

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université d'Oum El-Bouaghi
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie



THÈSE

présentée en vue de l'obtention
du diplôme de doctorat en sciences de la matière
Option: Physique des matériaux

Thème

Investigation numérique de l'effet du désordre sur les propriétés optoélectroniques et mécaniques dans les alliages semi-conducteurs

Par: Hadjer Saheb

Devant le jury :

Président :	Nacer Hebbir	Prof.	Université d'Oum El-Bouaghi
Directeur de thèse:	Abderrachid Bechiri	Prof.	Université de Tébessa
Co-rapporteur:	Fayçal Goumeidane	MCA	Université d'Oum El-Bouaghi
Examineurs :			
	Fella Benmakhlouf	Prof.	Université de Tébessa
	Hichem Farh	Prof.	Université d'Oum El-Bouaghi
	Toufik Ziar	Prof.	Université de Tébessa

Année universitaire 2021 /2022

Dédicace

Je dédie cette thèse à.....

A la mémoire de mon cher père SAHÉB Mnaouar

Je ne saurais exprimer mon grand chagrin en ton absence.

J'aurais aimé que tu sois à mes cotés ce jour, que ce travail soit une charité pour le repos de ton âme.

A ma très chère maman

Aucune dédicace ne saurait exprimer mon grand respect, et ma reconnaissance pour les sacrifices que tu as consentis pour mon éducation. J'implore le dieu le tout puissant de vous accorder bonne santé et longue vie.

Remerciements

Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de nous avoir la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce travail.

*Tout d'abord, Je remercie mon directeur de thèse, **Dr Abderrachid Bechiri**, Professeur à l'université de Tébessa, de m'avoir proposé le sujet de ma thèse. Sans lui, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour. Je le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur, sa disponibilité et sa franchise durant la préparation de ma thèse. Je lui adresse ma gratitude pour tout cela,*

*Mes remerciements s'adresse au **Dr Faïçal Goumeidane**, Maître de conférences **A** à l'université d'Oum El Bouaghi pour ses conseils, et les encouragements qu'il n'a cessé de me prodiguer tout le long de ce travail.*

*Je tiens à exprimer ma reconnaissance à **Dr Nacer Hebbir**, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, a bien voulu présider ce jury de thèse.*

*Je suis particulièrement honoré par **Dr Fella Benmakhlouf**, Professeur à l'université de Tébessa, **Dr Hichem Farh**, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi et **Dr Toufik Ziar**, Professeur à l'université de Tébessa. Et Je les remercie pour l'intérêt qu'ils portent à ce travail en acceptant d'en être les examinateurs dans mon jury.*

Je remercie toutes les personnes qui m'ont encouragé pour terminer ce travail.



Sommaire

SOMMAIRE

Liste des tableaux	<i>i</i>
Liste des figures	<i>ii</i>
Introduction générale	01

Chapitre I

Généralités sur les composés étudiés CdSe et BeSe

I.1. Introduction.	04
I.2. Les caractéristiques des composés CdSe/BeSe.	04
I.2.1. Configuration électronique des composés.	06
I.2.2. Structure cristalline.	07
I.2.3. La constante de maille et le gap d'énergie.	07
I.2.4. Première zone de Brillouin.	10
I.2.4.1. Les points de haute symétrie.	10
I.2.4.2. Les lignes de haute symétrie.	11
I.2.5. Structures des bandes d'énergie.	11
I.2.6. Gap direct et gap indirect.	12
I.2.7. Le diagramme de phase.	13
I.2.7.1. Diagramme de phase du CdSe.	13
I.2.7.2. Diagramme de phase de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	14
I.3. Matériaux semiconducteurs pour l'optoélectronique.	15
I.3.1. Les photodétecteurs.	16
I.3.1.1. La cellule photovoltaïque ou photodiode.	16
I.3.1.2. La cellule solaire ou photopile.	17
I.3.2. Les photoémetteurs.	17
I.3.2.1. Les diodes électroluminescentes (LED).	17
I.3.2.2. Les diodes laser.	19

Chapitre II

La méthode du pseudopotentiel

II.1. Introduction.	20
II.2. La méthode du pseudopotentiel.	20
II.2.1. Le formalisme mathématique de la méthode pseudopotentiel.	21
II.2.2. Caractéristiques du pseudopotentiel.	24
II.2.2.1. Le modèle local.	24

II.2.2.1.1. Modèle de Coulomb.	24
II.2.2.1.2. Modèle de Heine et Abarenkov.	24
II.2.2.1.3. Modèle d'Ashcroft.	25
II.2.2.2. Le modèle non local.	25
II.2.2.2.1. La fonction de Heine Abarenkov.	26
II.2.2.2.2. La fonction de Gauss.	26
II.2.2.2.3. La fonction d'Ashcroft.	26
II.3. La méthode empirique des pseudopotentiels (EPM).	27
II.3.1. la méthode du calcul.	27
II.4. La dépendance en composition des propriétés physiques des alliages Semiconducteurs.	28
II.4.1. L'approximation du cristal virtuel (VCA).	29
II.4.2. Le potentiel du désordre effectif.	29
II.4.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).	30

Chapitre III

Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des semiconducteurs

III.1. Les propriétés électroniques et optiques.	32
III.1.1. Introduction.	32
III.1.2. Polarisation et l'indice de réfraction d'un milieu.	32
III.1.3. Propagation des ondes dans la matière.	33
III.1.4. Le spectre électromagnétique.	36
III.1.5. Le photon.	36
III.1.6. l'interaction rayonnement- matière.	37
III.1.6.1. L'absorption de la lumière.	37
III.1.6.2. L'émission spontanée.	37
III.1.6.3. L'émission stimulée.	38
III.1.7. Les transitions directes et indirectes.	39
III.1.8. Calcul de l'indice de réfraction.	40
III.2. Etude des propriétés diélectriques.	41
III.2.1. La constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞ et statique ϵ_0 .	41
III.2.2. La constante diélectrique complexe.	41
III.2.3. La réflexion optique.	42
III.2.4. L'indice de réfraction et le coefficient d'absorption.	42
III.2.5. L'indice de réfraction et la constante diélectrique.	42
III.2.6. Calcul des constantes diélectriques.	43

III.2.6.1. Calcul de la constante diélectrique à haute fréquence.	43
III.2.6.2. Calcul de la constante diélectrique statique.	43

Chapitre IV

Etude des propriétés mécaniques des semiconducteurs

IV.1. Introduction.	44
IV.2. Domaine élastique.	44
IV.2.1. Contrainte et Déformation.	44
IV.2.2. Isotropie et Anisotropie.	45
IV.2.3. Exemples de lois élastiques linéaires.	46
IV.2.3.1. Compression hydrostatique.	46
IV.2.3.2. Glissement simple uniaxial.	46
IV.2.3.3. Traction simple uniaxiale.	47
IV.2.4. Limite élastique.	48
IV.2.5. Critère de Tresca et von Mises.	48
IV.2.6. Grandeurs mécaniques.	49
IV.3. Domaine plastique.	51
IV.3.1. Plasticité parfaite.	51
IV.3.2. Plasticité avec écrouissage.	51
IV.4. Domaine élastoplastique.	51
IV.5. Calcul des paramètres mécaniques.	52
IV.5.1. Les constantes élastiques.	52
IV.5.2. Module de compressibilité.	53
IV.5.3. Le facteur de l'ionicté et les constantes des forces.	53
IV.5.4. Le module de cisaillement, Young et coefficient de Poisson.	53
IV.5.5. Le facteur d'anisotropie et Le paramètre de Kleinman.	54

