

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE
SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF

THESE

**Présentée à la faculté des sciences
Département de physique**

Pour l'Obtention du Diplôme de

DOCTORAT ES SCIENCES

Option : physique du solide

Par

Mr : HANNACHI LARABI

Thème

PROPRIETES ELECTRONIQUES ET ELASTIQUES DES CHALCOGENITES

Soutenue le : 15/09/2010

Devant la commission d'examen :

Pr. A. ROUMILI

Prof. U.F.A. SETIF

Président

Pr. N. BOUARISSA

Prof. U. KING KHALED ABBHA

Rapporteur

Pr. K. BOUAMAMA

Prof. U.F.A. SETIF

Examineur

Dr. M. BOUCENNA

M. C. U. DE MSILA

Examineur

Sommaire

Introduction

Chapitre 1 méthode du pseudo potentiel

11. formulation mathématique

12 .modèles du pseudo potentiel

12.1 Modèle local

121.a modèle d'Ashcroft

121.b modèle de Heine Abarenkov

12.2 Modèle non local

12.2.a modèle de Heine Abarenkov

12.2.b Modèle de Gauss

12.2.c modèle d'Ashcroft

1.3 Méthode empirique locale du pseudo potentiel (EPM)

Chapitre 2 théories des alliages semi conducteurs

2.1 L'approximation du cristal virtuel

2.1.a les alliages ternaires

Chapitre 3 les propriétés élastiques

3.1 Le tenseur des déformations

3.2 le tenseur des contra 3.3 la loi de Houke

3.4 Densité d énergie élastique

3.5 Modèle de compression et de compressibilité

3.6 Méthode de calcul

Chapitre 4 résultats et discussions

4.1 Propriétés électroniques

4.1.1 Les composés binaires (cd.te) ;(cd.se) ; (zn.te); (zn.te)

4.1.1.a Gaps énergétiques et structures de bandes

4.1.1.b Masse effective

- 2 -4.1.2 Le compose ternaire cd Se Te

4.1.2 .a Gaps énergétiques et structures de bandes

4.1.2.b densité de charges

CONCLUSION

.

Introduction générale

Les matériaux semi-conducteurs sont des isolants au zéro absolu et conduisent l'électricité de façon limitée à température ambiante. En d'autres termes, la conductivité électrique d'un semi-conducteur est intermédiaire entre celle des métaux et des isolants à proprement parlé.

Parmi les matériaux semi-conducteurs, les semi-conducteurs II-VI sont importants pour de nombreuses applications comme appareils émetteurs de lumière blanche, des éléments de cellules solaires, ou des couches conductrices transparentes tampon fins.

La famille des chalcogènes (du grec ancien chalcos "minerais" et gena "naissance") est formée par la colonne 16 (anciennement VIA) du tableau périodique des éléments. Elle comprend l'oxygène (O), le soufre (S), le sélénium (Se), le tellure (Te), le polonium (Po) radioactif et un élément de synthèse l'ununhexium (Uuh). Comme dans les colonnes 13, 14, 15 et 17, le caractère métallique des éléments augmente et l'électronégativité diminue. Te et Po sont considérés comme des metalloïdes.

Les chalcogènes ont une structure électronique de valence de type $ns^2 np^4$ ou $ns^2 (n-1) d^{10} np^4$, c'est pour cela qu'ils ont une forte tendance à capter 2 électrons ou à former deux liaisons covalentes pour acquérir une couche saturée, afin de respecter la règle de l'octet.

Les semi-conducteurs CdTe, ZnTe, CdSe, ZnSe ainsi que leurs alliages ternaires sont actuellement étudiés en raison de leur importance d'une part en tant que matériaux photo-réfractifs massifs et d'autre part pour leurs applications potentielles comme détecteurs nucléaires.

Le comportement électronique des semi-conducteurs est généralement modélisé à l'aide de la théorie des bandes d'énergies. Selon cette théorie, un matériau semi-conducteur possède une bande interdite suffisamment petite pour que les électrons de la

bande de valence puissent facilement rejoindre la bande de conduction. Si un potentiel électrique est appliqué à ses bornes, un faible courant électrique apparaît, provoqué à la fois par le déplacement de tels électrons et ceux des "trous" qu'ils laissent dans la bande de valence.

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode empirique locale du pseudo-potentiel (E.P.M) pour le calcul des propriétés électroniques telles que les structures de bandes, la densité de charge, les masses effectives et les paramètres mécaniques des composés binaires CdTe, CdSe, ZnTe et ZnSe ainsi que leurs alliages ternaires. Nous avons construit notre pseudo-potentiel atomique en ajustant les facteurs de formes par la méthode non linéaire des moindres carrés, où les paramètres sont optimisés sous un critère de minimisation «root-mean square» (rms). La méthode E.P.M permet de calculer proprement et d'une façon relativement économique en temps, des paramètres physiques, dont les résultats sont en très bon accord avec l'expérience [1]. Pour le traitement des alliages ternaires, nous avons couplé la méthode E.P.M à la méthode du cristal virtuel (V.C.A) et à la méthode améliorée du cristal virtuel (VCAA) [2,3] qui tient en compte de l'effet du désordre compositionnel. Les propriétés élastiques ont été calculées en couplant l'EPM au modèle des orbitales liées de Harrison (Bond Orbital Model).

Pour pouvoir expliquer les propriétés de ces alliages, nous avons, après avoir résolu l'équation de Schrödinger, déterminé les énergies et les fonctions d'ondes.

Les valeurs des énergies ont été utilisées pour la détermination de la structure de bandes des composés semi-conducteurs, tandis que les coefficients des fonctions d'ondes ont été utilisés pour le calcul de la densité de charge.

La connaissance des densités de charge dans les solides revêt un intérêt primordial et fondamental en sciences des matériaux. Elle nous renseigne sur la nature de la liaison

crystalline. Les calculs relatifs à cette densité de charge ont été faits aux points de haute symétrie Gamma.

La thèse est organisée comme suit:

Dans le premier chapitre, nous rappelons le principe de la méthode empirique du pseudo-potentiel (E.P.M), que nous avons utilisé pour étudier les propriétés électroniques et élastiques des semi-conducteurs.

Le 2ème chapitre est consacré à la méthode V.C.A en tenant compte de l'effet du désordre comme potentiel effectif qui a été utilisé pour étudier la dépendance compositionnelle des propriétés électroniques et élastiques des alliages ternaires.

Dans le 3ème chapitre, nous rappelons les propriétés élastiques des semi conducteurs dans la structure zinc blende, et la méthode utilisée pour nos calculs.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats de nos calculs, leur interprétation ainsi qu'une comparaison avec certains travaux théoriques et expérimentaux. Finalement, notre travail est achevé par une conclusion générale.

CHAPITRE I

Méthode des pseudo-potentiels

La méthode du pseudo potentiel fut introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches minces. Dans l'année suivante, Hellman proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fut généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman en 1959 qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W) [1,4-16]. L'intérêt de cette méthode est que seuls les électrons de valence seront pris en compte. Les électrons du cœur seront supposés "gelés" et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique. Les coefficients utilisés dans la méthode O.P.W. pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane orthogonalisée aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur, et on obtient par effet d'annulation un potentiel faible ou "pseudo potentiel". Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger. Cette méthode fut appliquée notamment pour le calcul des structures électroniques des solides et liquides, les interactions électron-phonon, la supraconductivité, les vibrations des réseaux, les liaisons et structures des cristaux ... etc. [1,4].

1.1. Formulation mathématique de la méthode

La formulation mathématique de cette méthode est présentée comme suit: On écrit la fonction d'onde exacte pour un électron de valence Ψ_k comme une combinaison linéaire des fonctions d'ondes O.P.W, et soit ϕ_k l'onde plane de ce développement,

$$\phi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{K}} \exp(\mathbf{k} - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r} \quad (\text{I.1})$$

La fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}$, doit être orthogonale aux états du cœur ϕ^c donc :

$$\langle \phi, \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = 0$$

Ce qui nous donne :

$$\Psi_{\mathbf{k}} - \phi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\int dt \Psi_{\mathbf{k}}^* \phi_{\mathbf{k}} \right) \Psi_{\mathbf{k}}^* \quad (\text{I.2})$$

$\Psi_{\mathbf{k}}$ est la fonction d'onde exacte, elle satisfait donc l'équation de Schrödinger avec la valeur propre $E_{\mathbf{k}}$.

$$\mathbf{H} \Psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (\text{I.3})$$

En remplaçant l'expression (1.2) dans (1.3), nous obtenons:

$$\mathbf{H} \phi_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\int dt \Psi_{\mathbf{k}}^* \phi_{\mathbf{k}} \right) \mathbf{H} \Psi_{\mathbf{k}}^* = E_{\mathbf{k}} \left(\phi_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\int dt \Psi_{\mathbf{k}}^* \phi_{\mathbf{k}} \right) \Psi_{\mathbf{k}}^* \right) \quad (\text{I.4})$$

En remarquant que pour les états exacts du cœur, on peut réécrire l'équation (1.4) de la

façon suivante: $(\mathbf{H} + \mathbf{V}^{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \quad (\text{I.5})$

Où l'opérateur $\mathbf{V}^{\mathbf{R}}$ est défini comme suit:

$$\mathbf{V}^{\mathbf{R}} \Psi = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^c) \left(\int d\mathbf{r}' \Psi_{\mathbf{k}}^c \Psi \right) \Psi_{\mathbf{k}}^c \quad (\text{I.6})$$

On est donc arrivé à formuler une équation de Schrödinger satisfaite par $\phi_{\mathbf{k}}$, la partie régulière de la fonction de Bloch, qui est dite la pseudo fonction d'onde. L'expérience avec la méthode O.P.W. suggère que $\phi_{\mathbf{k}}$ peut être approchée par un nombre réduit d'ondes

planes. Le pseudo potentiel est défini comme la somme du potentiel cristallin et le potentiel V^R :

$$\mathbf{H} + \mathbf{V}^R = \mathbf{T} + \mathbf{V} + \mathbf{V}^R = \mathbf{T} + \mathbf{W} \quad (1.7)$$

Où $W=V+V^R$ est le pseudo potentiel, la pseudo-équation de Schrödinger est donnée par:

$$(\mathbf{T} + \mathbf{W})\Phi_k = E_k \Phi_k \quad (1.8)$$

Le potentiel V^R qui est un potentiel répulsif s'oppose en partie au potentiel attractif cristallin V , d'où V_p est un potentiel faible (Fig. 1), ce qui justifie l'utilisation de la méthode N.F.E.M, pour résoudre l'équation de Schrödinger. Le potentiel V_p n'a pas en toute rigueur, une forme locale $V_p(r)$, mais l'utilisation d'un modèle local a donné dans certains cas, de très bons résultats [17-20].

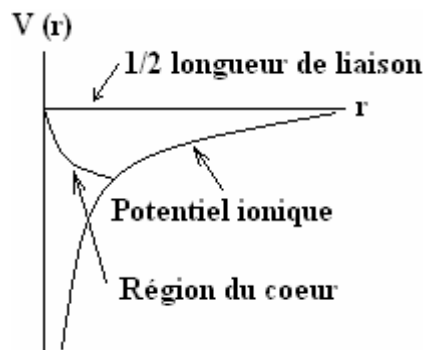


Fig. 1 : Schéma du pseudo potentiel dans l'espace réel.

1.2. Modèles phénoménologiques locaux du pseudo potentiel

Le théorème de l'annulation et les démonstrations analytiques basées sur le Pseudo potentiel de Phillips-Kleinman servaient de base pour expliquer comment la structure électronique d'un système réel peut être décrite par la méthode N.F.E.M ou par un faible potentiel. Cependant, l'approche de Phillips-Kleinman n'a pas une large application comme méthode de calcul pour obtenir la structure de bandes d'un cristal. Ce qui fait

que, des modèles et des potentiels empiriques furent utilisés pour "fitter" les propriétés observées et résoudre ensuite un certain nombre de problèmes. Dans certains cas, le modèle de potentiel est ajusté par rapport aux données atomiques expérimentales, ensuite, il est utilisé pour le calcul de la structure des bandes d'un solide.

1.2.1. Modèle local

Le pseudo-Hamiltonien pour un électron dans un cristal, est constitué par la somme de l'énergie cinétique de l'électron et un faible potentiel dépendant de la position.

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

Les modèles les plus simples consistent en un potentiel Coulombien loin de la région du cœur, et en une simple constante loin de cette région.

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

Où r_c est le rayon du cœur et Z est le nombre des électrons.

1.2.1.1. Modèle d'Ashcroft

Ce modèle est aussi appelé "the empty core potential"[15],

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ 0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (I.11)$$

La transformée de Fourier de ce potentiel est donnée par :

$$V(q) = \frac{4\pi Ze^2}{\Omega q^2} \cos(qr_c) \quad (I.12)$$

Où Ω est le volume atomique.

1.2.1.2. Modèle de Heine et Abarenkov

Ce modèle introduit plus de flexibilité pour «fitter » les données atomiques en utilisant une variable V_0 pour le potentiel constant dans la région du cœur (Fig.1)

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ V_0 & r \leq r_c \end{cases} \quad (I.13)$$

La transformée de Fourier de ce potentiel est donnée par:

$$V(q) = \frac{4\pi Ze^2}{Wq^2} \left\{ (1 + U)\cos(qR_m) - \frac{U\sin(qR_m)}{qR_m} \right\} \quad (I.14)$$

Ce potentiel peut être non-local (dépendant du moment angulaire) pour différents choix de la constante A . La dépendance en énergie peut être introduite par $A=A(E)$.

1.2.2. Modèle non local

Le pseudo potentiel est essentiellement non local et dépend de r et de l'énergie E . En tenant compte de l'effet de la non localité, la correction apportée au potentiel local est donnée par:

$$V_M(\mathbf{r}, E) = \sum_{\mathbf{l}} A_l(E) f_l(\mathbf{r}) P_l \quad (1.15)$$

Où $A_l(r, E)$ est la constante de la dépendance du pseudo potentiel en énergie des états du cœur, $f_l(r)$ est la fonction simulant les effets des états du cœur et P_l est l'opérateur de projection de la première composante du moment angulaire. La fonction $f_l(r, E)$ a plusieurs formes comme celle de Aschcroft, Heine-Abarenkov ou une forme Gaussienne. Ces deux dernières sont les plus utilisées.

1.2.2.1 Modèle de Heine et Abarenkov La fonction de Heine-Abarenkov [16] est simple et a une forme carrée. Elle est représentée dans la figure 2 et donnée par l'expression suivante:

$$f_l(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & r < R_c \\ 0 & r > R_c \end{cases} \quad (1.16) \quad \text{Où } R_c \text{ est le rayon du cœur.}$$

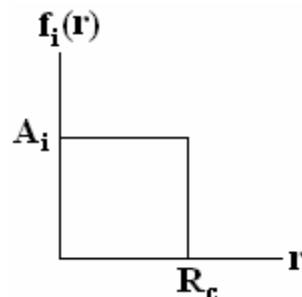


Fig. 2 : Fonction de Heine-Abarenkov.

1.2.2.2. Modèle de Gauss

La forme Gaussienne [21] est représentée dans la figure 3 et donnée par l'expression suivante:

$$f_i(r) = \exp(-r^2/r_0^2) \quad (I.17)$$

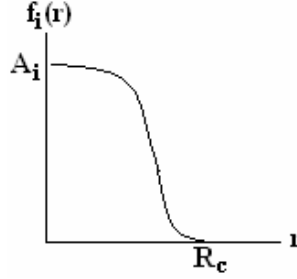


Fig. 3 : Fonction de Gauss.

