l'énergie 0.32 eV accompagne la plus petite bande interdite pour l'alliage ternaire $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ à $x = 0.5$ concentration du arséniure, ce qui signifie que la transition optique directe entre la bande de valence et la bande de conduction inoccupée nécessite moins d'énergie photonique.

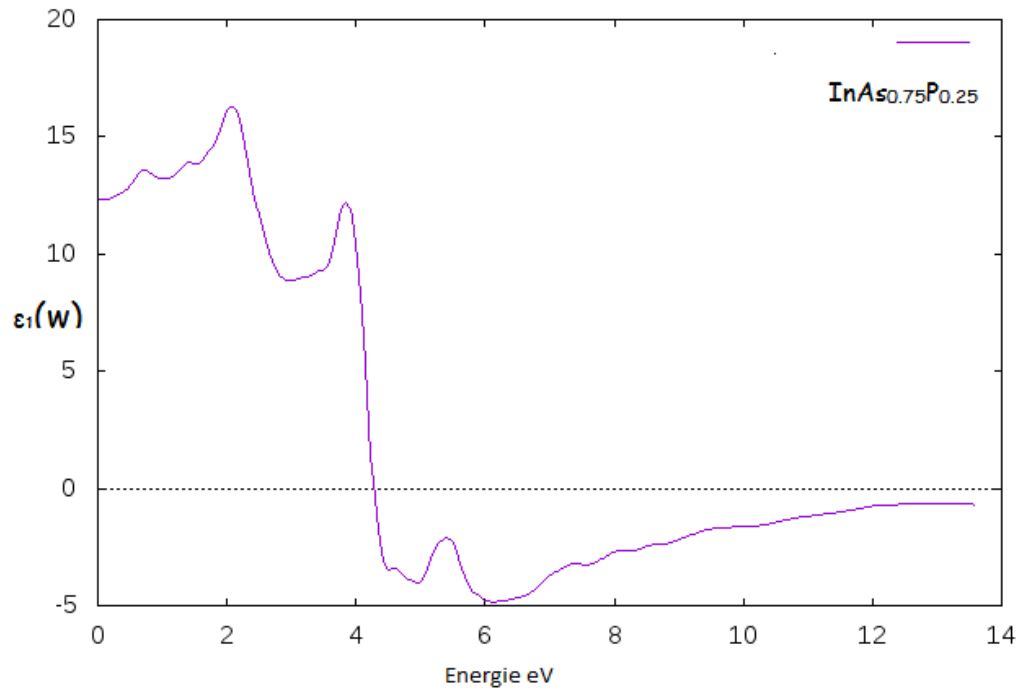


Figure II-14 : Partie réelle de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ en phase zinc blende