Chapitre V

Résultats et discussions

V.1. Etude des propriétés électroniques.	55
V.1.1. Structure de bandes d'énergie.	57
V.1.2. Les gaps d'énergie.	61
V.1.3. La densité de charge électronique.	67
V.1.3.1. Densité de charge électronique des composés binaires BeSe et CdSe.	67
V.1.3.2. Densité de charge électronique de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	70
V.2. Etude des propriétés optiques et diélectriques.	72

V.2.1. L'indice de réfraction.	72
V.2.2. Les constantes diélectriques.	74
V.2.2.1. La constante diélectrique à haute fréquence.	74
V.2.2.2. La constante diélectrique statique.	78
V.3. Les propriétés Mécaniques.	82
V.3.1. Les constantes élastiques.	82
V.3.2. Module de compressibilité B et les constantes de force.	86
V.3.3. Modules de cisaillement, Young, coefficient de Poisson et le facteur d'isotropie.	89
V.3.4. Facteur de l'ionocité et le paramètre de Kleinman.	93
Références.	96
Conclusion générale.	102

Liste des tableaux

Tableau	Titre	Page
I-1	La variation du nombre des études pour les composés binaires et leurs alliages avec les années.	4
I-2	Extrait du tableau périodique illustre les éléments de notre étude.	6
I-3	La configuration électronique et le nombre atomique des éléments étudiés.	6
I-4	Paramètre de maille des composés binaires étudiés.	8
I-5	Quelques propriétés physiques des composés CdSe et BeSe.	15
V-1	Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs CdSe et BeSe dans la phase zinc blende ainsi que les constantes du réseau a en (u.a) et en (\AA).	56
V-2	Les gaps antisymétriques et l'ionicté des composés binaires semiconducteurs BeSe et CdSe selon Phillips, Christensen et Harrison.	58
V-3	Les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semiconducteurs zinc blende CdSe et BeSe en (eV).	61
V-4	Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ pour les concentrations $x = 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0 .	64
V-5	L'indice de réfraction n calculé par la relation de Moss et les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.	73
V-6	La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculée avec les relations de Moss et d'Adachi des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.	75
V-7	La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec la relations de Moss et d'Adachi des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.	79
V-8	Les constantes élastiques C_{11}, C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne/cm ²) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	83
V-9	Module de compressibilité B en (10^{11} dyne/cm ²) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N/m) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	87
V-10	Modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne/cm ²), le coefficient de Poisson ν et le facteur d'anisotropie (A) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	90
V-11	Facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	94

Liste des figures

Figure	Titre	Page
I-1	La variation du nombre des études sur le composé binaire CdSe avec les années.	5
I-2	La variation du nombre des études sur le composé binaire BeSe avec les années.	5
I-3	La variation du nombre des études sur l'alliage ternaire BeCdSe avec les années.	6
I-4	La structure cristalline zinc blende et la projection de la structure sur le plan(001).	7
I-5	Gap d'énergie de plusieurs semiconducteurs en fonction de la constante de maille	8
I-6	Energie total (eV) de CdSe en fonction du paramètre du réseau (A°).	9
I-7	Energie total (eV) de BeSe en fonction du paramètre du réseau (A°).	9
I-8	Variation du paramètre du réseau en fonction de la concentration de Be dans l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ comparée avec celle tracée par la loi de Vegard.	10
I-9	Zone de Brillouin de la structure zinc blende.	11
I-10	Schéma de bandes au centre de la zone de Brillouin.	12
I-11	Transition à gap direct (CdSe).	12
I-12	Transition à gap indirect (BeSe).	13
I-13	Diagramme de phase du composé binaire CdSe.	14
I-14	Diagramme de phase de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de la composition de Be.	14
I-15	La variation de la longueur d'onde en fonction du gap.	16
I-16	Présentation schématique d'une jonction p-n photodiode.	17
I-17	Présentation schématique d'une cellule solaire.	17
I-18	diodes électroluminescentes réalisés par des semiconducteurs.	18
I-19	schéma de deux lampes LED.	19
I-20	schéma d'une diode laser.	19
II-1	Présentation schématique du pseudopotentiel de l'espace réel.	23
II-2	Présentation schématique de pseudofonction d'onde.	23
II-3	Potentiel coulombien.	24
II-4	Potentiel du modèle de Heine et Abarenkov.	25
II-5	le potentiel du cœur inoccupé.	25
II-6	Fonction carré.	26
II-7	Fonction Gaussienne.	26
II-8	Fonction d'Ashcroft.	26
II-9	Diagramme de la procédure du calcul par E.P.M.	28
III-1	L'onde électromagnétique.	34
III-2	la polarisation de la lumière.	35
III-3	Le spectre électromagnétique - Couleurs du spectre visible et longueur d'onde correspondante.	36
III-4	L'absorption fondamentale de la lumière.	37
III-5	L'émission spontanée.	38
III-6	L'émission stimulée.	38
III-7	Gaps des semiconducteurs en fonction du paramètre de maille.	40
IV-1	La déformation d'un solide mis sous contrainte.	45
IV-2	Critères de limites élastiques dans le plan principal.	49
IV-3	Critères de limites élastiques dans le plan déviateur.	49
IV-4	Solide sollicité en cisaillement par la contrainte σ - La déformation γ qui en résulte est associée à l'angle de déformation.	50
IV-5	Courbe [Contrainte-Déformation] type d'un matériau élastique-parfaitement plastique.	51

IV-6	Courbe [Contrainte-Déformation] type d'un matériau élastique-plastique avec écrouissage.	51
IV-7	Courbe de Traction typique d'un matériau élastoplastique. Synoptique des différentes zones de comportement ainsi que des principales notations utilisées.	52
V-1	La structure de bandes électroniques du composé CdSe.	57
V-2	La structure de bandes électroniques du composé BeSe.	57
V-3	La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0,3}\text{Cd}_{0,7}\text{Se}$.	59
V-4	La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0,5}\text{Cd}_{0,5}\text{Se}$.	60
V-5	La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0,7}\text{Cd}_{0,3}\text{Se}$.	60
V-6	La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{I} en fonction de la composition x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	62
V-7	La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{X} en fonction de la composition x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	63
V-8	La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{II} en fonction de la composition x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	63
V-9	Variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	65
V-10a	Gaps d'énergie directs et indirects en fonction de la fraction molaire x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.	66
V-10b	Gaps d'énergie directs et indirects en fonction de la fraction molaire x de Béryllium Be dans l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.	66
V-11	Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence du composé BeSe: (a) profile selon la direction [111]; (b) contour dans le plan (110); (c) surface 3D.	68
V-12	Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence du composé CdSe: (a) profile selon la direction [111]; (b) contour dans le plan (110); (c) surface 3D.	69
V-13	Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence de l'alliage ternaire $\text{Be}_{0,5}\text{Cd}_{0,5}\text{Se}$: (a) profile selon la direction [111] avec et sans désordre compositionnel; (b) contour dans le plan (110) VCA; (c) contour dans le plan (110) VCAA.	71
V-14	La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Béryllium, calculé par la relation de Moss avec et sans désordre de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	74
V-15	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Béryllium, calculée par la relation de Moss sans et avec désordre de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	76
V-16	Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique à haute fréquence avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, en utilisant la relation d'Adachi et la relation de Moss sans et avec désordre.	77
V-17	La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de Béryllium, calculée par la relation de Moss sans et avec désordre de l'alliage	79