1.2.2.3. Modèle d'Aschcroft

Pour choisir une forme $f_i(r)$, on emploie la forme carrée à cause de sa simplicité et sa précision. A cause de la nature non locale du pseudo potentiel, les facteurs de forme $V(G)$ sont non seulement fonction de G mais aussi dépendent du vecteur d'onde k . Les éléments de matrice du pseudo potentiel dans une base d'ondes planes sont de la forme:

$$V_{\text{M1}}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \frac{4\pi}{\Omega_{\text{M}}} \sum_{\mathbf{l}} A_{\mathbf{l}}^i(\mathbf{E}) (2\mathbf{l} + \mathbf{1}) P_{\mathbf{l}}(\cos(\Theta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'})) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') F_{\mathbf{l}}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \quad (I.18)$$

Où : $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$, $\mathbf{K}' = \mathbf{k}' + \mathbf{G}'$ et

$$F_{\mathbf{l}}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \begin{cases} (1/2 R^2) \{ [j_{\mathbf{l}}(\mathbf{K}R)]^2 - j_{\mathbf{l}-1}(\mathbf{K}R) j_{\mathbf{l}+1}(\mathbf{K}R) \}, & \mathbf{K} = \mathbf{K}' \\ [R^2 / (\mathbf{K}^2 - \mathbf{K}'^2)] [K j_{\mathbf{l}+1}(\mathbf{K}R) j_{\mathbf{l}}(\mathbf{K}'R) - \mathbf{K}' j_{\mathbf{l}+1}(\mathbf{K}R) j_{\mathbf{l}}(\mathbf{K}R)], & \mathbf{K} \neq \mathbf{K}' \end{cases} \quad (I.19)$$

Les $j_l(X)$ sont les fonctions de Bessel, $P_l(X)$ sont les polynômes de Legendre, i recouvre la somme à travers les sites atomiques présents. Pour simuler la dépendance en énergie des états s , on utilise l'approximation suivante:

$$A_0(\mathbf{K}) = \alpha_0 + \beta_0 \{ [E^0(\mathbf{K})E^0(\mathbf{K}')]^{1/2} - E^0(\mathbf{K}_f) \} \quad (1.20)$$

$$\text{Où } E^0(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{2m}$$

Les paramètres utilisés pour construire le pseudo potentiel sont fixés par une comparaison détaillée des valeurs expérimentales comme la réflectivité et la Photoémission. La prise en compte de la non localité augmente le nombre des paramètres. Pour le calcul des structures de bandes ou des densités de charge, les fonctions propres et les énergies propres sont données par la résolution de l'équation séculaire:

$$\det |H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}(\mathbf{K}) - E(\mathbf{K})\delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}| = 0 \quad (1.21)$$

Pour l'approximation locale on a :

$$H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^L = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 + V|\mathbf{G} - \mathbf{G}'| \quad (1.22)$$

Pour l'approximation non locale, on écrit:

$$H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^{NL} = H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}^L + \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{I}} A_{\mathbf{I}}^0 (2\mathbf{l} + 1) P_{\mathbf{l}}(\cos\theta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}) F_{\mathbf{l}}^0(\mathbf{K},\mathbf{K}') S^0(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \quad (1.23)$$

Où la somme recouvre tous les sites atomiques α . $F_{\mathbf{l}}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$ sont définis dans l'équation (1.19). La dépendance en énergie est incluse dans $A_{\mathbf{l}}$. Pour l'approximation carrée ou Gaussienne, des expressions analytiques sont utilisées pour les éléments de matrices, et les corrections non locales sont introduites facilement dans l'équation séculaire. En général, les corrections sont

petites pour les semi-conducteurs, mais peuvent changer la topologie de la relation de dispersion pour certaines bandes et les valeurs des bandes interdites.

1.3. Méthode empirique locale du pseudo potentiel (E.P.M)

C'est une autre variante de la méthode du pseudo potentiel, elle utilise pour déterminer les facteurs de forme, les données expérimentales telles que celles obtenues par le spectre de réflexion ou le spectre de la partie imaginaire de la constante diélectrique que l'on calcule en partant du spectre de réflexion. La photoémission et la réflectivité furent largement utilisées pour les semi-conducteurs où elle a donné de très bons résultats pour le Ge et le Si [22], et aussi pour les semi-conducteurs de structure diamant et zinc blende [1]. Les facteurs de structures peuvent être déterminés de l'analyse des expériences de diffraction des rayons X ou par les neutrons. Dans le cas où nous supposant que le pseudo-potential serait de type local, et ne dépend que de la position r , alors [22],

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) \quad (1.24)$$

Où

$$V(\mathbf{G}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{G}) V(\alpha) \quad (1.25)$$

$$S_{\alpha}(\mathbf{G}) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_{\mathbf{r} \in \alpha} \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.26)$$

et

$$V_{\alpha}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) V_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.27)$$

G est un vecteur du réseau réciproque et $V_\alpha(G)$ sont les facteurs de formes atomiques. Ω_α est le volume atomique, N_α est le nombre de bases et R_j^α est la position du j 'ème atome de la base α . Dans cette approximation, nous avons supposé que le potentiel cristallin est la somme de potentiels atomiques locaux:

$$V_F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} V_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.28)$$

Les pseudo fonctions d'ondes $\phi_{nk}(\mathbf{r})$ et les énergies $E_n(\mathbf{k})$ seront donc les solutions de l'équation:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_F(\mathbf{r}) \right] \phi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$

Où $V_p(\mathbf{r})$ est le pseudo potentiel, les fonctions $\phi_{nk}(\mathbf{r})$ sont les fonctions de Bloch et peuvent être développées en une série d'ondes planes. Les coefficients de ce développement seront obtenus en résolvant l'équation séculaire, par les techniques de perturbations. Le plus important dans ce calcul est la connaissance des facteurs de forme et les facteurs de structure. La raison principale qui rend le pseudo potentiel pratique est qu'un nombre réduit de facteurs de forme suffisent pour calculer la structure de bande. Dans un semi-conducteur avec la structure diamant, comme le Si et le Ge, seulement trois facteurs de forme suffisent. Dans la structure zinc-blende, le nombre de facteurs de forme est six. Pour montrer cela, notons qu'il y a deux atomes A et B dans la cellule unitaire. Dénotons les pseudo potentiels atomiques des deux atomes par $V_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)$ et $V_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)$, où \mathbf{r}_A et \mathbf{r}_B sont les positions des deux atomes dans la cellule unitaire. Remplaçons ces potentiels dans l'équation (1.24), nous obtenons les facteurs de formes du cristal:

$$V_G = \frac{1}{\Omega} \int [V_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + V_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})] d\mathbf{r} \quad (1.30)$$

$$V_G = \frac{1}{\Omega} \int \left[\int V_A(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}_A) + V_B(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}_B) \right] \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.30)$$

Prenons le milieu des deux atomes dans la cellule unitaire comme origine, donc:

$r_A = (\frac{a}{8})(1,1,1) = s$ et $r_B = (\frac{-a}{8})(1,1,1) = -s$, on peut alors écrire:

$$V_A(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}_A) + V_B(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}_B) = (V_A + V_B) \cos(\mathbf{G}\cdot\mathbf{s}) - i(V_A - V_B) \sin(\mathbf{G}\cdot\mathbf{s}) \quad (1.31)$$

Ensuite, nous définissons les composantes symétriques et antisymétriques des facteurs de forme du pseudo potentiel par :

$$V_G^S = \frac{1}{\Omega} \int (V_A + V_B) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.32)$$

Et

$$V_G^A = \frac{1}{\Omega} \int (V_A - V_B) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.33)$$

Remplaçons les deux derniers résultats dans l'équation (1.30), nous obtenons:

$$V_G = V_G^S \cos(\mathbf{G}\cdot\mathbf{s}) - iV_G^A \sin(\mathbf{G}\cdot\mathbf{s}) \quad (1.34)$$

Il est clair que les facteurs de forme antisymétriques V_G^A s'annulent dans la structure diamant.

Le facteur $\cos(\mathbf{G}\cdot\mathbf{s})$ est le facteur de structure du diamant défini dans l'équation (1.34). Dans la structure diamant et zinc-blende, les vecteurs du réseau réciproque, sont dans l'ordre croissant du module (en unité $\frac{2\pi}{a}$):

$$G_0 = (0, 0, 0)$$

$$G_3 = (1, 1, 1), (1, -1, 1) \dots\dots\dots (-1, -1, -1)$$

$$G_4 = (2, 0, 0), (-2, 0, 0) \dots\dots\dots (0, 0, -2)$$

$$G_8 = (2, 2, 0), (2, -2, 0) \dots\dots\dots (0, -2, -2)$$

$$G_{11} = (3, 1, 1), (-3, 1, 1) \dots\dots\dots (-3, -1, -1)$$

On peut négliger les facteurs de forme avec $G^2 > 11(\frac{2\pi}{a})^3$ car v_g diminue en $\frac{1}{G^2}$ pour les larges G . Le facteur de forme V_0 correspondant à g_0 est constant, et par un choix convenable de l'origine, peut être pris comme nul. Les facteurs de forme pour les vecteurs équivalents du réseau réciproque $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$, avec le module $3(\frac{2\pi}{a})$ sont égaux par symétrie et seront notés par V_3 . Le facteur de structure correspondant à G_4 est nul car $\cos(G.s) = 0$ pour $G = \frac{2\pi}{a} (2, 0, 0)$. Donc il y a seulement trois importants facteurs de forme pour la structure diamant:

$$V_3^S, V_8^S, V_{11}^S.$$

Dans le cas de la structure zinc-blende, v_8^A est nul car $\sin(G.S) = 0$, donc il y a seulement six facteurs de forme : V_3^S, V_8^S, V_{11}^S et V_3^A, V_4^A, V_{11}^A . Notons que le signe du facteur de forme antisymétrique dépend du choix du cation ou de l'anion comme atome. Notons aussi que le module de V_3^S est le plus important. Pour les semi-conducteurs de type diamant ou zinc blende [1]:

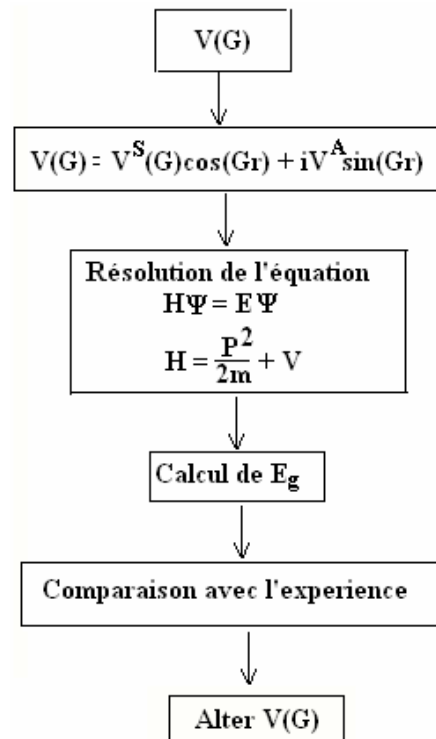
$$V(\mathbf{G}) = V^S(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) + iV^A(\mathbf{G}) \sin(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.35)$$

Où

$$V^S(\mathbf{G}) = \frac{1}{2}[V_A(\mathbf{G}) + V_B(\mathbf{G})] \quad (\text{I.36})$$

$$V^A(\mathbf{G}) = \frac{1}{2}[V_A(\mathbf{G}) - V_B(\mathbf{G})] \quad (\text{I.37})$$

Où $\tau = \pm \frac{1}{8}a(1,1,1)$, a est la constante du réseau, V^S et V^A sont, respectivement, les facteurs de forme symétriques et antisymétriques. L'E.P.M local est basé sur certaines simplifications, si on prend le pseudo potentiel sphérique, c'est à dire $V_p(\mathbf{r})=V_p(|\mathbf{r}|)$, alors les facteurs de forme ne dépendront que de la norme G . Ce qui va réduire le nombre de facteurs de formes. Ces derniers sont généralement tirés de l'expérience. La procédure de calcul de la méthode E.P.M est montrée dans le diagramme suivant:



On utilise les facteurs de forme $V(G)$ comme point de départ. La structure du composant est exprimée par $S(G)$, et l'équation de Schrödinger est résolue pour les énergies propres et les fonctions propres. En utilisant les valeurs propres et les fonctions propres, il est possible de calculer les fonctions de réponse "response function" comme les gaps où la densité de charge. Ces fonctions seront comparées avec l'expérience et les $V(G)$ peuvent être changés si le désaccord avec l'expérience est important. Le processus est répété jusqu'à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées. Généralement, un nombre réduit de cycles est nécessaire, pour obtenir un bon accord entre la théorie et l'expérience pour les propriétés optiques, la densité de charge et la structure de bandes. Aussi un nombre réduit de facteurs de forme est suffisant pour déterminer chaque potentiel atomique. Pour nos calculs, la procédure d'ajustement des facteurs de forme se base sur la méthode non-linéaire des moindres carrés. Elle suppose que la déviation (rms) des énergies calculées par rapport aux énergies observées soit minimale.

$$\delta = \left[\sum_{ij} [\Delta E^{(ij)}]^2 / (m - N) \right]^{1/2} \quad (1.38)$$

$$\Delta E^{(ij)} = E_{\text{exp}}^{(ij)} - E_{\text{calc}}^{(ij)} \quad (1.39)$$

Où E_{exp} et E_{calc} sont, respectivement, les énergies observées et calculées entre le $i^{\text{ème}}$ état de vecteur d'onde $K=K_i$ et le $j^{\text{ème}}$ état $K=K_j$, respectivement; dans la $m^{\text{ème}}$ paire (i,j) , N est le nombre de paramètres. En plus de L'E.P.M, qui constitue la méthode la plus utilisée dans le calcul des structures de bandes, d'autres variétés de la méthode du pseudo potentiel ont été développées. Ce sont notamment la méthode « Self-Consistent » et la méthode « Ab Initio ». Dans la méthode « Self-Consistent », pour atteindre le potentiel « Self-Consistent », on utilise la fonction d'onde obtenue par l'E.P.M pour calculer le nouveau potentiel et sera utilisé pour calculer la fonction d'onde. Cette méthode a été surtout utilisée pour le calcul des fonctions

diélectriques. L'approche ab-initio qui est aussi appelée « le premier principe pseudo potentiel » a été utilisé dans le calcul de l'énergie totale et l'étude des propriétés structurales des solides.

CHAPITRE II

Théorie des alliages semi-conducteurs

2.1. Introduction

Dans les sciences des matériaux, les alliages semi-conducteurs ternaires sont fréquemment utilisés pour leurs structures de bandes et spécialement la variation de leurs gaps énergétiques en fonction de la composition. Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optiques, électroniques, structurales, etc. ...) des alliages ternaires, tel que l'approximation du cristal cohérent (CPA) [23,24] et l'approche du cristal virtuel (V.C.A) [25]. Mais l'approche E.P.M combinée avec la VCA en tenant compte de l'effet du désordre reste le plus simple et offre des résultats compatibles avec les données expérimentales [2, 3, 26]. C'est cette approche que nous avons utilisé pour calculer la dépendance compositionnelle des propriétés électroniques et élastiques des alliages ternaires.