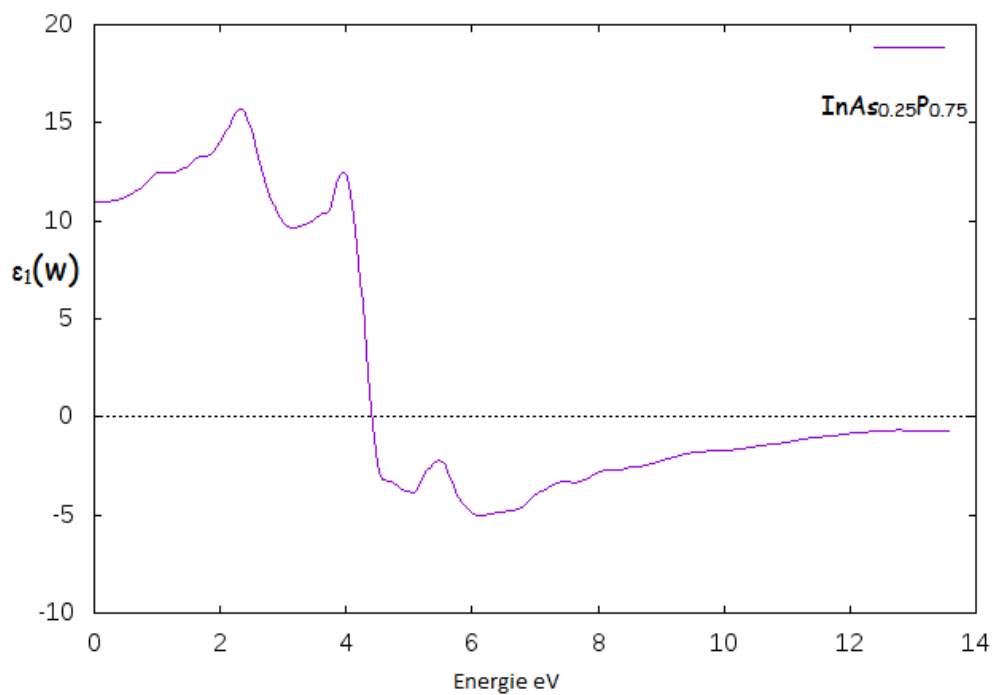
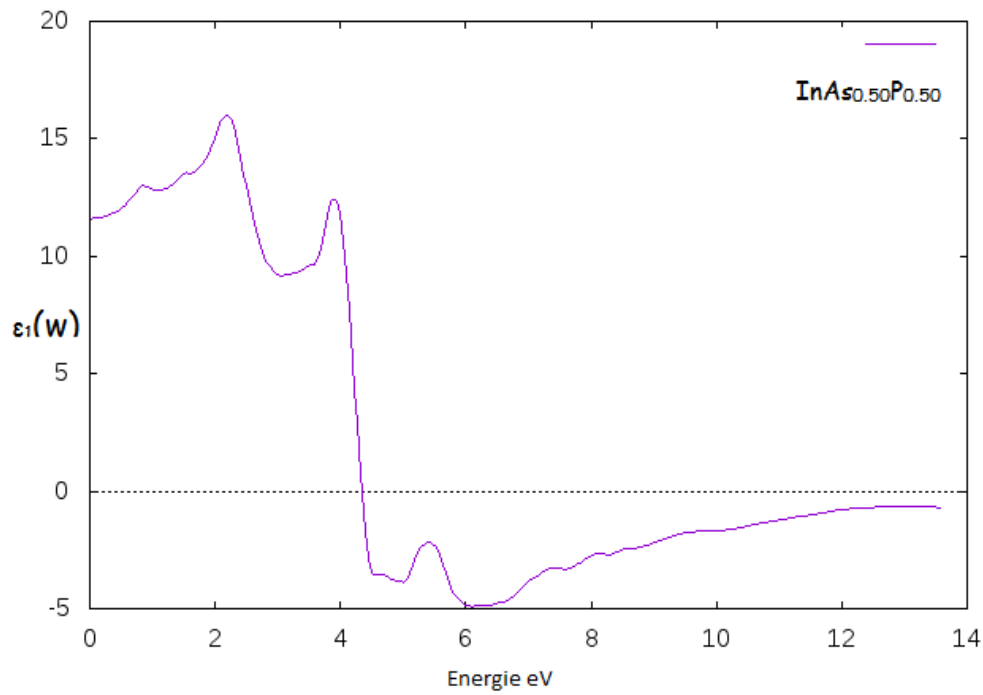


Figure II-15 : Partie réelle de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ et $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende

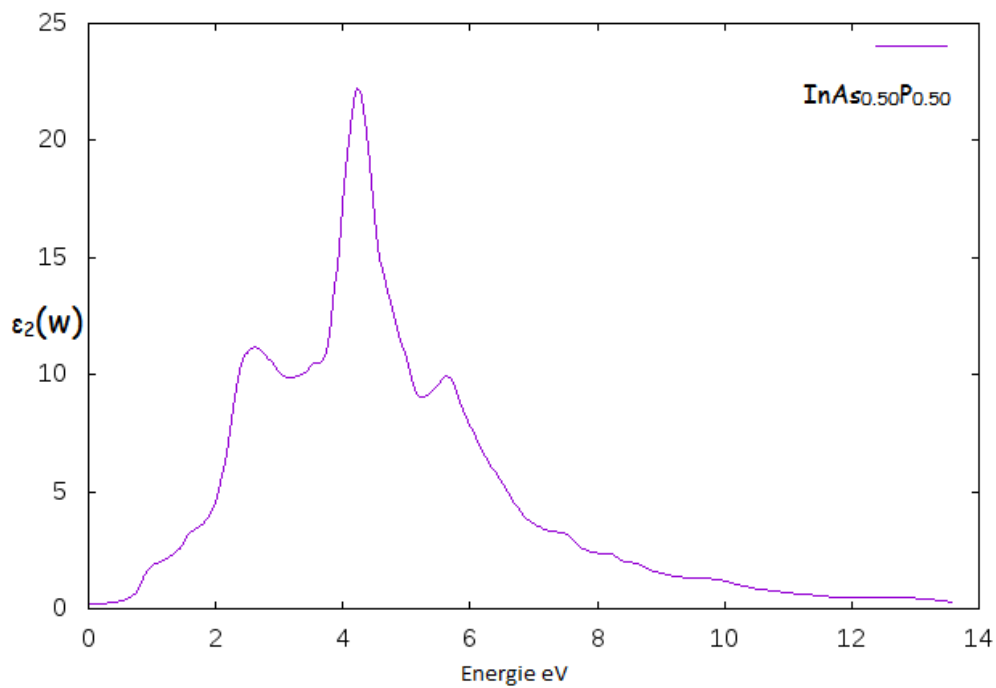
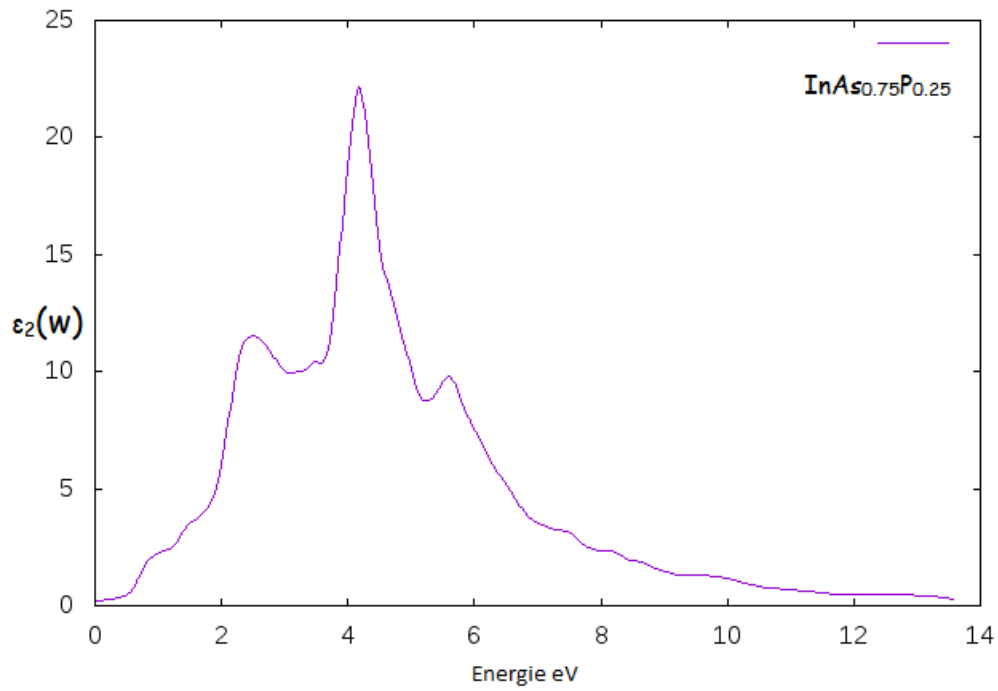


Figure II-16 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ et $\text{InAs}_{0.50}\text{P}_{0.50}$ en phase zinc blende

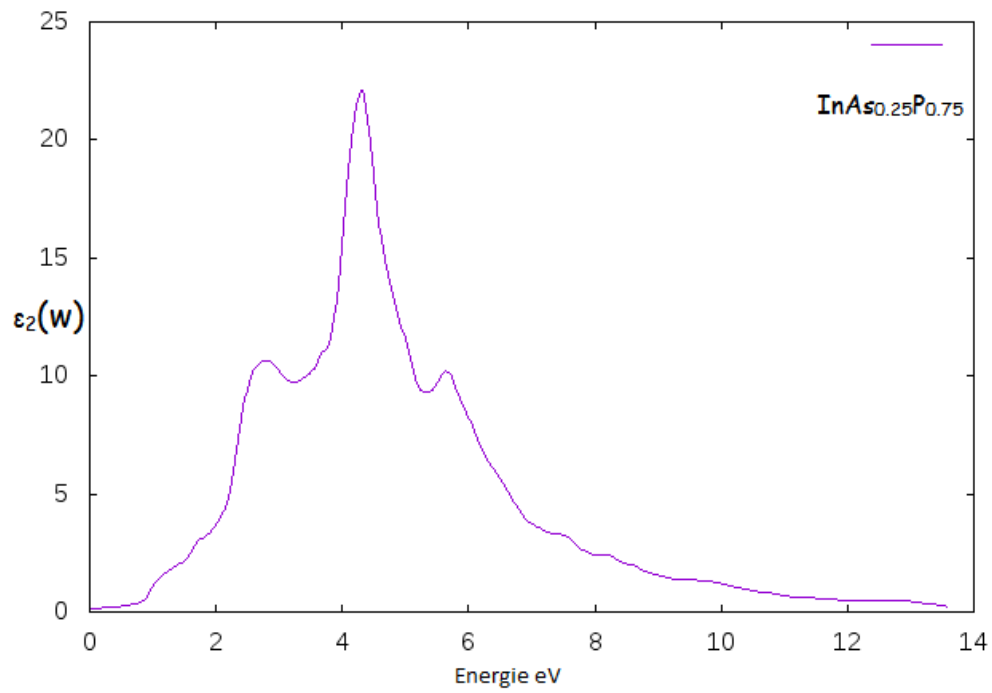


Figure II-17 : Partie imaginaire de la fonction diélectrique d' $\text{InAs}_{0.25}\text{P}_{0.75}$ en phase zinc blende