	$\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	
V-18	Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique statique ϵ_0 avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, en utilisant la relation d'Adachi et la relation de Moss sans et avec désordre.	80
V-19	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de Béryllium, calculées par la relation de Moss sans désordre de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	81
V-20	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de Béryllium, calculées par la relation de Moss avec désordre de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.	81
V-21	Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la concentration x de Béryllium: sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA) de l'alliage ternaire.	84
V-22	Comparaison entre les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de concentration x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, avec et sans désordre.	85
V-23	La variation du module de compressibilité B de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	87
V-24	La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	88
V-25	Comparaison entre les constantes de force α et β de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	89
V-26	Variation du module de cisaillement (G) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	91
V-27	La variation du module de Young (Y) en (dyne/cm^2), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	91
V-28	La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.	92
V-29	La variation du facteur d'anisotropie de Zener A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, en fonction de la concentration x de Béryllium.	93
V-30	La variation de facteur d'ionicité f_i de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de concentration x de Béryllium.	95
V-31	La variation du facteur de Kleinman ξ de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de concentration x de Béryllium.	95



Introduction générale

Introduction générale

La science des matériaux comporte un grand nombre de domaines importants dont celui des polymères, des matériaux composites et des semiconducteurs. Elle constitue à ce titre un domaine très actif de la recherche et technologie moderne.

Ces derniers représentent une classe de matériaux avec une conductivité intermédiaire entre celle des conducteurs et des isolants. Leurs valeurs de conductivité sont généralement de l'ordre de 10^3 à 10^{-9} Siémens par centimètre, et dépendent fortement par la température [1]. Dans le domaine des semiconducteurs, ces dernières années ont été marquées par un effort soutenu dans la croissance et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques où sont utilisés dans des applications allant de l'électronique, des capteurs aux diodes électroluminescentes (LED), aux thermoélectriques et aux cellules solaires. Ces dispositifs offrent des nouvelles possibilités de manipulations optiques, thermiques, et de transport de charge [2].

Il existe plusieurs types des semiconducteurs comme les semiconducteurs constitués de deux éléments qui appartiennent au même groupe IV, et des semiconducteurs constitués de deux éléments qui appartiennent aux deux groupes différents II-VI ou bien III-V [3]. En combinant des composés binaires semiconducteurs II-VI, nous obtenons des nouveaux alliages permettant de diversifier les propriétés physiques telles que la bande interdite, les paramètres optiques et les constantes diélectriques...etc; afin de répondre à la nécessité des applications des dispositifs de la nouvelle génération [4, 5].

Les composés binaires semiconducteurs de base de l'alliage d'étude $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ sont CdSe et BeSe. Ces deux composés binaires II-VI à base de Sélénium ont deux structures cristallographiques de type zinc-blende (Minerai de sulfure de zinc ZnS) et Wurtzite (hexagonale). Nous choisissons la phase zinc-blende car elle contient moins d'atomes dans la maille primitive et elle est donc plus facile à traiter du point de vue du calcul [6]. Ces composés sont technologiquement importants à cause de leurs propriétés physiques intéressantes.

Le séléniure de Béryllium BeSe fournis un aspect intéressant pour l'investigation de la physique fondamentale, car il présente une liaison covalente et réduise la polarité des éléments. Ce composé est technologiquement important puisque leur application va de la catalyse à la microélectronique en passant par les dispositifs luminescents [7, 8] et il est potentiellement favorable pour les applications technologiques photovoltaïques. D'autre part, les semiconducteurs de type CdSe (séléniure de cadmium) ont attirés une attention considérable en raison de leurs vastes applications dans diverses technologies optoélectroniques [9-16].

En raison de la grande différence entre les gaps énergétiques des composés binaires (CdSe, $E_g = 1,74\text{eV}$; BeSe, $E_g = 5,5\text{ eV}$), les alliages $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ prennent beaucoup d'attention car ils sont utiles pour la fabrication de dispositifs optiques visibles en couleurs [17, 18].

Cette thèse a été conçue dans le but de déterminer les propriétés optoélectroniques, diélectriques et mécaniques d'un alliage ternaire semi-conducteur de la famille II-VI de type $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$. Elle sera consacrée essentiellement à l'intérêt de cet alliage et ses composés binaires et au rôle joué par ces matériaux. La plus part des résultats, dans les parties §V.1.1 et §V.1.2 du chapitre V, était le fruit d'une étroite collaboration avec le groupe de Master physique des matériaux (2019) sous la direction du professeur A. Bechiri [19].

Dans cette thèse, on a procédé une méthode pour déterminer les propriétés des semiconducteurs, c'est la structure de bande électronique. Quoique plusieurs méthodes théoriques ont été utilisées pour calculer la structure de bande électronique des matériaux, parmi eux: La méthode empirique des pseudo-potentiels.

Nous avons choisi la technique du pseudo-potential empirique (E.P.M) associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM) et le modèle de Verma., qu'elle est largement utilisée en simulation des propriétés électroniques des solides, en particulier pour les systèmes semiconducteurs. En effet, elle couvre plusieurs applications d'une part et d'autre part, cette méthode combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) donne aussi des résultats logiques comparativement avec ceux trouvés par l'expérience. Cependant l'approximation du cristal virtuel (VCA) est connue pour rendre les paramètres de courbure (bowing) du gap fondamental aussi faible que les résultats trouvés expérimentalement. Pour remédier à ce problème, on inclut l'effet du désordre par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [20]. Cela connu sur le nom de l'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA).

La thèse s'organise autour de cinq chapitres:

Le premier chapitre est présenté une description sur les propriétés physiques générales des deux composés II-VI utilisés CdSe, BeSe et leurs alliages.

Le deuxième chapitre développera la méthode du calcul utilisée dans ce travail qu'elle est du pseudopotential qui va nous permettre de faire l'étude des propriétés de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ et nous avons également décrit les différentes approximations couplées avec cette méthode.

Dans le troisième chapitre, un aperçu général sur les propriétés optiques et diélectriques des semiconducteurs est présenté et nous exposons les formules mathématiques utilisées pour calculer les constantes optiques et diélectriques.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude des propriétés mécaniques des semiconducteurs.

Au cinquième chapitre, nous avons présentés les résultats de nos calculs relatifs aux différentes propriétés pour les composés binaires, ainsi que leurs alliages ternaires.

Finalement, l'ensemble des résultats essentiels acquis est résumé dans la conclusion générale.

Chapitre I

**Généralités sur les composés
étudiés CdSe et BeSe**

Chapitre I

Généralités sur les composés étudiés CdSe et BeSe

I.1. Introduction:

Dans la chimie, il existe plusieurs types des atomes naturels. Par l'intelligence humaine, on peut réaliser artificiellement de nouvelles structures fonctionnelles soit cristallines où amorphes à partir de ces atomes. Les matériaux de choix de structures cristallines pour l'optoélectronique sont les semiconducteurs. D'autre part, en combinant différents éléments II ou VI de la classification périodique de Mendeleïev, il est possible d'obtenir des composés alliés ternaires sous la forme $A_xB_{1-x}C$.

Les semiconducteurs II-VI ont des propriétés similaires à celles des semiconducteurs du groupe III-V et IV. En raison du transfert de charge électronique de l'atome du groupe II à celui du groupe VI, les liaisons deviennent de plus en plus ioniques lorsque l'on passe des semiconducteurs du groupe IV aux semiconducteurs du groupe II-VI. Ils permettant d'explorer une large gamme de largeurs de bandes interdite supérieur à 1 eV [21].