2.2. Approximation du cristal virtuel et Effet du désordre compositionnel

Un semi-conducteur ternaire $A_xB_{1-x}C$ est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations dûe à la composition x est inévitable. Généralement, on considère ces fluctuations comme une perturbation qui est calculée par le second ordre de l'approche V.C.A [2].

Le cristal ternaire $A_xB_{1-x}C$ est composé de molécules AC avec une fraction molaire x et des molécules BC avec une fraction $(1-x)$. Ainsi, la propriété physique $F(x)$ peut être représentée comme une simple interpolation analytique des propriétés de ses composés binaires AC et BC. La valeur moyenne de la propriété physique F étant:

$$F_{\text{moy}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}F_{\text{AC}} + (1 - \mathbf{x})F_{\text{BC}} \quad (\text{II.1})$$

Par exemple, la constante du réseau $a(\mathbf{x})$ de l'alliage ternaire sera donné par la loi de Vegard ,

$$a(\mathbf{x}) \sim a_{\text{moy}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}a_{\text{AC}} + (1 - \mathbf{x})a_{\text{BC}} \quad (\text{II.2})$$

a_{C} est la constante de réseau du composé AC

a_{BC} est la constante de réseau du composé BC, par contre, le gap énergétique $E_g(\mathbf{x})$ de l'alliage ternaire est donné par:

$$E_g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}E_{\text{AC}} + (1 - \mathbf{x})E_{\text{BC}} + b\mathbf{x}(1 - \mathbf{x}) \quad (\text{II.3})$$

avec E_{AC} est le gap du composé AC

E_{BC} est le gap du composé BC

b étant le paramètre de courbure (Bowling) qui est souvent prouvé par l'expérience. L'origine du « bowing » est due à l'aspect structural et au désordre compositionnel qui est très dominant dans les fluctuations de l'alliage ternaire. Ils ont été observés pour les alliages II-VI en 1957 en matière poudre et en 1976 en masses de cristaux.

Le gap énergétique calculé par l'approche E.P.M couplé la V.C.A donne un paramètre de courbure déviant d'une valeur importante de celle fournie par l'expérience, ceci est dû au fait d'avoir négligé l'effet du désordre. Pour remédier à cela, on ajoute un terme correctif au Hamiltonien appelé potentiel du désordre.

L'hamiltonien total du cristal par l'approche E.P.M combinée avec la V.C.A en tenant compte du désordre (V.C.A.A) est donné par [2]:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{r}) \quad (\text{II.4})$$

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{\text{VCA}}(\mathbf{r}) + V_{\text{dés}}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.5})$$

Où : $V_p(r)$ est le pseudo potentiel du cristal

$V_{VCA}(r)$ est le potentiel périodique du cristal

$V_{dés}(r)$ est un potentiel non périodique, il est dû à l'effet du désordre du cristal.

Pour une distribution particulière des molécules AC et BC dans le cristal, $V_{dés}$ s'écrit [2],

$$V_{dés}(r) = (1-x) \cdot \sum_{jA} \Delta(r-R_j) - x \cdot \sum_{jB} \Delta(r-R_j) \quad (II.6)$$

Où

$$\Delta(r) = V_{AC}(r) - V_{BC}(r) \quad (II.7)$$

j_A et j_B indiquent que la sommation est sur les sites des molécules AC et BC, respectivement.

La V.C.A considère les approximations suivantes [2],

$$\sum_{jA} \Delta(r-R_j) \approx x \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (II.8)$$

et

$$\sum_{jB} \Delta(r-R_j) \approx (1-x) \cdot \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (II.9)$$

La concordance entre les valeurs calculées et celles fournies par l'expérience. Et pour palier à cette discordance, l'effet du désordre sera introduit par le potentiel $V_{dés}$, c'est ce qu'on appelle

la « V.C.A améliorée » ou V.C.A.A qui s'appuie sur les approximations suivantes : Ainsi on

obtient $V_{dés} = 0$. En négligeant l'effet du désordre, on aboutit donc à une mauvaise

$$\sum_{jA} \Delta(r-R_j) \approx \alpha \cdot x \cdot \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (II.10)$$

et

$$\sum_{jB} \Delta(r-R_j) \approx \beta \cdot (1-x) \cdot \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{II.11})$$

Où α et β sont des fonctions du désordre et dépendent des concentrations x et de l'énergie potentielle. Dans ce cas, le potentiel du désordre devient :

$$V_{\text{dés}} = (\alpha - \beta) \cdot x \cdot (1-x) \cdot \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{II.12})$$

Dans le cas où tous les sites du réseau sont supposés occupés par des molécules virtuelles AC ou AB qui ont l'énergie potentielle V_{VCA} :

$$\alpha - \beta = \pm \frac{1}{N[x(1-x)]^{1/2}} \left(\frac{N^2(1-x)}{x} + \sum_{n=0}^N C_n^N x^{n-n-1} (1-x)^{n-1} \cdot [n^2 - 2n \cdot N(1-x)] \right)^{1/2} \quad (\text{II.13})$$

Où C_n^N Représente la combinaison avec laquelle les n plus proches sites sont occupés aléatoirement par un composé binaire AC ou AB sur les N plus proches sites étudiés. Après simplification on trouve que :

$$V_{\text{dés}}(r) = - \left[\frac{x \cdot (1-x)}{N} \right]^{1/2} \cdot \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{II.14})$$

En considérant tous les sites du cristal étudié, l'expression de $V_{\text{dés}}$ devient :

$$V_{\text{dés}}(r) = -P \cdot [x \cdot (1-x)]^{1/2} \sum_j \Delta(r-R_j) \quad (\text{II.15})$$

Ou

$$P = \frac{\left(\sum_{i=1}^N N_i \Delta(d_i) \right)^{1/2}}{\sum_{i=1}^N N_i \Delta(d_i)} \quad (\text{II.16}) \text{Et } d:$$

distance entre les deux plus proches sites.

I indique le $i^{\text{ème}}$ site, P est un paramètre ajustable.

$$V_p(\mathbf{r}) = V_{VCA}(\mathbf{r}) - P \left[x(1-x) \right]^{1/2} \cdot \sum_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (\text{II.17})$$

En additionnant le potentiel du désordre au potentiel périodique du cristal, le pseudo potentiel devient:

$$V_p(\mathbf{r}) = x \cdot V_{AC}(\mathbf{r}) + (1-x) V_{BC}(\mathbf{r}) + P \left[x(1-x) \right]^{1/2} (V_{AC}(\mathbf{r}) - V_{BC}(\mathbf{r})) \quad (\text{II.18})$$

Sous une forme plus condensée, en termes de séries de Fourier, $V_p(\mathbf{r})$ devient :

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V(\mathbf{G}) \cdot \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II.19})$$

Avec $V(\mathbf{G})$ est le facteur de forme de l'alliage ternaire donné par :

$$V(\mathbf{G}) = x \cdot V_{AC}(\mathbf{G}) + (1-x) \cdot V_{BC}(\mathbf{G}) + P \cdot \left[x(1-x) \right]^{1/2} \cdot (V_{AC}(\mathbf{G}) - V_{BC}(\mathbf{G})) \quad (\text{II.20})$$

Ce sont ces facteurs de forme qui ont été utilisés pour calculer la dépendance compositionnelle des propriétés électroniques et élastiques des alliages ternaires, en variant la valeur de p jusqu'à avoir un bon accord avec les valeurs expérimentales.

CHAPITRE III

Propriétés élastiques

Les physiciens ont été, depuis des siècles, tentés de mettre en équations, le comportement élastique de la matière. Plus ou moins générales, précises ou robustes, ces modélisations s'appuient sur la représentation du phénomène à l'aide de champs vectoriels et de tenseurs. Ceux-ci décrivent, en particulier, la déformation de l'objet ainsi que les contraintes internes qu'ils subissent. Des lois de comportement viennent lier les contraintes et la déformation qui en résultent. Les idées physiques de base sont simples: La loi de Hooke et la deuxième loi de Newton.

Nous donnons les définitions de quelques grandeurs élastiques: tenseur de déformations, tenseurs des contraintes et constantes élastiques. Pour cela, nous nous sommes inspirés du livre de Kittel [27].

3.1. Tenseur des déformations

Les déformations d'un objet sont mesurées à partir d'une position initiale, qui est généralement, la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Pour exprimer la déformation uniforme d'un cristal sous l'effet d'une contrainte, considérons un repère orthonormé par trois vecteurs u_1 , u_2 et u_3 liés au solide non déformé. Après une déformation supposée assez petite pour respecter le domaine élastique, ces trois vecteurs changent d'orientation et de longueur (figure III.1).

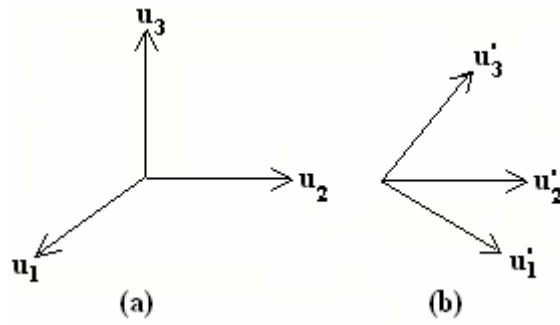


Figure III.1 : Axe de coordonnées: (a) état initial, (b) état déformé

On exprime leurs nouvelles valeurs u'_i dans le repère initial en fonction des coefficients sans dimension $(\mathcal{E}_{i,j})$ e_{ij} , en posant :

$$\mathbf{u}'_i - \mathbf{u}_i = e_{i1} \mathbf{u}_1 + e_{i2} \mathbf{u}_2 + e_{i3} \mathbf{u}_3 \quad i=1,2,3 \quad (\text{III.1})$$

Ces derniers définissent la déformation, ils sont sans dimension et leur valeur est $\ll 1$ si la déformation est faible. Voyons l'effet de la déformation (III.1) sur un autre atome initialement en :

$r = x u_1 + y u_2 + z u_3$, l'origine étant prise en un atome quelconque.

Après déformation, l'atome occupera la position $r' = x u'_1 + y u'_2 + z u'_3$, le déplacement R de la déformation est défini par:

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = X(\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}_1) + Y(\mathbf{u}'_2 - \mathbf{u}_2) + Z(\mathbf{u}'_3 - \mathbf{u}_3) \quad (\text{III.2})$$

Soit d'après l'équation (III.1) :

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = (Xe_{xx} + Ye_{xy} + Ze_{xz})\mathbf{u}_1 + (Xe_{xy} + Ye_{yy} + Ze_{yz})\mathbf{u}_2 + (Xe_{xz} + Ye_{yz} + Ze_{zz})\mathbf{u}_3 \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{III.3})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u_x(\mathbf{r})\mathbf{u}_1 + u_y(\mathbf{r})\mathbf{u}_2 + u_z(\mathbf{r})\mathbf{u}_3 \quad (\text{III.4})$$

Le solide pouvant se déformer dans les trois directions de l'espace. Un développement de R en série Taylor avec R(O) = 0 donnera alors,

$$X\epsilon_{xx} = X \frac{\delta u}{\delta X}, Y\epsilon_{yy} = Y \frac{\delta u}{\delta Y} \quad (\text{III.5})$$

Les composantes de la déformation seront définies par les relations suivantes:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right) \quad (x_1=x, x_2=y, x_3=z) \quad (\text{III.6})$$

$$\epsilon_{xx} = \frac{\delta u_x}{\delta x}; \epsilon_{yy} = \frac{\delta u_y}{\delta y}; \epsilon_{zz} = \frac{\delta u_z}{\delta z} \quad (\text{III.7})$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta y} + \frac{\delta u_y}{\delta x} \right); \epsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_y}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta y} \right); \epsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta x} \right) \quad (\text{III.8})$$

Les six coefficients $\epsilon_{\alpha\beta}$ ($\epsilon_{\beta\alpha}$) définissent complètement la déformation.

Le tenseur des déformations \mathcal{E} s'écrit:

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} \frac{\delta u_x}{\delta x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta y} + \frac{\delta u_y}{\delta x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta y} + \frac{\delta u_y}{\delta x} \right) & \frac{\delta u_y}{\delta y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_y}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_x}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_y}{\delta z} + \frac{\delta u_z}{\delta y} \right) & \frac{\delta u_z}{\delta z} \end{pmatrix} \quad (\text{III.9})$$

Les éléments diagonaux définissent les déformations d'élongation, et expriment un changement de longueur dans les directions x, y ou z alors que les déformations

notées ϵ_{XY} , ϵ_{YZ} ou ϵ_{ZX} représentent les variations d'angles entre les directions x et y, y et z, ou z et x. Une déformation quelconque peut toujours être décomposée sur :

$$\theta = \frac{\delta u_x}{\delta x} + \frac{\delta u_y}{\delta y} + \frac{\delta u_z}{\delta z} \quad (\text{III.10}) \quad \theta = \frac{\delta u_x}{\delta x} + \frac{\delta u_y}{\delta y} + \frac{\delta u_z}{\delta z} \quad (\text{III.10})$$

$$\frac{\delta u_x}{\delta x}, \frac{\delta u_y}{\delta y}, \frac{\delta u_z}{\delta z} \quad \text{Variation relative du volume.}$$

$$2\epsilon_{zz} - \epsilon_{xy} - \epsilon_{yy} \quad \text{et} \quad \epsilon_{xx} - \epsilon_{yy} \quad \text{Cisaillement tétragonal} \quad (\text{III-12})$$

$$\epsilon_{xy}, \epsilon_{yz} \quad \text{et} \quad \epsilon_{zx} \quad \text{Cisaillement trigonal} \quad (\text{III-13})$$

Les quantités $\frac{\delta u_j}{\delta j}$ avec $i,j=x,y,z$, et $i \neq j$ caractérisent les déformations qui ne sont pas dans

l'axe d'élongation: ce sont les déformations de cisaillement. Le tenseur de déformation $\bar{\epsilon}$ peut aussi être décrit par un tenseur symétrique:

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{III-13})$$

3.2. Tenseur des contraintes

Après la description de la déformation, nous introduisant ici le tenseur des contraintes qui va décrire en chaque point de l'espace la répartition des forces internes. Rappelons que la contrainte, est la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide.

Définition:

Le tenseur des contraintes, noté $\overline{\sigma}$ est une matrice symétrique 3x3. C'est tout comme le tenseur des déformations, une approximation assez grossière de ce qui se passe en chaque point du matériau (Figure III.2).