Références

- [1] O. K. Anderson, Phys. Rev B42 (1975) 3060
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, (An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties), Karlheinz Schwarz, Techno. Universitat, Wien, Austria, 3-9501031-1-2, 2001
- [3] J. P. Perdew, S-Burke et M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865
- [4] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 30 (1944) 244
- [5] Z. B. Feng, H. Q. Hu, S. X Cui, W. J. Wang, C. Y. Lu, First principles study of electronic and optical properties of InAs, Central European Journal of physics vol.7, Issue 4, 2009, PP.786-790
- [6] R. W. G. Wyckoff, Crystal Structures, Second ed. Krieger, Malabar, 1986
- [7] Hattabi, I, Abdiche, A, Soyalp, F, Moussa, R, Riane, R, Hadj, K, Khenata, R. (2017). First-Principles study of structural, electronic, and optical properties of cubic InAsNP triangular quaternary alloy S. chinoise Physics B, 26(1), 017303
- [8] Ziane, M. I, Bensaad, Z, Labdelli, B, &Bennacer, H. (2014). First-Principles Study of Structural, Electronic and Optical Properties of III-arsenide Binary GaAs and InAs, and III-Nitrides Binary GaN and InN: Improved Density-functional-theory Study
- [9] A. Bouhemadou, R. Khenata, M. Kharoubi, T. Seddik, A. H. Reshak, Y. A. Douri Comput. Mater. Sci. 45 (2009) 474
- [10] R. Ahmed, F. Aleem, S. Javad Hashemifar, H. Akbarzadeh, physica B 403 (2008) 1876



- [11] R. Ahmed, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed, F. e-Aleem, Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds *Computational Materials Science*, Vol. 39, 2007, pp. 580-586
- [12] H. SAHEB, Thèse de Magister "Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du semi-conducteur ternaire $Al_xIn_{1-x}As$, Université de Tébessa (2012)
- [13] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohen, *J. Appl. Phys.* 89 (2001) 5815
- [14] J. Serrano, A. Rubio, E. Hernandez, A. Munoz, A. Mujica, *Phys. Rev*, Vol. B62, 2000, PP. 16612
- [15] M. Yousaf, M. A. Saeed, R. Ahmed, *commun. Theor. Phys.* 58 (2012) 777, al
- [16] M. BOUANANI, mémoire de Master "Prediction des propriétés structurales et électroniques de phosphure d'indium dope en manganese" Université Dr Moulay Tahar, Saida, (2017)
- [17] P. Rochon, E. Fortin, *Phys. Rev.* B12n (1975) 5803
- [18] F. D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 30, 244 (1944)
- [19] L. Vegard, *Z. Phys.* 5, 17 (1961)
- [20] M. Paumellec, R. Micuy, and C. Dupafe, Dunod, Paris. (1987)
- [21] F. Wooten, *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York, (1972)



Les semi-conducteurs III-V à base d'indium représente actuellement une classe important des matériaux dans le domaine technologique. Ils sont très intéressants dans le domaine de l'optoélectronique.

Dans ce travail, nous avons calculé les propriétés structuraux électroniques et optiques de phosphure d'indium InP et L'arséniure d'indium InAs en utilisant la méthode des ondes plan augmentée est linéarisée (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en traitent l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation du gradient généralise (GGA).

Dans notre étude des propriétés structurales, nous avons calculé le paramètre de maille à équilibre (a), le module de compression à l'équilibre (B), la première dérivée de module de compressibilité par rapport à la pression (B'). Nos résultats concernent les propriétés structural de l'état équilibre sont en bon accord avec les données expérimentales et d'autres calculs théoriques.

Notre calcul de les structure de bandes calculées pour l'alliage $\text{InAs}_{(1-x)}\text{P}_x$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) utilisant l'approximation (GGA) montre que notre composé possède un gap direct au centre de la zone de Brillouin au point de haute symétrie Γ . Les propriétés optiques de notre compose sont estimée par le calcul des partie réelles et imaginaires de la fonction diélectriques.

En conclusion, la comparaison de nos résultats avec les résultats théoriques et expérimentaux précédents montre, en générale, un bon accord ce qui confirme la fiabilité de notre méthode utilisée.