Les semiconducteurs II-VI sont largement utilisés comme matériaux pour dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes, diodes laser (DL) et les photodétecteurs. Ainsi que les dispositifs de transport électroniques tels que les transistors à haut mobilité d'électrons et des transistors bipolaires à hétérojonction [21].

Dans ce chapitre, On a présenté les deux composés II-VI utilisés CdSe, BeSe et leurs alliages, et décrit leurs propriétés physiques générales.

I.2. Les caractéristiques des composés CdSe/BeSe:

Afin d'améliorer la qualité et le rendement énergétique des matériaux, les chercheurs essayent de mettre en œuvre plusieurs programmes numériques et expériences dans les laboratoires pour étudier les propriétés des composés qui composent ces matériaux. Dans cette partie, les résultats résumés sous forme des courbes se fêtent sur les bases de données disponibles sur les dix dernières années. Nos résultats sont résumés dans le tableau suivant.

Tableau I-1: La variation du nombre des études pour les composés binaires et leurs alliages avec les années.

Année		2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
Nombre des études	CdSe	217	307	289	322	344	362	372	385	389	395
	BeSe	88	101	106	95	87	88	91	93	107	83
	BeCdSe	3	3	5	0	2	0	2	1	0	1

D'après nos recherches et les données trouvées dans la période spécifique, on a trouvé que:

- Il y a des composés binaires comme GaAs et GaN sont peuvent être considérés comme les semiconducteurs binaires les plus utilisés dans les composants optoélectroniques.
- Le composé de notre étude CdSe et d'autres composés comme SiC, GaSb et GaP, sont moins étudiés dans les littératures.
- Le deuxième composé de notre étude BeSe, malgré qu'on le trouve dans la littérature, le nombre des articles étudiant ce composé est petit par rapport à ceux du composé CdSe.
- Malgré de son importance technologique, Le nombre des articles qu'ils sont étudiés l'alliage ternaire BeCdSe est très petit.

Les résultats de recherche dans le tableau précédent sont traduits dans les trois figures suivantes.

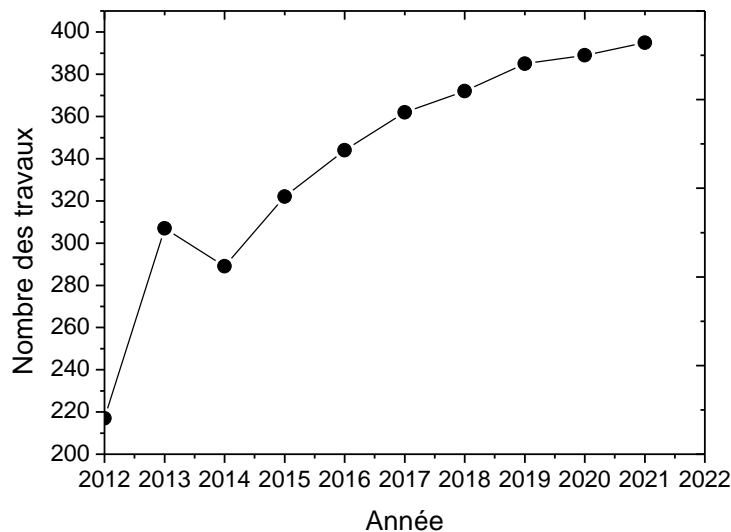


Figure I-1: La variation du nombre des études sur le composé binaire CdSe avec les années.

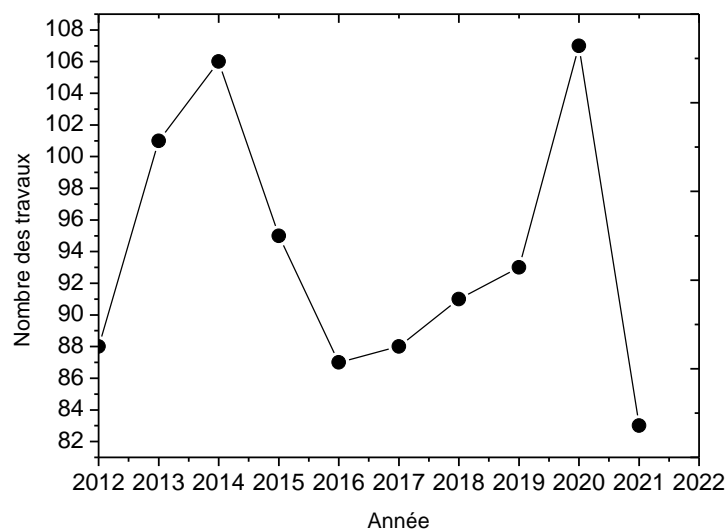


Figure I-2: La variation du nombre des études sur le composé binaire BeSe avec les années.

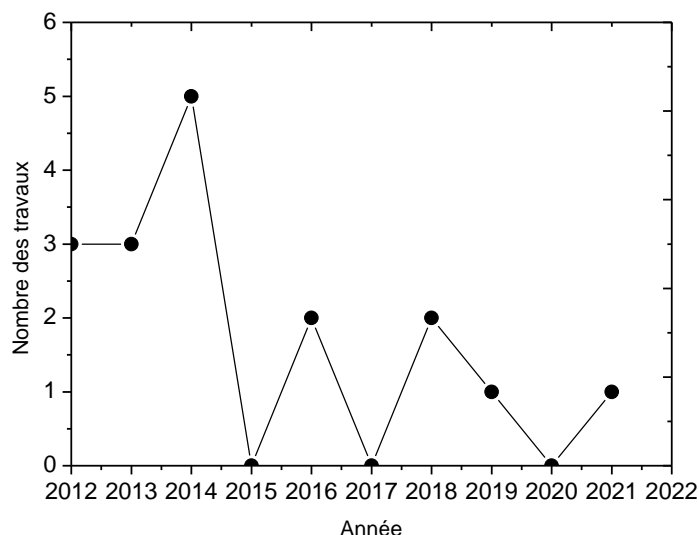


Figure I-3: La variation du nombre des études sur l’alliage ternaire BeCdSe avec les années.

I.2.1. Configuration électronique des composés:

Les composés utilisés dans ce travail du type II-VI, sont formés des éléments des colonnes IIA-B (Be, Cd) et VIB (Se) du tableau périodique de Mendeleïev, comme il est montré dans le tableau I-2.

Tableau I-2: Extrait du tableau périodique illustre les éléments de notre étude.

I-A-B	II-A-B	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB
Li ³	Be⁴	B ⁵	C ⁶	N ⁷	O ⁸	F ⁹
Na ¹¹	Mg ¹²	Al ¹³	Si ¹⁴	P ¹⁵	S ¹⁶	Cl ¹⁷
Cu ³⁰	Ca ²⁰	Ga ³²	Ge ³⁴	As ³⁴	Se³⁴	Br ³⁵
Ag ⁴⁷	Zn ³¹	In ⁴⁹	Sn ⁵⁰	Sb ⁵¹	Te ⁵²	I ⁵³
Au ⁷⁹	Cd⁴⁸	Tl ⁸¹	Pb ⁸²	Bi ⁸³	Po ⁸⁴	At ⁸⁵
	Hg ⁸⁰					

La configuration électronique atomique et le numéro atomique des atomes constituant les composés étudiés sont illustrés dans le tableau I-3.