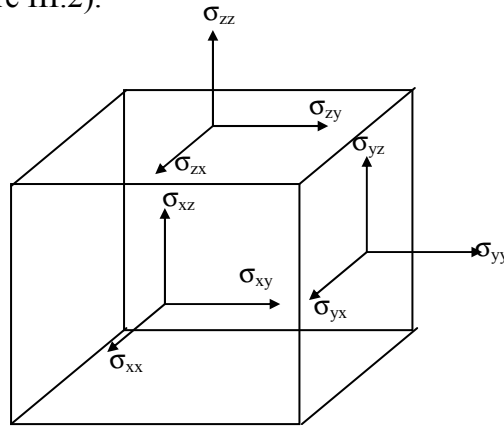


Figure III.2 a : Composantes du tenseur des contraintes

Ces composantes, notées σ_{ij} , sont les éléments du tenseur $\overline{\sigma}$, l'indice i repérant la direction dans laquelle s'exerce la contrainte et l'indice j se référant à la face sur laquelle elle s'exerce. Chaque élément σ_{ij} , représente alors une force par unité de surface ou bien une pression. Les éléments σ_{ij} , sont appelés contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement à la face. Les éléments $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles puisqu'elles agissent sur le plan de la surface, Le tenseur des contraintes est symétrique et s'écrit:

$$\overline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{(III-14)}$$

3.3 Loi de Hooke

Le tenseur des contraintes $\overline{\overline{\sigma}}$ (la cause) et le tenseur des déformations $\overline{\overline{\varepsilon}}$ (l'effet) sont liés par le tenseur des constantes élastiques $\overline{\overline{c}}$ par:

$$\overline{\overline{\sigma}} = \overline{\overline{C}} \overline{\overline{\varepsilon}} \quad (\text{III-15})$$

La notation en indice contracté permet d'écrire cette relation:

$$\sigma_{ij} = C_{i,j,k,l} \varepsilon_{k,l} \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{ij} : \text{est un élément de tenseur de rang 2} \\ \varepsilon_{k,l} : \text{est un élément de tenseur de rang 2} \\ C_{i,j,k,l} : \text{est un élément de tenseur de rang 4} \end{array} \right. \quad (\text{III-16})$$

Remarque:

Le rang d'un tenseur correspond au nombre d'indices nécessaires pour définir l'un de ces éléments: Le tenseur de rang 2 compte 3^2 composants, et le tenseur de rang 4 compte $3^4 =$

81 composants. Le produit tensoriel $\overline{\overline{\sigma}} = \overline{\overline{C}} \overline{\overline{\varepsilon}}$ reste très lourd à manipuler, c'est pourquoi nous allons faire appel à une écriture matricielle: Au tenseur $\overline{\overline{\sigma}}$ de rang 2, on associe un vecteur à 6 éléments:

$$\overline{\overline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 = \sigma_{xx} \\ \sigma_2 = \sigma_{yy} \\ \sigma_3 = \sigma_{zz} \\ \sigma_4 = \sigma_{yz} \\ \sigma_5 = \sigma_{xz} \\ \sigma_6 = \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{III-17})$$

On obtient donc un vecteur (un tenseur de rang 1) dont les composantes ne sont définis qu'à l'aide d'un seul indice, On fait de

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 = \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_2 = \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_3 = \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{III-18})$$

e pour le tenseur des déformations ε

En notation contractée, la loi de Hooke s'exprime alors:

$$\sigma_\alpha = C_{\alpha\beta} \varepsilon_\beta \quad \text{avec } \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \quad (\text{III-19})$$

$C_{\alpha\beta}$ étant réduit à une matrice 6x6 (tenseur de rang 2) symétrique possédant donc 21

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (\text{III-20})$$

Dans le cas d'une symétrie cubique [27], et en utilisant un repère dont les axes sont parallèles aux directions cristallographiques [100], [010] et [001] dans le système cubique, il ne reste que trois éléments indépendants $C_{\alpha\beta}$ non nuls: C_{11} , C_{12} et C_{44} pour déterminer les propriétés élastiques du milieu. La matrice $\overline{\overline{C}}$ s'écrit:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{III-21})$$

3.4. Densité d'énergie élastique

la densité d'énergie élastique U est une fonction quadratique des déformations, dans le cas où la loi de Hooke s'applique:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{III-22})$$

On obtient les composantes des contraintes en dérivant U par rapport à la composante de déformation correspondante. Ce résultat découle de la définition de l'énergie potentielle:

$$\sigma_{xx} = \frac{\delta U}{\delta \varepsilon_{xx}} = \frac{\delta U}{\delta \varepsilon_1} = C_{11} \varepsilon_{12} + \frac{1}{2} \sum_{\beta=2}^6 (C_{1\beta} + C_{\beta 2}) \varepsilon_{\beta} \quad (\text{III-23})$$

3.5. Module de compression et compressibilité

Soit une dilatation uniforme $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{1}{3} \delta$ Pour cette déformation l'énergie d'un cristal cubique est:

$$IU = \frac{1}{6} (C_{11} + 2C_{12}) \delta^2 \quad (\text{III-24})$$

On définit le module de compressibilité B par:

$$U = \frac{1}{2} B \delta^2 \quad (\text{III.25})$$

Soit pour un cristal cubique:

$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{III.26})$$

La compression K est définie par $K = \frac{1}{B} I$

3.6 Méthode de calcul

Dans nos calculs, nous nous sommes basés sur le modèle « Valence Force Field » de Harrison [28], qui permet de faire le lien entre les constantes élastiques C_{ij} et le paramètre de Kleinman ξ [29]. L'ajustement des facteurs de forme, nous a permis de calculer la polarité α_p définie par Vogl [30],

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III-27})$$

Où $V_S(3)$ et $V_A(3)$ sont les facteurs de formes symétriques et antisymétriques à $G(111)$, respectivement. En utilisant la description de Baranowski [31,32], et les interactions covalentes et de recouvrement des liaisons dans les composés tétraédriques et après simplification, nous obtenons les expressions des constantes élastiques suivantes:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\hbar^2}{m} (5+\lambda) (1-\alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} - 0.6075 \left((1-\alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right) \right] \quad (\text{III-28})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4d^5} \left[4.37 \frac{\hbar^2}{m} (3-\lambda) (1-\alpha_p^2)^{\frac{3}{2}} + 0.6075 \left((1-\alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \right) \right] \quad (\text{III-29})$$

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha+\beta) - 0.136SC_0 - C\xi^2 \quad (\text{III-30})$$

Où $d = \frac{a\sqrt{3}}{4\lambda}$ est la distance des proches voisins (a étant le paramètre du réseau) et λ un paramètre constant de valeur 0.738.

$$S = \frac{Z^{*2}}{\varepsilon} \quad (\text{III-31})$$

et

$$C_0 = \frac{e^2}{d^4} \quad (\text{III-32})$$

Z^* est la charge effective calculée selon la relation suivante :

$$z^* = e_T^* - \frac{8}{3} \alpha_p (1 - \alpha_p^2) \quad (\text{III-33})$$

Et e_T^* est donnée par la relation suivante:

$$2e_T^* = -\Delta z + \frac{8\alpha_p}{1 + \alpha_p^2} \quad (\text{III-34})$$

Le coefficient C apparaissant dans l'équation est donné par:

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.266SC_0 \quad (\text{III-35})$$

Les quantités α et β représentent les forces de constantes. En utilisant la relation entre C_{11} et C_{12} donnée dans les équations (III-28) et (III-29) et après simplification, les coefficients α et β sont donnés par:

$$\alpha = \frac{d}{\sqrt{3}} (C_{11} + 3C_{12}) + \frac{d}{3\sqrt{3}} (1.473SC_0) \quad (\text{III-36})$$

$$\beta = \frac{d}{\sqrt{3}} [(C_{11} - C_{12}) - 1.473SC_0], \quad (\text{III-37})$$

ξ est le paramètre de Kleinman .Il est relié au tenseur de déformation interne . La relation entre le paramètre ξ et les constantes élastiques données dans la référence [33], et après simplification est:

$$\text{Où} \quad \xi = \frac{(2C_{12}-C')}{(C_{11}+C_{12}-C')} \quad (\text{III-38})$$

$$C'=0,314SC_0 \quad (\text{III-39})$$

Après remplacement de (III- 38) dans (III- 39), nous obtenons:

$$\xi = \frac{(2C_{12}-C')}{(C_{11}+C_{12}-C')} \quad (\text{III-40})$$

CHAPITRE IV

Résultats et discussions

4.1. Composés binaires

Les semi-conducteurs II-VI sont importants pour de nombreuses applications comme appareils émetteurs de lumière blanche, éléments de cellules solaires, ou des couches conductrices transparentes tampon fins (films). Ceci est principalement dû à leur participation directe à large bande lacunes [34]. Récemment, les chalcogénites ont été d'un grand intérêt [20,35-40] due à l'amélioration de la dureté. Chalcogénites de zinc et de cadmium sont réfractaires, chimiquement corrosifs (à l'état liquide et la vapeur d'État) des matériaux à haute pression de leurs propres vapeurs à des températures supérieures à celle de fusion. C'est prometteur pour l'amélioration des semi-conducteurs à base II-VI de la performance du dispositif. Pour profiter de ces matériaux, une connaissance approfondie de leurs propriétés est importante pour l'évaluation de leur domaine d'applications prévisibles.

Sur la base de la méthode du pseudo-potentiel, ce travail fait état d'une investigation théorique poussée de la bande-paramètres pour les chalcogénites à base de zinc et de cadmium , à savoir ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe composés semi-conducteurs. La structure zinc-blende est envisagée pour tous les composés de l'enquête. Quantités telles que, l'énergie des lacunes, masses effectives, indice de réfraction, constantes diélectriques et élastiques sont rapportées et comparées à la disposition expérimentale et théorique de données précédentes. Les relations donnant la dépendance énergétique de l'écart des bandes, la masse effective des électrons et les constantes diélectriques statiques ont été proposées pour les matériaux à étudier. Nous avons également exprimé la variation du rapport $\frac{C_{12}}{C_{11}}$ en fonction de l'ionicité.

La méthode empirique pseudo-potentielle (EPM) [1] a été utilisée dans nos calculs actuels. Le régime de base est de supposer que les électrons sont étroitement liés à leur noyau, et les bandes de valence et de conduction des électrons sont influencés. La méthode empirique consiste à adapter les paramètres à des données expérimentales pour l'écart entre les bandes, pour des points spécifiques de haute symétrie. Le potentiel peut être développé dans le plan de Fourier des ondes, une équation pour la détermination de la valeur propre E_k peut être établie. La dimension du problème est une valeur propre (136 matrices, toutefois, une base de 59 plan-ondes peut donner une bonne convergence.

Les paramètres empiriques appelés facteurs de formes symétriques V_S et antisymétriques V_A du pseudo-potentiel sont optimisés à l'aide de la méthode non-linéaire des moindres carrés [41,42]. Les données expérimentales et les données connues concernant la bande interdite d'énergie pour ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe à haute symétrie dans la zone de Brillouin utilisés dans la procédure d'installation sont indiquées dans le tableau 1. Les données ajustées pour les facteurs de formes symétriques V_S et antisymétriques V_A du pseudo-potentiel et les constantes utilisées pour les composés binaires d'intérêt sont répertoriés dans le tableau 2. L'appel de cette méthode est que la structure électronique peut être calculée par la résolution d'une équation de Schrödinger d'électrons. La méthode est simple à mettre en œuvre et ne nécessite pas un grand effort de calcul, en ce qui concerne les premiers principes de calcul.

4.1.1. Propriétés électroniques

Le calcul des structures électroniques des bandes zinc-blende CdSe (solide courbes) et ZnTe (courbes en tirets) sont indiquées dans la Fig. 1. Le zéro de référence pour l'énergie est au sommet de la bande de valence. Les bandes de conduction sont plus délocalisées et plus «libres» que dans les bandes de valence. Le comportement des électrons libres est plus dispersif. Par rapport à ZnTe, l'écart optique dans CdSe est réduit. Toutefois, l'écart antisymétrique (l'écart entre la première bande de valence et la vingt et unième bande de valence au point X dans la zone de Brillouin) et la largeur de bande de valence (VBW) dans CdSe, ont considérablement augmenté en taille. En outre, les bandes de valence sont moins dispersées. Selon Chelikowsky et al. [49], appelé le «fossé» antisymétrique est lié à l'ionicté des semi-conducteurs. Elle croît avec l'augmentation de l'ionicté du semi-conducteur. Cette raison donne une information qualitative sur le caractère semi-conducteur [18]. Nos résultats montrent que l'écart de CdSe antisymétrique est plus grand que celui de ZnTe suggérant ainsi que CdSe est plus ionique que ZnTe. Cela est compatible avec l'échelle de Phillip's relative à l'ionicté [10] où le facteur d'ionicté de CdSe est signalé à 0.699 et celui de ZnTe à 0.609. En outre, l'augmentation de la VBW dans CdSe par rapport à ZnTe est compatible avec la tendance générale que l'VBW dans les semi-conducteurs diminue avec l'augmentation du paramètre de maille [1]. On peut attribuer cette tendance à une réduction de l'hybridation avec l'augmentation de la séparation des constituants atomiques. Il convient de souligner qu'une fonction très utile de la structure de bande de CdSe et de ZnTe, est que ces matériaux peuvent être alliés afin d'obtenir un écart entre bandes situé entre les deux cas limites, CdSe (écart de 1,69 eV) et ZnTe (écart de 2.263 eV).

Composés	$E_{\Gamma^{\Gamma}}$ (eV)	E_{Γ^X} (eV)	E_{Γ^L} (eV)
ZnTe	2.263^a	3.05^b	2.38^b
CdTe	1.5045^c	3.48^d	2.47^d
CdSe	1.69^c	3.875^f	3.612^f
ZnSe	2.70^g	3.18^h	3.31^h

Tableau 1. Les bandes d'énergies de ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe fixées dans les ajustements.

- a) Valeur expérimentale reportée en Réf. [43].
- b) Valeur expérimentale reportée en Réf. [37].
- c) Valeur expérimentale reportée en Réf. [44].
- d) Les valeurs théoriques en Réf. [45].
- e) Valeur expérimentale en Réf. [46].
- f) Valeurs théoriques rapportées dans la Réf. [47].
- g) Valeurs expérimentales en Réf. [48].
- h) Valeurs théoriques en Réf. [4].

Composés	Facteurs de forme (Ry)						Paramètre de maille (Å)
	V _S (3)	V _S (8)	V _S (11)	V _A (3)	V _A (4)	V _A (11)	
ZnTe	-0.247293	0.021262	0.25572	0.030061	0.116	0.290414	6.1037
CdTe	-0.396388	0.198275	0.45954	0.1311	0.28	0.708145	6.48
CdSe	-0.404199	0.174645	0.34092	0.1311	0.28	0.572395	6.052
ZnSe	-0.225333	0.007070	-0.00742	0.11649	0.1299	-0.100180	5.668

Tableau 2 : Les facteurs de forme et les paramètres de maille de ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe.