Tableau I-3: La configuration électronique et le nombre atomique des éléments étudiés.

Élément	Nombre atomique Z	Configuration électronique
Béryllium (Be)	4	[He] 1s² 2s²
Sélénium (Se)	34	[Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p⁴
Cadmium (Cd)	48	[Kr] 4d¹⁰ 5s²

L’élément II fournit 2 électrons de valence (provenant d’une orbitale s) et l’élément VI en fournit 6 électrons (2 d’une orbitale s et 4 d’une orbitale p) ce qui fait 8 électrons pour chaque

couple d'élément comme pour tous les semiconducteurs (IV-IV, III-V, II-VI). Les orbitales atomiques vont alors s'hybrider pour former des liaisons interatomiques de type sp^3 où chaque cation (élément II) se trouve dans un environnement tétraédrique d'anion (élément VI) et réciproquement. Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente. D'une manière qualitative, les éléments du groupe VI sont plus électronégatifs que les éléments du groupe II.

I.2.2. Structure cristalline:

Les semiconducteurs II-VI et particulièrement les composés BeSe et CdSe ont une structure cristallographique de type Zinc Blende (Sphalérite) représentée sur la figure I-4. Cette structure qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, l'un d'éléments II, et l'autre d'éléments VI, décalé l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale principale du cube élémentaire. La maille élémentaire comporte quatre atomes répartis selon la symétrie cubique du groupe d'espace $F43m$ (Td^2). Chaque atome d'un élément donné est entouré dans un environnement tétraédrique par quatre atomes de l'espèce opposé. La structure cristalline de type zinc blende présente un taux de compacité maximale de l'ordre de (34%) et qui est le taux de remplissage. Elle est donc considérée comme une structure ouverte d'où la possibilité d'insertion d'atomes légers. L'arête du cube notée a , est le paramètre de maille du matériau.

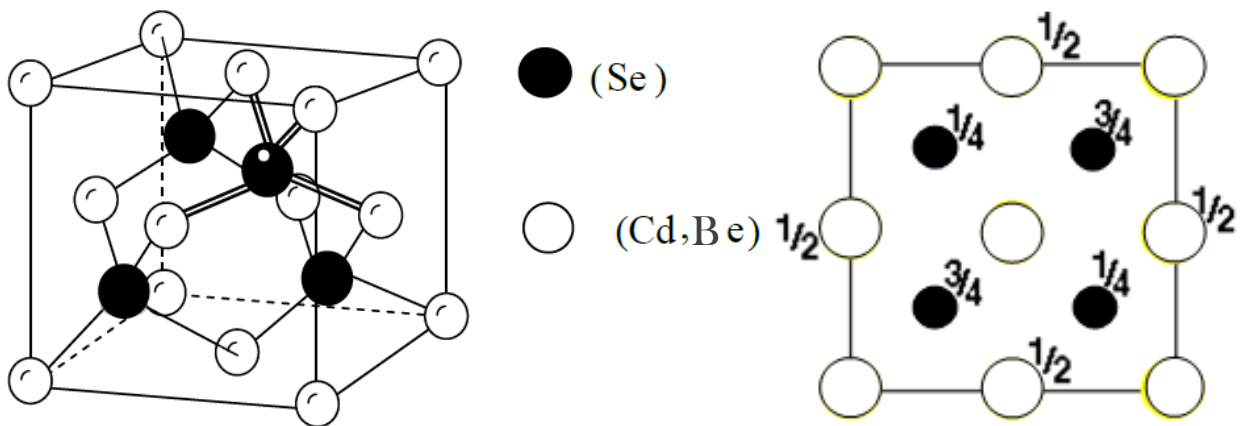


Figure I-4: La structure cristalline zinc blende et la projection de la structure sur le plan (001).

I.2.3. La constante de maille et le gap d'énergie:

La constante de maille ou bien le paramètre du réseau est définie comme étant la distance séparant deux mailles consécutives, notée a . La combinaison de deux composés binaires AC et BC donne un alliage ternaire $A_xB_{1-x}C$. Le paramètre du réseau de cet alliage est lié au paramètre du réseau des éléments binaires déterminé par la loi de Vegard:

$$a_{\text{alloy}} = x a_{AC} + (1 - x) a_{BC} \quad (\text{I-1})$$

Où a_{AC} et a_{BC} sont respectivement les paramètres du réseau des éléments binaires AC et BC.

À partir de la loi de Vegard, le paramètre du réseau a de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ résulte de composés binaires CdSe et BeSe donné par:

$$a_{Be_xCd_{1-x}Se} = x a_{Be} + (1 - x) a_{CdSe} \tag{I-2}$$

Le tableau I-4 représente les valeurs de paramètre du réseau a dont nous aurons besoin.

Tableau I-4: Paramètre de maille des composés binaires étudiés.

Composé	Paramètre de maille a (Å)
CdSe	6.05 ⁽²²⁾
BeSe	5.138 ⁽²³⁾

Les bandes d'énergie se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction. Les bandes de valence sont les plus basses, les bandes de conduction sont les plus hautes et ces dernières sont séparées par la bande interdite. La largeur de cette dernière est appelée le gap. Ce gap est par définition la différence de l'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence d'un semiconducteur.

Les gaps énergétiques et les paramètres du réseau pour les composés binaires utilisés avec d'autres composés sont représentés dans la figure I-5. Les points indiquent les valeurs pour les binaires et les lignes uniquement l'évolution de ces paramètres en fonction du matériau.