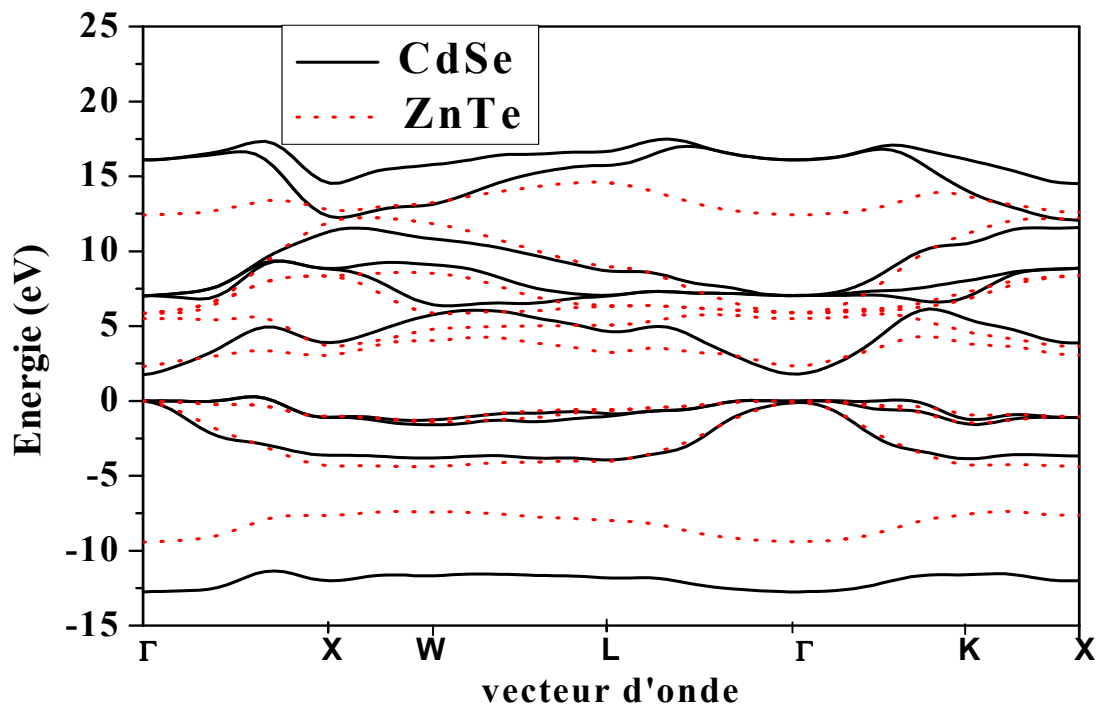


Fig. 1 : Structure de bandes pour le zinc-blende CdSe (courbes pleines) et de ZnTe (courbes en pointillées).

Afin de trouver une relation entre la bande interdite d'énergie appelée: "antisymétrique" et le paramètre de maille, nous avons tracé la Figure 2. Nous remarquons qu'il n'y a pas une relation monotone qu'on peut exprimer à l'aide d'une loi qui relie la bande interdite "antisymétrique" au paramètre de maille.

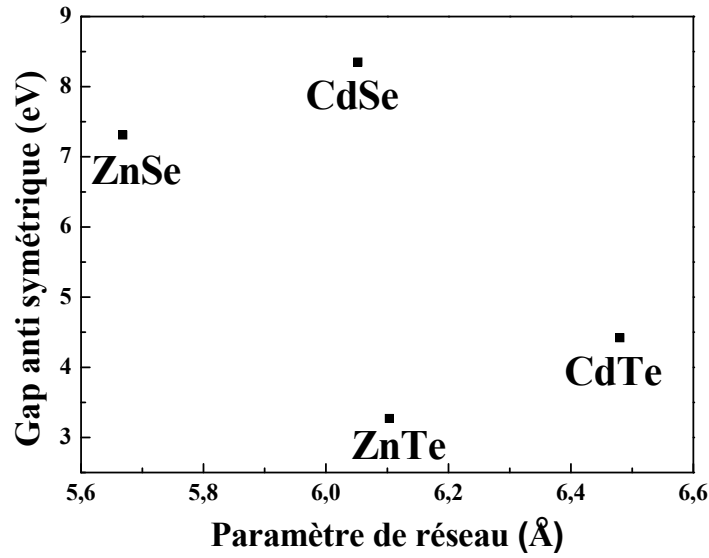


Fig. 2: Le gap anti-symétrique en fonction du paramètre de maille.

La densité de charge le long de la direction [111] pour la somme des quatre bandes de valences au point Gamma est calculée au moyen des fonctions d'ondes obtenues à partir des calculs des structures de bandes pour les matériaux CdTe et ZnTe (Fig. 3) et CdSe et CdTe (Fig. 4). La densité de charge électronique totale est obtenue par :

$$\rho(r) = \sum_n \sum_k e |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (1)$$

où $\psi_{n,k}(r)$ sont les fonctions d'onde électronique et n est l'indice de la bande.

Les sommes sont prises sur tous les Etats de la zone de Brillouin occupés par des bandes.

Toutefois, dans les calculs actuels, nous ne sommes pas intéressés par le total des frais de distribution de valence dans l'ensemble de la zone de Brillouin, mais aux points de plus

grandes symétries dans cette zone. Donc :

$$\rho(r) = e |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad (2)$$

avec $k = \frac{2\pi}{a}(0,0,0)$ des stands pour le point Γ (a est le paramètre de maille).

Compte tenu de la Fig. 3, on peut constater que plus la densité de charge est située entre les sites atomiques est très décalée vers l'anion. C'est parce que CdTe et ZnTe impliquent un transfert de charge entre les états voisins proches, à partir du II de l'atome VI. Pratiquement il n'ya pas de frais dans les régions interstitielles. La situation est quelque peu différente de celle indiquée pour les semi-conducteurs III-V [50,51] où le passage à l'anion est moins important que celui de CdTe et ZnTe (II-VI semi-conducteurs). L'ionicité est plus élevée dans les semi-conducteurs II-VI par rapport à celle des semi conducteurs II-VI. En allant de CdTe à ZnTe, on peut constater une amélioration de la densité de charge en montant de l'anion du site et dans la région interstitielle la plus proche de l'anion accompagnée par une évolution vers le cation. Ceci est cohérent avec le fait que CdTe est plus ionique que Zn Te [10]. La même qualité d'image peut être vue dans Fig. 4 pour CdSe et CdTe. Toutefois, on peut noter que l'ajout d'atomes de Cd ou Te au lieu de ceux Se déplace la densité de charge vers le cation et la diminution de son montant au site de l'anion. Cela donne une amélioration de la densité de charge dans les régions les interstitielles plus proches à l'anions et au cation. En outre, le maximum de la densité de charge est soulevé et déplacé vers le centre de la liaison.

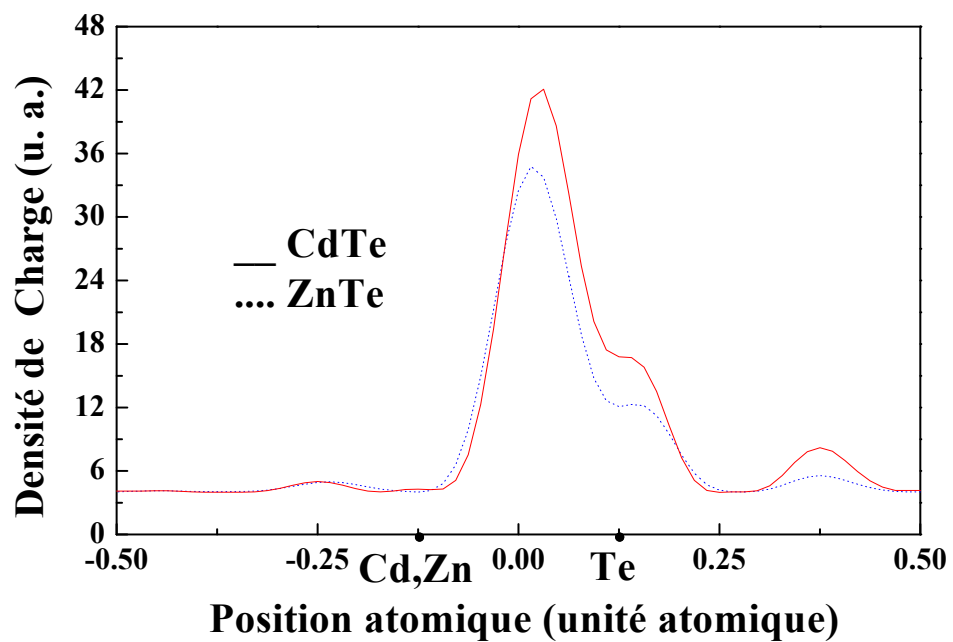


Fig. 3: La somme des bandes de valence de la densité de charge de Cd Se (courbe pleine) et Cd Te (courbe en pointillés) le long de la direction [111].

Erreur ! Objet incorporé incorrect.

Fig. 4: La somme des bandes de valence de la densité de charge de CdTe (courbe pleine) et de ZnTe (courbe en pointillés) le long de la direction [111].

La figure 5 représente la densité de charge de la première bande de conduction au point Gamma, suivant la direction [111], calculée par la méthode EPM pour le composé CdTe. Les résultats montrent que le profil de la densité est différent de ceux des densités de charges des bandes de valences. Nous remarquons un très fort caractère s autour de l'anion Te. Cependant la densité de charge électronique entourant l'anion est plus grande que celle entourant le cation Cd. Ceci est conforme aux étapes antérieures faites sur les distributions de charges des composés III-V [52]. Par ailleurs, ces distributions sont concentrées au niveau de l'anion, et aux régions interstitielles à côté de l'anion et du cation. Cependant, la région de liaison (entre le cation et l'anion) est pratiquement dépourvue de charge électroniques (faible densité de charge), ce qui caractérise une orbitale anti-liante. Cette distribution de charge est du type "s". De plus, l'intensité de la densité de charge augmente au niveau de l'anion, par contre elle diminue au niveau du cation. Cela peut-être dû à la taille des cations.

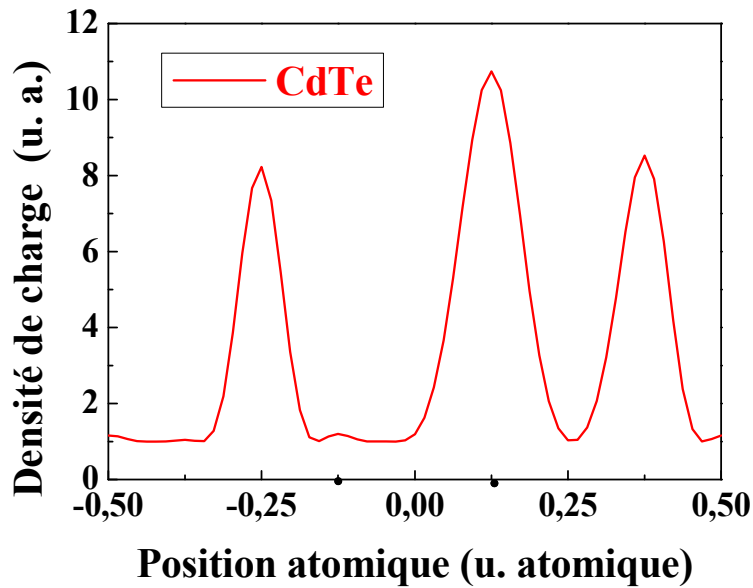


Fig. 5: La première bande de conduction de la densité de charge de CdTe le long de la direction [111].

La figure 6 représente la densité de charge de la première bande de conduction au point Gamma, suivant la direction [111], calculée par la méthode EPM pour le composé CdSe. On remarque que le profile de cette courbe est peu différent de celui de la densité de charge du composé CdTe, où une quantité plus importante de la densité de charge est observée au niveau de l'anion Se, alors qu'une quantité moins importante de la densité de charge est observée à côté du cation Cd. Le maximum de la densité de charge, est situé au niveau de l'anion Se. Cependant la densité de charge dans la région interstitielle à côté de l'anion et du cation dans le CdSe est diminuée par rapport à celle dans CdTe. Qualitativement, les deux profiles de CdTe et CdSe possèdent la même forme, ce qui caractérise une orbitale anti-liante aussi dans CdSe. Cette distribution de charges est du type s.

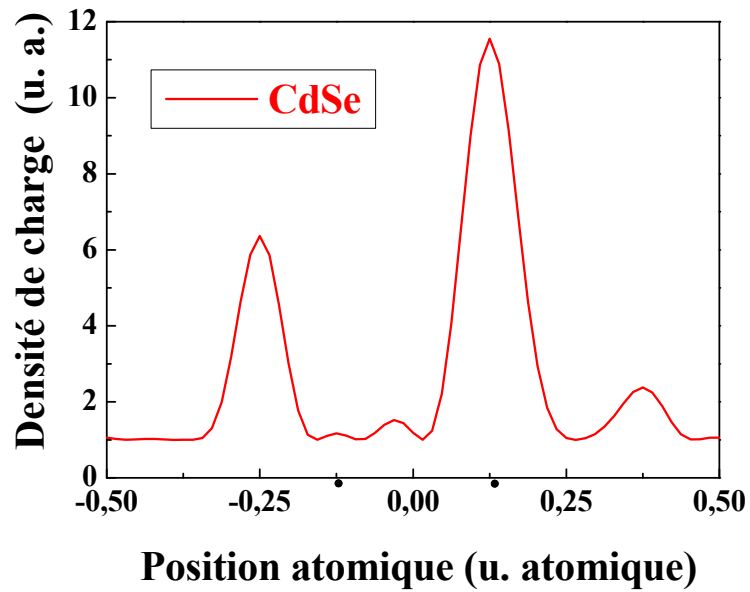


Fig. 6: La première bande de conduction de la densité de charge de CdSe le long de la direction [111].

La masse effective, qui est étroitement liée avec le transporteur, la mobilité, est connue pour être l'un des plus importants paramètres de dispositif [53]. La masse effective théorique est en général un tenseur à neuf composantes défini comme [54] :

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{4\pi}{h^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (3)$$

Où E est le transporteur d'énergie et k_i sont les composantes du vecteur d'onde k dans un semi-conducteur dans un champ de potentiel périodique. Toutefois, pour un cas simple très idéalisé, c'est-à-dire, pour le groupe qui se produit précisément au extremum $k = 0$ et la relation parabolique (comme dans le cas ici, voir figure 1), la masse effective est un scalaire et peut être obtenue à partir de cette relation:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (4)$$

En utilisant l'équation (4), nous avons calculé la masse effective des électrons pour tous les matériaux étudiés dans notre travail. Nos résultats sont indiqués dans le tableau 3. On trouvera également des comparaisons avec les données connues de la littérature. Nos résultats concernant la masse effective des électrons dans CdSe et ZnSe sont en excellent accord avec les données théoriques dans Réf. [56], considérant que l'accord entre nos résultats et les données connues citées dans Réf. [55] pour ZnTe et ZnSe est à quelques pour cent. Pour CdTe, notre résultat est une prévision et pourra servir comme référence. Cet accord est généralement meilleur que celui signalé pour les composés semi-conducteurs III-V [58]. La raison réside dans le fait que l'énergie des lacunes de la bande des semi-conducteurs III-V est plus petite que celle des semi-conducteurs proches II-VI. L'écart entre les bandes de valence et de conduction dans les composés III-V conduit à une forte interaction entre eux, ceci rend la variation de la relation de dispersion d'énergie non parabolique avec k (non proportionnelle à k). Cela indique que la précision dans l'utilisation de l'équation (4) pour les semi-conducteurs III - V est moins que celle des composés II-VI.

Nous avons proposé une relation exprimant la dépendance énergétique de la masse effective des électrons semi-conducteurs binaires en fonction de l'énergie de la bande interdite sous la forme suivante:

$$\frac{m_e^*}{m_0} = 5.17004 - 7.46699 E_g + 3.63286 E_g^2 - 0.57525 E_g^3 \quad (5)$$

Où E_g correspond à la bande interdite d'énergie. Cette forme est similaire à celui proposé par Kolbas et cité dans Réf. [54] pour les composés III-V semi conducteurs.

Tableau 3: La masse effective de l'électron $\left(\frac{m_e^*}{m_0}\right)$, l'indice de réfraction (n), la constante diélectrique statique (ϵ_0) et la constante diélectrique optique de haute fréquence (ϵ_∞) pour la structure zinc-blende des semi-conducteurs binaires ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe.