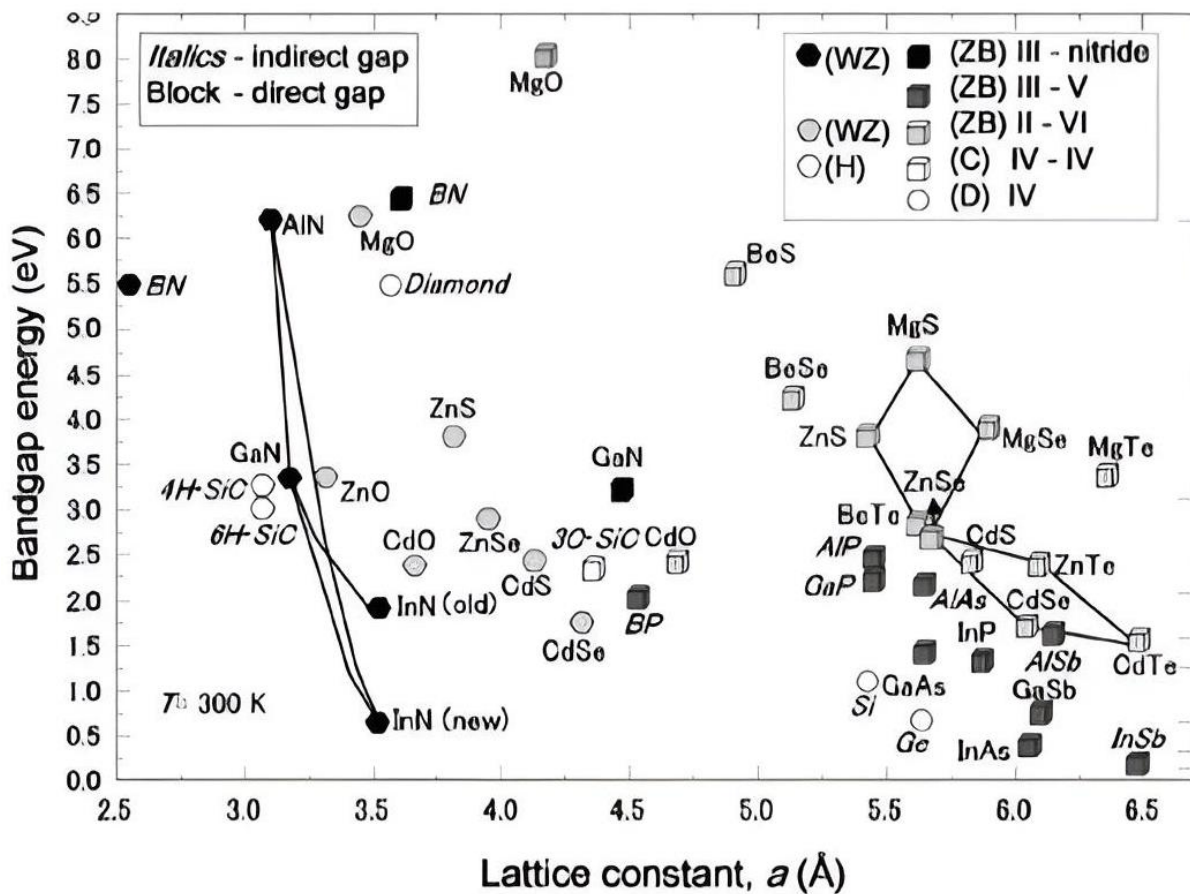


Figure I-5: Gap d'énergie de plusieurs semiconducteurs en fonction de la constante de maille [24].

Les énergies totales des composés binaires CdSe et BeSe en fonction de leurs paramètres du réseau sont représentées respectivement dans les figures I-6 et I-7. La structure cristalline est stable pour une énergie minimale. Comme il est clair dans ces deux figures, l'énergie minimum pour le CdSe (presque - 1.95861176 eV) est correspond au paramètre du réseau 5.825 Å et celle de BeSe est -3.5 eV qui elle correspond au paramètre du réseau 5.04 Å. Ces données sont compatibles avec ceux trouvés dans le tableau précédent (I-4) et au même temps sont confirmées dans la figure I-8. Où le paramètre du réseau de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ contenant les deux composés est varié de 6.2 Å jusqu'à 5.2 Å avec l'augmentation de la concentration de Be (la courbe pointillée présente la variation linéaire du paramètre du réseau suivant la loi de Vegard).

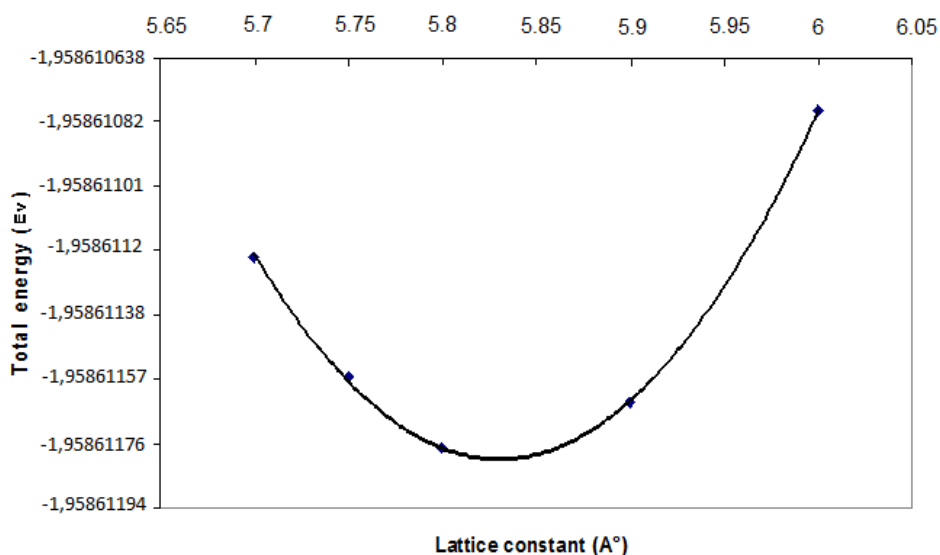


Figure I-6: Energie total (eV) de CdSe en fonction du paramètre du réseau (Å) [25].

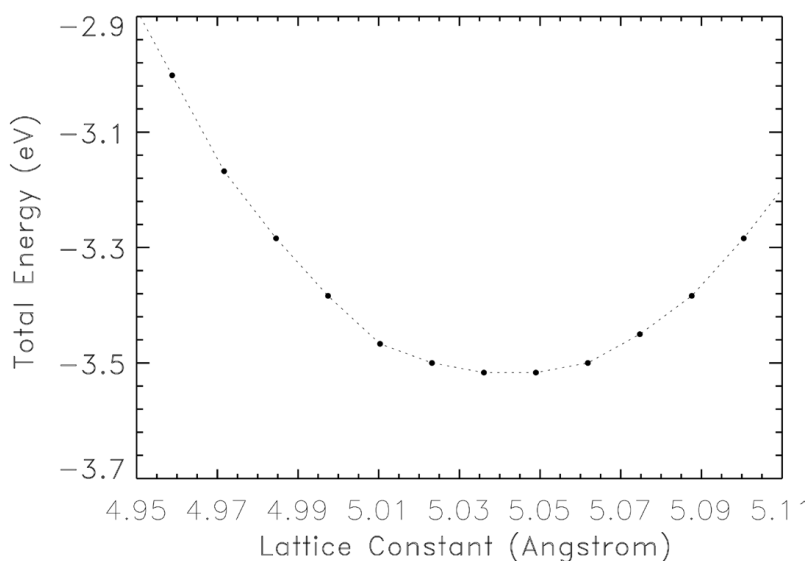


Figure I-7: Energie total (eV) de BeSe en fonction du paramètre du réseau (Å) [26].

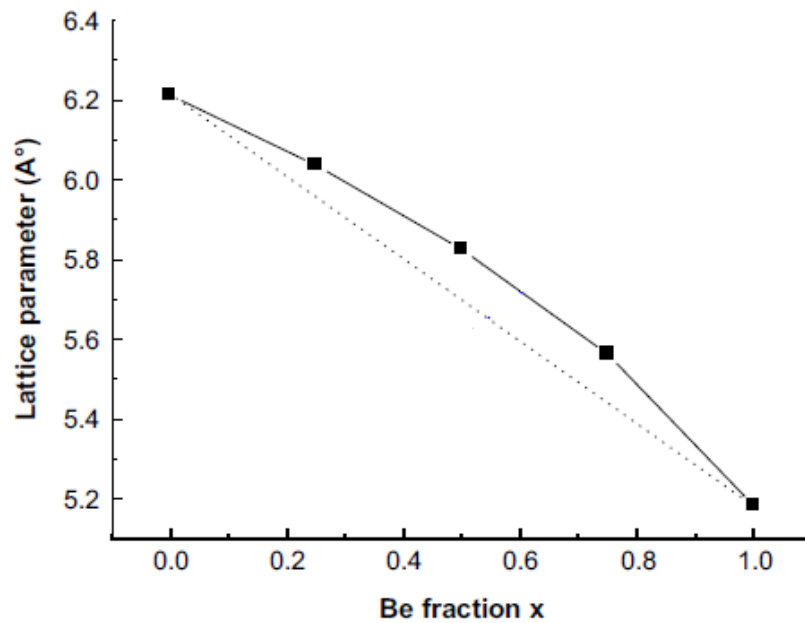


Figure I-8: Variation du paramètre du réseau en fonction de la concentration de Be dans l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ (carrés remplis) comparée avec celle tracée par la loi de Vegard (ligne pointillée) [26].