Composés	$\frac{m_e^*}{m_0}$	n	ϵ_0	ϵ_∞
ZnTe	0.21 ^a , 0.2 ^b	2.63 ^a , 2.72 ^b	7.04 ^a , 7.4 ^d	6.91 ^a
CdTe	0.20 ^a	2.91 ^a , 2.72 ^b	9.90 ^a , 10.2 ^d	8.47 ^a
CdSe	0.15 ^a , 0.158 ^c	2.83 ^a , 2.5 ^b	9.23 ^a	7.99 ^a
ZnSe	0.17 ^a , 0.21 ^b , 0.174 ^c	2.51 ^a , 2.5 ^b	9.64 ^a , 9.1 ^d	6.32 ^a

^a Les résultats du présent travail.

^b Les résultats expérimentaux connu à partir des données de la Réf. [55]

^c Les valeurs théoriques de la Réf. [56]

^d Les données citées dans la Réf. [57]. On note que les constantes diélectriques optiques qui sont données par cet ouvrage.

4.1.2. Propriétés optiques

L'indice de réfraction des matériaux semi-conducteurs est très important dans la détermination des propriétés électriques et optiques du cristal. La connaissance de ce paramètre est essentielle dans la conception de lasers à hétéro-structures optoélectroniques,

ainsi que dans les applications de cellules solaires. On a utilisé le modèle de Moss dans nos calcul [59]. Ce modèle est directement lié à l'énergie fondamentale de la bande interdite (E_g) :

$$E_g n^4 = k \quad (6)$$

où k est une constante ayant une valeur de 108 eV. Le modèle a été préféré sur d'autres modèles [60,61], car il donne des valeurs qui sont en bon accord avec les données connues dans les semi-conducteurs II-VI [20]. En outre, la notion de comportement diélectrique des solides est importante pour plusieurs propriétés des électrons périphériques [62]. Dans cette présente étude, les constantes diélectriques statiques et de haute fréquence ont été calculées pour tous les matériaux étudiés. La constante diélectrique de haute fréquence est évaluée à partir de la relation suivante:

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (7)$$

La constante diélectrique statique sera déduite à partir de la relation [63]:

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (8)$$

où α_p est la polarité telle qu'elle est définie par Vogl [30]:

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (9)$$

$V_s(3)$ et $V_A(3)$ sont les facteurs symétrique et antisymétrique du pseudo-potentiel à G (111), respectivement. α_c est le coefficient de covalence défini comme,

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (10)$$

Nos résultats concernant n , ϵ_0 et ϵ_∞ pour tous les matériaux étudiés sont présentés dans le tableau 3 ainsi que les données disponibles connues dans la littérature. Généralement, l'accord entre nos résultats et les données connues sont raisonnablement bons.

La figure 7 représente la variation de la constante diélectrique de haute-fréquence en fonction de la largeur de la bande interdite fondamentale des composés CdTe, CdSe, ZnTe, et ZnSe. On remarque que cette constante diminue avec l'augmentation de la bande interdite fondamentale. Cette variation est monotone, non-linéaire et suit la loi suivante pour les chalcogenides sous investigation:

$$\epsilon_\infty = 13.66 - 4.39E_g + 0.62E_g^2 \quad (11a)$$

Cette équation peut-être utile pour la détermination de ϵ_∞ des semi-conducteurs chalcogenides on connaissant seulement leur bande interdite.

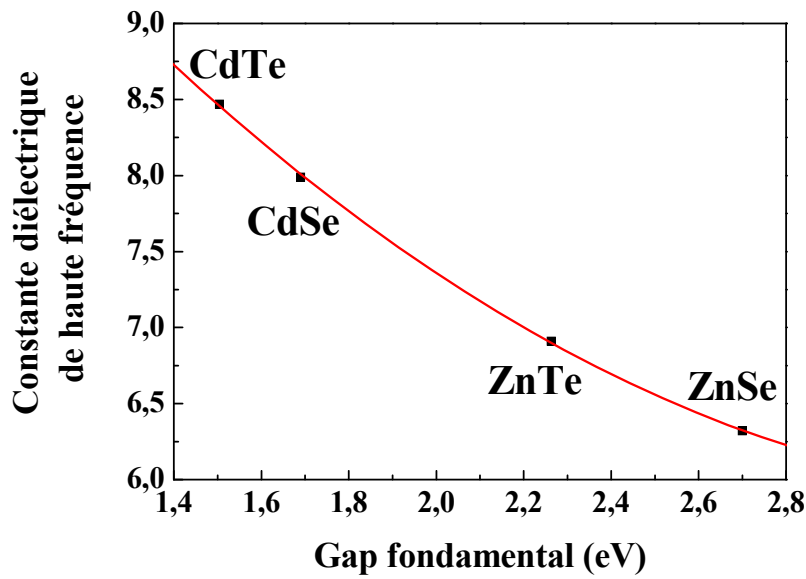


Figure 7: La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la largeur de la bande interdite fondamentale.

La figure 8 montre la variation de la constante diélectrique statique en fonction de la bande interdite fondamentale des composés CdTe, CdSe, ZnTe et ZnSe. Nous observons que cette constante diminue avec l'augmentation de la bande interdite jusqu'à l'élément ZnTe, ensuite elle augmente d'une façon significative pour le composé ZnSe. Cette variation est non monotone et non linéaire. En faisant une interpolation quadratique d'ordre deux, nous obtenons la relation suivante:

$$\epsilon_0 = 41.26 - 31.80E_g + 7.43E_g^2 \quad (11b)$$

On note que le coefficient de courbure de la constante diélectrique statique est très important ce qui reflète la non linéarité de ϵ_0 en fonction de E_g .

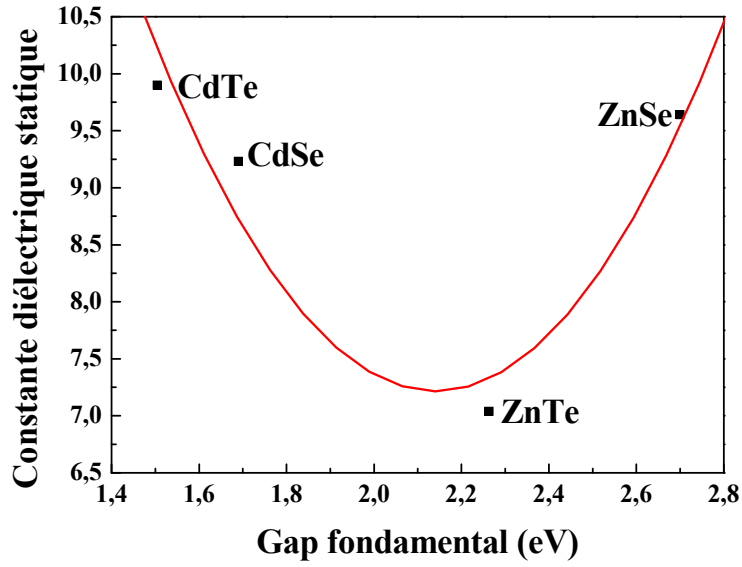


Figure 8. Variation de la constante diélectrique statique en fonction de la bande interdite fondamentale.

4.1.3. Propriétés mécaniques

L'effet des contraintes sur les propriétés électroniques nécessite une connaissance des propriétés mécaniques du matériau, et en particulier les constantes élastiques, qui décrivent la réponse à un stress macroscopique appliqué. A cet effet, la connaissance des constantes élastiques des matériaux à étudier ont été calculées suivant la même procédure utilisée par Bouarissa [32], qui repose essentiellement sur les travaux de Baranowski [31], où sont exprimés C_{11} , C_{12} et C_{44}

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2) - 0.6075] \quad (12)$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2) + 0.6075] \quad (13)$$

Dans les équations (12) et (13), d est la distance entre les plus proches voisins, λ est un

paramètre sans dimension qui a une valeur constante de 0,738 [31] m et est la masse de l'électron. La constante de raideur élastique a été obtenue dans le cadre de la valence force field model [28,64], comme:

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (14)$$

Nos résultats concernant, C_{11} , C_{12} et C_{44} pour tous les semi-conducteurs d'intérêt sont indiqués dans le tableau 4, qui contient également les données expérimentales et théoriques disponibles pour la comparaison. En générale, il y a un bon accord entre nos résultats et ceux rapportés dans les Réfs. [39, 65, 66].

Tableau 4. Constantes élastiques pour ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe.

Composé	C_{11} (10^{11} dyn/cm ²)	C_{12} (10^{11} dyn/cm ²)	C_{44} (10^{11} dyn/cm ²)
ZnTe	9.81 ^a , 7.13 ^b	4.21 ^a , 4.07 ^b	3.97 ^a , 3.12 ^b
CdTe	6.24 ^a , 6.81 ^c , 5.35 ^b	2.70 ^a , 3.93 ^c , 3.68 ^b	2.52 ^a , 2.21 ^c , 1.994 ^b
CdSe	8.84 ^a , 8.81 ^c	3.83 ^a , 5.36 ^c	3.57 ^a , 2.74 ^c
ZnSe	9.04 ^a , 8.59 ^d	3.99 ^a , 5.06 ^d	3.61 ^a , 4.06 ^d

^a Le présent travail.

^b La référence expérimentale [65].

^c La référence théorique [39].

^d La référence expérimentale [66].

Très récemment, Adachi [55] a proposé une relation entre le rapport des constantes

élastiques $\frac{C_{12}}{C_{11}}$ et l'ionicité comme suit:

$$\frac{C_{12}}{C_{11}} = 0.469f_i + 0.313 \quad (15)$$

Le meilleur ajustement de l'équation (15) est indiqué dans la Fig. 9 (courbe pleine). Nos résultats concernant ce rapport en fonction de l'ionicité découlant de Phillips [10] et Christensen et al. [67] sont également illustrés dans la Fig. 9 comme symboles. On note que les valeurs du rapport obtenues dans notre cas sont pratiquement constantes ($\sim 0,43$) et légèrement différentes de celles suggérées par le rapport Adachi. Cependant, il remarque que les valeurs du composé chalcogénide pour Zn sont plus proches de ceux de Adachi pour Cd.

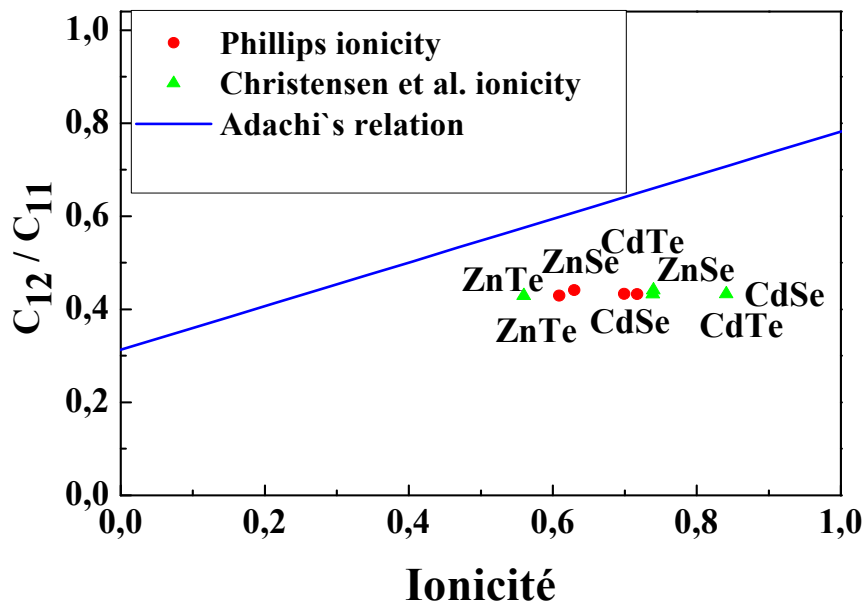


Fig. 9. Les constantes élastiques en fonction du facteur d'ionicité.

4.2. Alliages ternaires

Il y a actuellement beaucoup d'intérêt à étudier les alliages ternaires II-VI comme matériaux pour leurs applications en optoélectronique (appareil bleu pour la proche ultraviolette spectrale région [68]). Ces alliages ont des propriétés semi-conductrices, qui sont particulièrement adaptées pour la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique dans le photovoltaïque ou la photo des dispositifs électrochimiques. Ils peuvent également être utilisés pour la photo-assistée de décomposition de l'eau [69,70]. CdTe et CdSe ont une structure hexagonale cubique de wurtzite et deux cubes de structures zinc-blende. La forme commune de CdTe est connue pour avoir la structure zinc-blende, il est possible de produire des cristaux minces avec la phase zinc-blende de CdSe ainsi [71]. Dans la présente étude, les structures cristallines des composés semi-conducteurs CdTe et de CdSe et leurs alliages ternaires sont supposées avoir la structure de zinc-blende.

Afin d'améliorer encore notre compréhension des propriétés physiques de l'appareil pour les applications, une étude théorique a été effectuée de façon à étudier la structure de bande électronique et les propriétés optiques des alliages. Les calculs sont principalement basés sur les données empiriques de la méthode du pseudo-potentiel (EPM) dans le cadre d'un rapprochement du cristal virtuel (VCA).

Pour rendre en compte la composition des troubles, une correction a été mise en place. Traditionnellement, en raison de sa simplicité, le VCA est préférée pour le traitement chimique des alliages semi-conducteurs dans le désordre. En combinaison avec la VCA, l'EPM offre le plus efficace et précis moyens d'obtenir l'ensemble de la structure de bandes des alliages [72-74].

Les calculs sont basés essentiellement sur l'EPM. L' Hamiltonien de l'alliage ternaire est décrit par un élément du fait des quasi-cristaux, et une autre composante dans laquelle les effets du trouble sont inclus comme des fluctuations autour du quasi-cristaux [2,3]. Les pseudo-potentiels sont caractérisés par un ensemble de facteurs de forme atomique, qui sont ajustés au moyen d'un aménagement intérieur des moindres carrés non-linéaire [41,42]. Un bon accord avec les bandes d'énergies est nécessaire à certains points de haute symétrie de la zone de Brillouin. Le paramètre de maille est calculé à l'aide de la loi de Vegard. Les constantes optiques sont calculées en combinant l'EPM au titre de l'amélioration de VCA avec le modèle orbital d'Harrison [28].

4.2.1 Propriétés électroniques

La variation de l'écart de la bande d'énergie directe en fonction du contenu de sélénium pour l'utilisation du VCA (sans désordre) est montrée dans la Fig. 10 (courbe pleine). On note que l'utilisation de la VCA seule varie la non-linéarité à l'égard de la composition x suggérant un écart de bande optique de -0,68 eV. Cette valeur est en désaccord avec la valeur expérimentale de 0,94 eV signalés par Poon et al. [75]. L'écart est principalement attribué à l'utilisation de la VCA qui néglige l'effet du désordre compositionnel. En fait, l'origine physique de la bande d'archet peut être attribuée à des troubles des effets créés par la présence de différents cations (anions) [76, 77, 78]. Au moyen d'une VCA qui comprend la composition comme un trouble potentiel, le potentiel d'alliage a été exprimé comme:

$$V_{CdSeTe}(G) = xV_{CdSe}(G) + (1-x)V_{CdTe}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{CdSe}(G) - V_{CdTe}(G)) \quad (16)$$

où p dans l'équation (16) est un paramètre ajustable qui simule les effets de désordre. Nos résultats concernant la composition x sont représentés par la figure 10 (courbe en pointillés).

Compte tenu de cette courbe, qui varie non-linéaire par rapport à x , mais montre un comportement différent de celui de la courbe donnant ainsi un paramètre d'archet de 0,94 eV, qui est en excellent accord avec celui rapporté par Poon et al. [75]. La bonne entente est concluante pour $p = 1,26$. En supposant que le gap (E_g) en fonction de la composition de l'alliage est une courbe quadratique, on définit une bande interdite s'inclinant d'un facteur b par la relation :

$$E_g(x) = (1-x)E(0) + xE(1) - bx(1-x) \quad (17)$$

L'expression analytique obtenue pour l'utilisation de l'amélioration de la VCA est :

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 1.25 - 0.39x + 0.94x^2 \quad (18)$$

L'énergie est exprimée en eV.

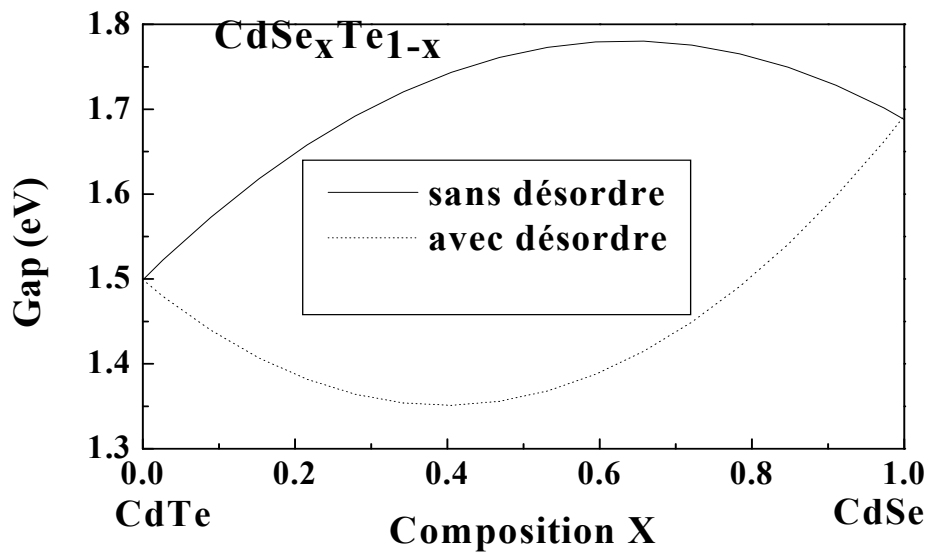


Fig.10. La bande d'énergie interdite directe (E_{Γ}^{Γ}) dans CdS_xTe_{1-x} des cristaux mixtes en fonction de la concentration de sélénium, sans désordre (courbe pleine) et avec désordre (courbe en pointillés).

En tenant compte de l'effet du désordre compositionnel, les courbes de conduction et de valence sont affichées dans la Fig. 11. Le niveau d'énergie de référence est considéré comme le sommet de la bande de valence au point Γ . On note que tous les gaps d'énergies présentent un comportement non linéaire par rapport à la composition x avec différents taux de variation. En utilisant la même forme de l'équation (17), les écarts indirects entre les bandes sont exprimés par:

$$E_{\Gamma}^L(x) = 2.47 - 3.288x + 4.43x^2 \quad (19)$$

$$E_{\Gamma}^L(x) = 2.47 - 3.288x + 4.43x^2 \quad (20)$$

Les termes quadratiques dans les équations (19) et (20) sont dénommés comme paramètres de courbure. Leurs valeurs sont trop grandes par rapport à celle de la VCA. Cela indique que l'effet de trouble est plus important que dans le cas du VCA. Pour le fait que l'expérience et la théorie concernant d'autres paramètres de courbure ne sont pas disponibles, nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de référence. L'ampleur des transitions du gap du direct au indirect est examinée par nos calculs. Comme il est clairement vu dans la Fig. 11, nos résultats suggèrent qu'il n'y a pas de transition entre les gaps directs et indirects sur l'ensemble des structures de composition dans la gamme 0-1.

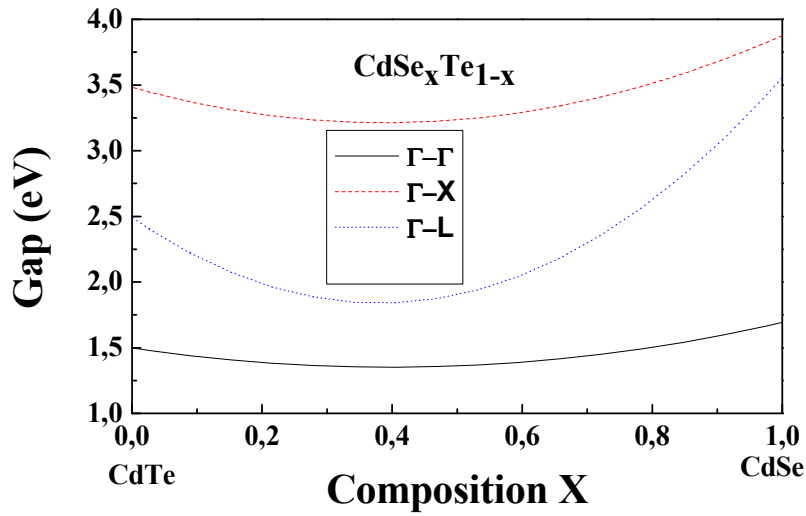


Fig.11. Les Gaps direct des bandes énergies mixtes (E_{Γ}^{Γ}) (courbe pleine) et indirects E_{Γ}^X (courbe pointillée) et E_{Γ}^L (courbe pointillée) des cristaux en fonction de la concentration de sélénium.

4.2.2 Propriétés optiques

L'indice de réfraction des matériaux semi-conducteurs est très important pour la détermination des propriétés électriques et optiques du cristal. La Fig. 12 représente l'indice de réfraction de l'alliage ternaire sous investigation en fonction de la composition x . On remarque que l'indice de réfraction diminue lorsque la concentration de Se augmente. A l'exception de la concentration $x = 0.50$, où la diminution de l'indice de réfraction est monotone. Généralement, l'indice de réfraction des matériaux solides est fortement lié à leur bande d'énergie interdite. Etant donné que la bande d'énergie interdite augmente avec l'augmentation de la concentration de Se (voir Fig. 10), et l'indice de réfraction diminue avec x , on peut en conclure que pour l'alliage ternaire $CdSe_xTe_{1-x}$ la plus petite bande d'énergie

interdite possède l'indice de réfraction le plus élevé. Cette tendance est généralement commune pour la plus part des semi-conducteurs du type III-V et II-VI [79-81].

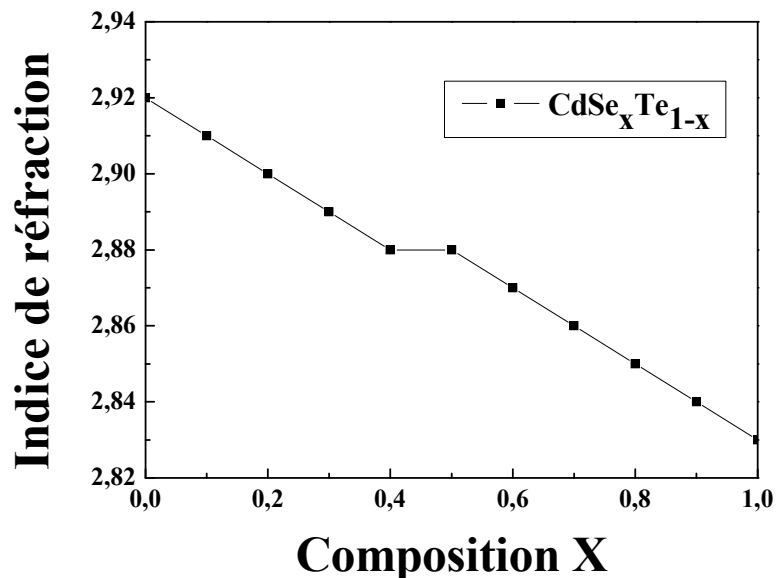


Fig.12. Variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration du Se pour l'alliage ternaire $CdSe_xTe_{1-x}$.

La variation de la constante diélectrique ϵ_{∞} en fonction de la composition x est indiquée dans la Fig. 13 (courbe pleine). On note que ϵ_{∞} varie non linéairement avec la concentration x . En utilisant un formalisme semblable à celui utilisé pour le gap d'énergie (c'est-à-dire l'équation (2)), ϵ_{∞} peut être bien décrit par le texte suivant l'analyse des expressions :

$$\epsilon_{\infty}(x) = 8.49 + 2.16x - 2.66x^2 \quad (21)$$

$$\epsilon_{\infty}(x) = 8.49 + 2.16x - 2.66x^2 \quad (22)$$

La constante diélectrique statique a été également calculée en utilisant une méthodologie similaire à celle utilisée par Bouarissa [80]. La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la composition x est représentée dans la Fig. 13 (courbe en pointillé). On note également que cette constante varie non-linéairement avec la composition x . Le comportement semble qualitativement semblable à celui de ϵ_∞ . En utilisant un formalisme semblable à celui de l'équation (2), la constante diélectrique statique peut être écrite :

$$\epsilon_0(x) = 9.92 + 2.63x - 3.32x^2 \quad (23)$$

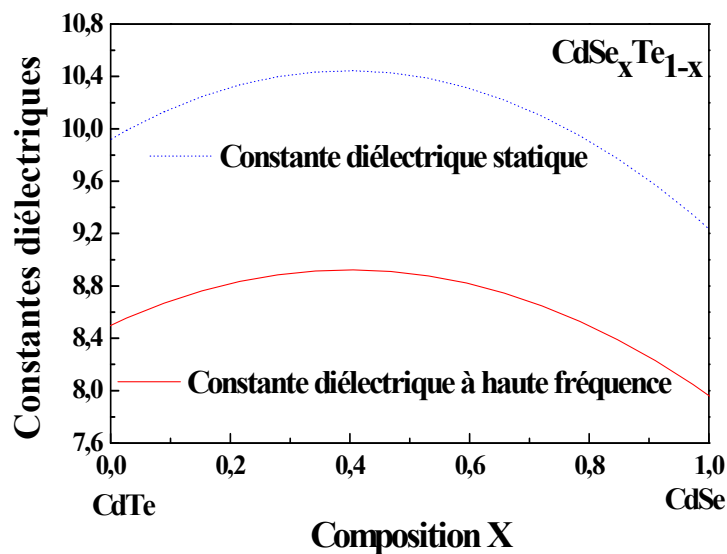


Fig. 13 : Les constantes diélectriques à haute fréquence (courbe pleine) et statiques (courbe en pointillé) des cristaux mixtes $CdSe_xTe_{1-x}$ en fonction de la concentration de sélénium.

4.2.3. Propriétés mécaniques

Les Fig. (14) - (16) représentent les constantes élastiques, à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} respectivement pour l'alliage ternaire $CdSe_xTe_{1-x}$ en fonction de la fraction molaire x . On remarque que toutes ces constantes élastiques augmentent d'une manière monotone et linéaire avec l'augmentation de la composition x dans la gamme de concentration 0 - 1. Qualitativement, ces constantes élastiques montrent un comportement similaire. Un tel comportement indique que la structure de l'alliage devient mécaniquement instable.

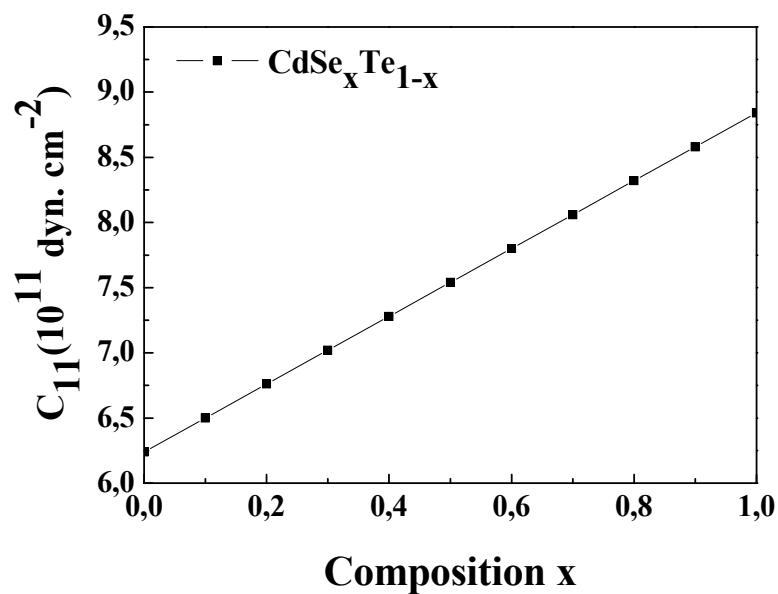


Fig. 14: Variation de la constante élastique C_{11} en fonction de la concentration de Se dans l'alliage ternaire $CdSe_xTe_{1-x}$.

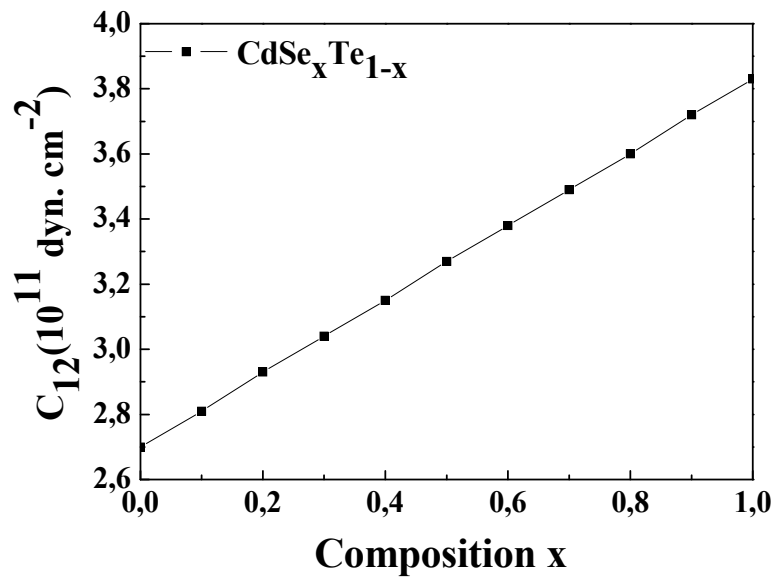


Fig. 15: Variation de la constante élastique C_{12} en fonction de la concentration de Se dans l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$.

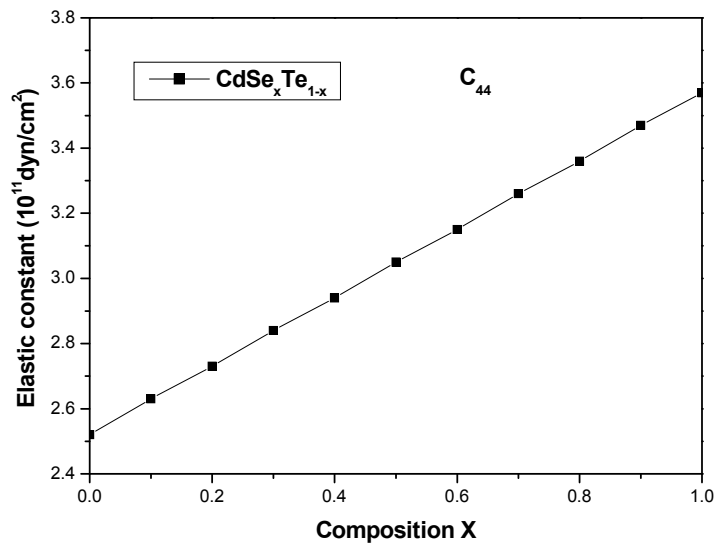


Fig. 16: Variation de la constante élastique C_{44} en fonction de la concentration de sélénium dans l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$.