I.2.4. Première zone de Brillouin:

L'énoncé le plus important de la condition de diffraction pour la physique de l'état solide fut donné par Brillouin; c'est la seule construction utilisée dans la théorie des bandes d'énergie pour les électrons d'un cristal et dans l'expression des excitations élémentaires des cristaux. Une zone de Brillouin est par définition la maille de Wigner Seitz du réseau réciproque. Le plus petit volume entièrement compris entre les plans médiateurs des vecteurs du réseau réciproque tracés à partir de l'origine est appelée première zone de Brillouin.

L'étude des propriétés des composés CdSe et BeSe se fera dans la première zone de Brillouin pour une structure zinc blende. Cette première zone de Brillouin possède la forme d'un octaèdre tronqué (Figure I-9). Cet espace réduit du réseau réciproque est caractérisé par des points et des lignes d'importance particulière, on les appelle les points et les lignes de haute symétrie et qui peuvent être décrits à partir de la théorie des groupes [28].

I.2.4.1. Les points de haute symétrie:

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

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

$$k_x = \frac{2\pi}{a}(\pm 1,0,0) \quad k_y = \frac{2\pi}{a}(0,\pm 1,0) \quad k_z = \frac{2\pi}{a}(0,0,\pm 1)$$

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

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

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

$$k_W = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$$

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

avec les coordonnées:

$$k_Z = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{2}, 1\right)$$

I.2.4.2. Les lignes de haute symétrie:

Δ : cette ligne représente la direction $\langle 100 \rangle$. Elle relie le centre Γ au point X.

Σ : c'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.

Λ : cette ligne est la direction $\langle 111 \rangle$. Elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre.

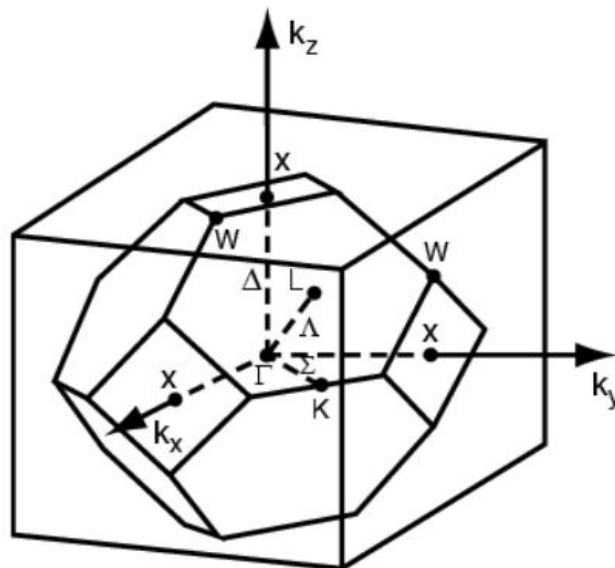


Figure I-9: Zone de Brillouin de la structure zinc blende [23].

I.2.5. Structures des bandes d'énergie:

Pour les semiconducteurs II-VI, les bords de la structure de bande sont situés au centre de la zone de Brillouin. La bande de conduction des semiconducteurs II-VI est due à l'orbitale s de l'atome de la colonne II, et leur bande de valence est due à l'orbitale p de l'atome de la colonne VI [29].

Si on prend en considération le spin, il transforme deux fois dégénérée la symétrie Γ_1 de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin en Γ_6 et celle Γ_5 de la bande de valence en Γ_7 et Γ_8 , respectivement deux et quatre fois dégénérées. Ces deux dernières sont séparées de l'énergie Δ_{so} . Les bandes qui abordent la bande interdite sont Γ_6 et Γ_8 où cette dernière à la bande de valence se compose de deux bandes de courbure différente avec deux masses effectives, une est lourde et

l'autre est légère. La bande de forte courbure est celle des trous dits légers (lh : light holes), l'autre est celle des trous lourds (hh: heavy-holes) [30]. La figure I-10 ci-dessous représente bandes au centre de la zone de Brillouin.

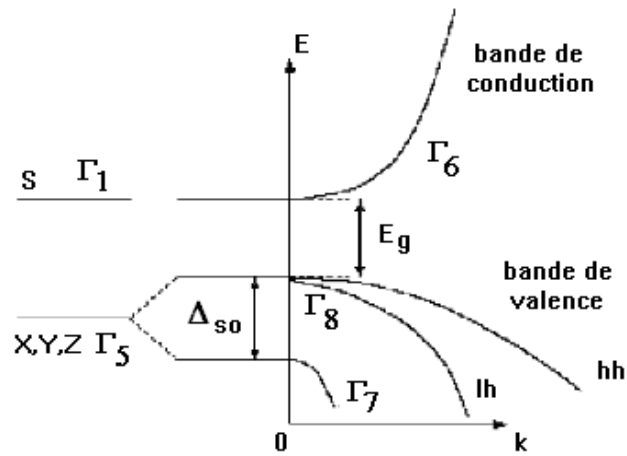


Figure I-10: Schéma de bandes au centre de la zone de Brillouin.

I.2.6. Gap direct et gap indirect:

On dit que le semiconducteur est à gap direct, si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction correspondent au même vecteur d'onde k , c'est le cas du composé CdSe (figure I-11). Sinon le gap est indirect pour que ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de k différentes comme la figure I-12 le montre pour le composé BeSe [26, 31].

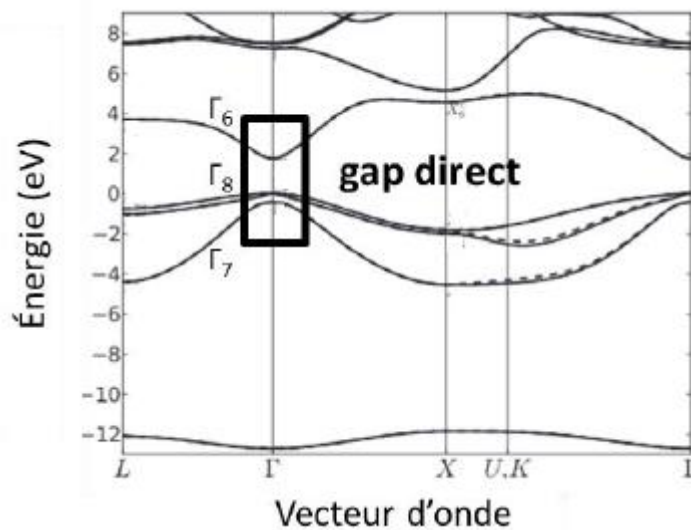


Figure I-11: Transition à gap direct (CdSe) [31].