La compressibilité est une caractéristique d'un corps, définissant sa variation relative du volume sous l'effet d'une pression appliquée.

Le module de compressibilité (B_0) est définie comme étant le rapport du changement de la pression agissante sur un volume au changement de la fraction du volume. Il décrit la réponse du matériau à une pression uniforme. Elle est reliée aux constantes élastiques par la relation [82],

$$B_0 = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (24)$$

En utilisant l'équation (24), on a déterminé les valeurs de B_0 pour l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ pour différentes compositions x . Nos résultats sont montrés dans la Fig. 17. On remarque que la compressibilité augmente d'une façon monotone avec l'augmentation de la concentration x . Comme B_0 des matériaux cristallins donne la mesure de la rigidité, on peut en conclure que le composé CdTe est moins rigide que celui de CdSe .

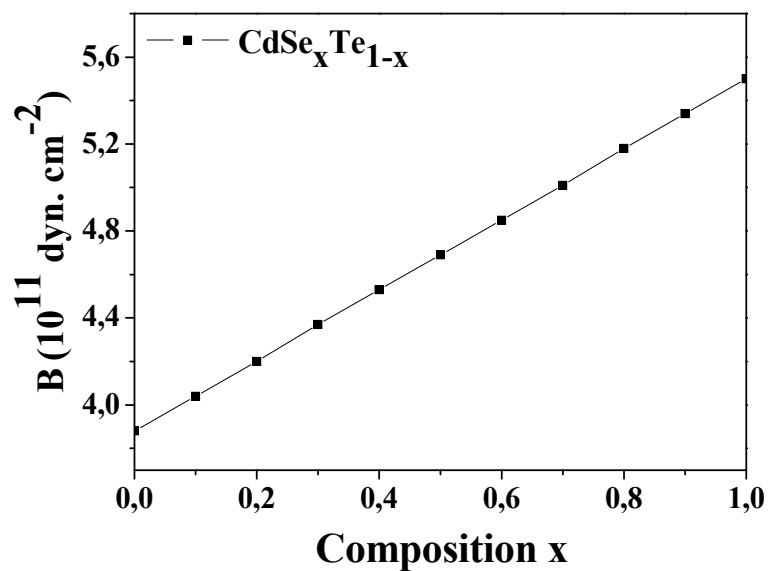


Fig. 17: Variation de la compressibilité en fonction de la concentration de Se dans l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$.

Le module de cisaillement (C_s) est une grandeur physique propre a chaque matériau et intervient dans la caractérisation des déformations causées par les efforts de cisaillement. C_s est connue aussi sous le nom du module de rigidité et définie comme étant le rapport de compression de cisaillement au contrainte de cisaillement. Il décrit la réponse du matériau aux contraintes de cisaillement et il est relié aux constantes élastiques par l'équation [82],

$$C_s = (C_{11} - C_{12})/2 \quad (25)$$

La variation de C_s en fonction de la concentration Se pour l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ est montrée sur la Fig. 18. On remarque que lorsque la concentration de Se augmente de 0 a 1, la constante de cisaillement augmente d'une façon monotone.

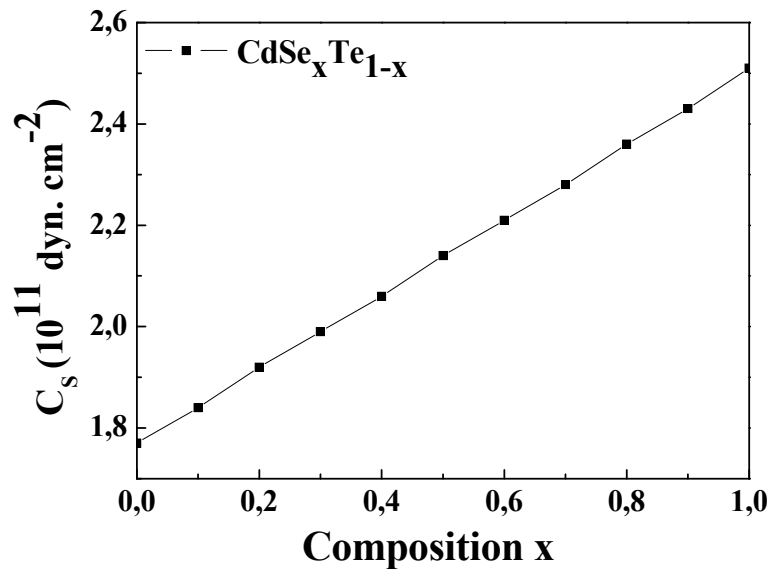


Fig. 18: Variation du module de cisaillement C_s en fonction de la concentration de Se dans l'alliage ternaire $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$.

Conclusion générale

Les études théoriques des propriétés électroniques, optiques et élastiques des chalcogénites de cadmium et de zinc dans la structure zinc blende ont été étudiées en utilisant le formalisme du pseudo-potentiel. En général, nos résultats sont en assez bon accord avec les données expérimentales disponibles. Des expressions polynomiales sont obtenues pour la masse effective des électrons et les constantes diélectriques en fonction de l'écart de la bande d'énergie fondamentale. Par ailleurs, les relations des constantes élastiques par rapport à l'ionicté ont été examinées et discutées. Les propriétés électroniques, optiques et élastiques dans la structure zinc-blende de chalcogénures de cadmium et de zinc, à savoir ZnTe, CdTe, CdSe et ZnSe ont été étudiées et les grandeurs telles que la masse effective des électrons, l'indice de réfraction, les constantes diélectriques et les constantes élastiques ont été obtenues. Les calculs ont été essentiellement basés sur l'E.P.M. En générale, nos résultats sont en accord raisonnable avec les ressources disponibles des données expérimentales et théoriques. Pour les quantités physiques des matériaux d'intérêt lorsque les données ne sont pas disponibles dans la littérature, nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de références pour les futurs travaux. Nous avons provisoirement émis la masse effective de l'électron et la constante diélectrique statique des matériaux d'intérêt en fonction de leur écart fondamentale. En outre, le rapport de la constante élastique a été lié à l'ionicté comme dérivée de l'échelle Phillips et Christensen et al. par rapport à la relation proposée par Adachi.

D'autre part, nous avons examiné les gaps d'énergies et les constantes diélectriques optiques des cristaux ternaires à l'aide du régime en vertu de la VCA, qui tient compte de l'effet de la composition du désordre. Le système utilisé a été combiné avec le modèle orbitale d'Harrison, alors que la formule de Moss a été utilisée pour le calcul sur la base d'un modèle atomique. L'accord entre nos résultats et les données disponibles dans la littérature a été jugé

raisonnable. La contribution de la composition trouble a été jugée nécessaire pour l'amélioration des gaps fondamentaux. L'absorption de l'optique a suggéré que les lacunes sont une bande de semi-conducteurs pour la concentration x de Se. Les deux constantes diélectriques, ont été retrouvées et suivent une variation non-linéaire à l'égard de la composition x . Les formes polynomiales quadratiques ont été obtenues afin de rapprocher toutes les études en fonction de la concentration de sélénium. Les propriétés mécaniques à savoir les constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} , le module de compressibilité et le module de cisaillement ont été calculés pour les éléments binaires ainsi que l'alliage ternaire, ce qui a permis d'analyser le comportement mécanique de ces matériaux.

Références bibliographiques

- [1] M. L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of semiconductors*, Springer, Berlin, 1988.
- [2] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, *J. Phys. Condens. Matter* 2 (1990) 3253
- [3] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285
- [4] P.Y. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, New-York (2001)
- [5] D. Brust, J.C. Phillips, F. Bassani, *Phys. Rev. Lett.* 9 (1962) 94
- [6] D. Brust, M.L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* 9 (1962) 389
- [7] W A. Harrison, "Pseudopotentials in Theory of Metals", Benjamin, New York (1966)
- [8] M. L. Cohen, T.K. Bergstresser, *Phys. Rev.* 141 (1966) 789.
- [9] M. L. Cohen, V. Heine, *Solid State Physics*, 24Eds, H. Entenreich, F. Seitz, D. Turnbull, Academic Press, New York (1970)
- [10] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic, New York, 1973.
- [11] J. C. Phillips, L. Kleinman, *Phys. Rev.* 116 (1959) 287
- [12] J. C. Phillips, *Phys. Rev.* 112 (1958) 685
- [13] F. Herman, *Phys. Rev.* 93 (1954) 1214

- [14] M. L. Cohen, V. Heine, Phys. Rev. 112 (1961) 1821
- [15] N.W. Aschcroft, Phys. Rev. Lett. 23 (1966) 48
- [16] I.V. Abarenkov, V. Heine, Philos. Mag. 13 (1965) 529
- [17] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Solids 61 (2000) 109
- [18] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 72 (2001) 387
- [19] N. Bouarissa, Europ. Phys. J. B 32 (2003) 139
- [20] N. Bouarissa, Physica B 399 (2007) 126
- [21] H. Nara, T. Kobayasi, J. Phys. Soc. Jpn. 41 (1976) 1429
- [22] J. Chelikowsky, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 14 (1976) 552
- [23] A. B. Chen, A. Sher, Phys. Rev. B 19 (1979) 3057
- [24] V. B. Gera, R. Gupta, K.T. Jain, Phys. Rev. B 36 (1987) 9657
- [25] M. Jaros, Rep. Prog. Phys. 48 (1985) 1091
- [26] N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. 26 (1999) 279
- [27] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 5th ed., Wiley, New York 1976
- [28] W.A. Harrison, Electronic Structure and Properties of Solids, Freeman, New York, 1980
- [29] S. Zerroug, F. Ali Sahraoui, N. Bouarissa, Mater. Lett. 60 (2006) 546

- [30] P. Vogl, J. Phys. C11 (1978) 251
- [31] J.M. Baranowski, J. Phys. C 17 (1984) 6287
- [32] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 100 (2006) 41
- [33] N. Bouarissa, R. Bachiri, Physica B 322 (2002) 193
- [34] I. Hernandez-Calderon, in: M.C.Tamargo (Ed.), II-VI Semiconductor Materials and their Applications, Taylor and Francis, New York, 2002, pp.113-170
- [35] A. Tomasulo, M.V.Ramakrishna, J. Chem.Phys. 105 (1996) 3612
- [36] R.J. Nelms, M.I. McMohan, Semicond. Semimetal. 54 (1998) 145
- [37] G.-D.Lee, M.H.Lee, J. Ihm, Phys. Rev. B 52 (1995) 1459
- [38] F. Benmakhlouf, N. Bouarissa, Inter. J. Mod. Phys. B 20 (2006) 4807
- [39] E. Deligoz, K. Colakoglu, Y. Ciftci, Physica B 373 (2006) 124
- [40] L. Hannachi, N. Bouarissa, Physica B 404 (2009) 3650
- [41] T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ.2 (1993) 7
- [42] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlatt. Microstr. 39 (2006) 478
- [43] O. Maksimov, M.C. Tamargo, Appl. Phys. Lett. 79 (2001) 782
- [44] J. Yang, Y. Zidon, Y. Shapira, J. Appl. Phys. 91 (2002) 703
- [45] A. Kobayashi, O.F. Sankey, J.D. Dow, Phys. Rev. b 25 919820 6367

- [46] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, S. Fujita, *J. Cryst. Growth* 117 (1992) 527
- [47] L. W. Wang, A. Zunger, *Phys. Rev.* 51 (1995) 17398
- [48] O. Madelung (Ed.), *Semiconductors-Basic Data*, Springer, Berlin, 1996
- [49] J.R. Chelikowsky, T.J. Wagener, J.H. Weaver, A. Jin, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 9644
- [50] N. Bouarissa, *Infrared Phys. Technol.* 40 (1999) 117
- [51] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 65 (2000) 107
- [52] A. Bechiri, PhD thesis, 2006, University of Constantine, Algeria
- [53] D. L. Rode, in: R.K. Willardson, A.C. Beer (Eds.), *Semiconductors and Semimetals*, vol. 10, Academic, New York, 1975, p.1.
- [54] W. Nakwaski, *Physica B* 210 (1995) 1
- [55] S. Adachi, *Properties of Group IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, 2005.
- [56] Y.P. Feng, K.L. Teo, M.F. Li, H.C. Poon, C.K. Ong, J.B. Xia, *J. Appl. Phys.* 74 (1993) 3948
- [57] D.W. Palmer, WWW.Semiconductors.Co.UK, 2008.03
- [58] N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* 67 (2006) 1440
- [59] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715

- [60] N.M. Ravindra, S. Auluck, V.K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. (b) 93 (1979) k155
- [61] P. Herve, L.K.J.Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609
- [62] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, wiley, New York, 1981
- [63] S. Yu, Davydov, S.K. Tikhonov, Semiconductors 32 (1998) 947
- [64] S.-G. shen, J. Phys. Condens. Matter 6 (1994) 8733
- [65] D. Berlincourt, H. Jaffe, L.R. Shiozawa, Phys. Rev. 129 (1963) 1009
- [66] B.H.Lee, J. Appl. Phys. 41 (1970) 2988
- [67] N.E. Christensen, S. Satpathy, Z. Pawlowska, Phys. Rev. B 36 (1987) 1032.
- [68] C. G. Van der Walle, Wide Band-gap Semiconductors, North Holland, Amsterdam, 1993
- [69] Y. Eisen, A. Shor, J. Crystal. Growth 184-185 (1998) 1302.
- [70] A.A. Melnikov, J. Cryst. Growth 19 (1999) 6637
- [71] Z. loizos, N. Spyrellis, G. Maurin, D. Pottier, J. Electranal. Chem. 269 (1989) 399
- [72] A. Bechiri, F. Benmakhlouf, N. Bouarissa, Mater. Chem.. Phys. 77 (2003) 507
- [73] A. bhouri, H. Mejri, F. Ben Zid, H. Belmabrouk, M. Said, N. Bouarissa, J.-L. Lazzari, J. Phys. Condens. Matter 16 (2004) 511
- [74] L. Hannachi, N. Bouarissa, Superlatt. Microstr. 44 92008) 794

- [75] H.C.Poon, Z. C. Feng, Y.P. Feng, M.F.Li, J.Phys. Condens. Matter 7 (1995) 2783
- [76] J .A.Van Vechten, T.K. Bergstresser, Phys. Rev. B 1 (1970) 3351
- [77] I Vurgaftman, J.R.Meyer, L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815
- [78] T.H. Glisson, J.R. Hauser, M.A. Littlejohn, C.K. Williams, J. Electron. Mat. 7 (1978) 1
- [79] S. Adachi, J.Appl.Phys. 61 (1987) 4869
- [80] N. Bouarissa, Mater. Lett. 60 (2006) 2974
- [81] N. Bouarissa, M. Boucenna, Phys. Scr. 79 (2009) 015701
- [82] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), Handbook Series on Semiconductor Parameters, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.