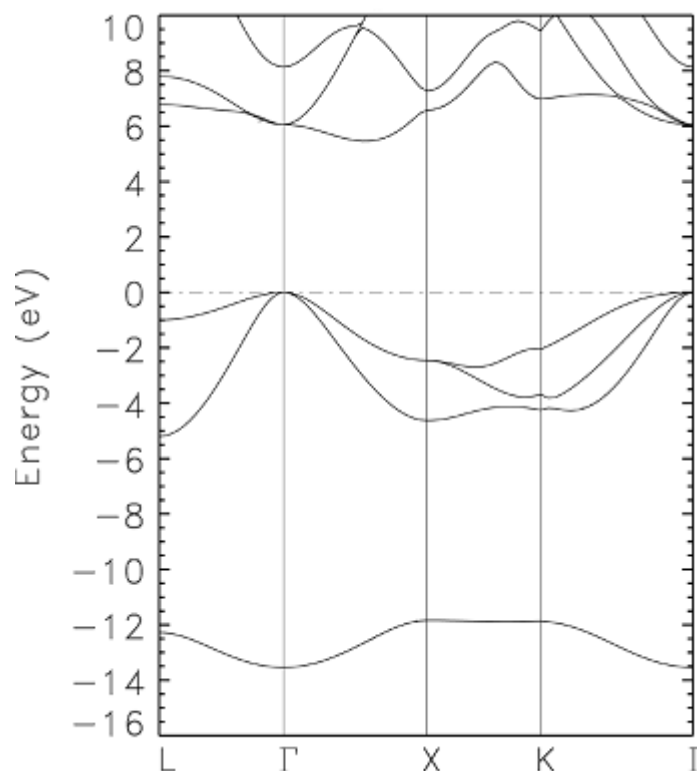


Figure I-12: Transition à gap indirect (BeSe) [26].

I.2.7. Le diagramme de phase:

En thermodynamique, un diagramme de phase indique une présentation graphique représentant les domaines de l'état physique (ou phase) d'un matériau en fonction de variables choisies pour faciliter la compréhension des phénomènes étudiés. Parmi les diagrammes les plus simples concernant un composé binaire avec les variables, la température et la concentration atomique.

I.2.7.1. Diagramme de phase du CdSe:

Le diagramme de phase CdSe les travaux de Massalski et *al.* [32] a été redessiné à partir d'une version préliminaire de Sharma et Chang [33]. Une partie d'écart de miscibilité dans la phase liquide n'est représentée qu'au-dessous de 1400 C°. Il s'agissait d'une spéculation due au manque de données expérimentales. La forme complète de l'écart de miscibilité a été prédite par Liu et *al.* [34], (la figure I-13), par modélisation thermodynamique. Elle doit être confirmée expérimentalement [35].

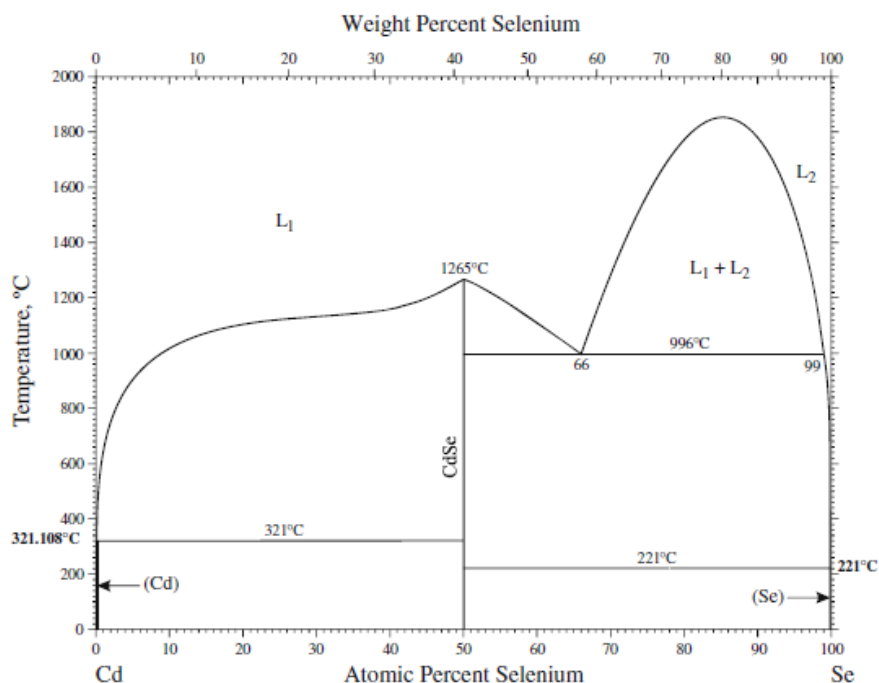


Figure I-13: Diagramme de phase du composé binaire CdSe [34].

I.2.7.2. Diagramme de phase de l’alliage $Be_xCd_{1-x}Se$:

La courbe binoïdale indique les limites de la solubilité à l’équilibre en fonction de la température. La température critique, au dessus de laquelle la miscibilité complète est possible pour certaines concentrations, est 461 K°. Avec la courbe spinoïdale, nous pouvons dessiner la région de métastabilité. La large gamme entre spinoïdale et binoïdale courbes indique que cet alliage peut exister sous forme phase métastable donc l’alliage $Be_xCd_{1-x}Se$ est stable à basse température (figure I-14) [27].

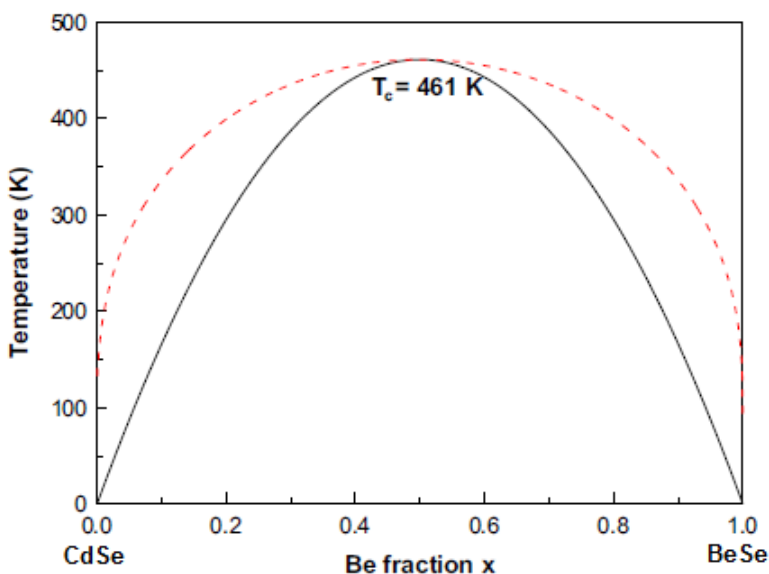


Figure I-14: Diagramme de phase de l’alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de la composition de Be [27].

Le tableau (I-5) résume des paramètres caractéristiques pour les composés binaires étudiés.

Tableau I-5 : Quelques propriétés physiques des composés CdSe et BeSe.

Nom	Symbole et Unités	Valeurs	
		CdSe	BeSe
Structure cristalline	-	Zinc blende	Zinc blende
Groupe d'espace	-	$T_d^2 - F\bar{4}3m$	$T_d^2 - F\bar{4}3m$ [36]
Paramètre cristallin	a (Å)	6.05	5.138
Masse molaire	M (g.mole ⁻¹)	191.37	87.972
Masse volumique	ρ (g.cm ⁻³)	5.81 [37]	2.220 [38]
Rayon de Bohr	r (nm)	6.1 [39]	-
Hauteur de la bande interdite	E _g (eV)	Dir (1.675) [40]	Indir (3.875) [41]
Mobilité des électrons	μ_n (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	650[42]	-
Ionicité	%	70 [21]	-
Chaleur spécifique	C (J.g ⁻¹ .K ⁻¹)	0.255 [37]	-
Conductivité thermique	κ_L (W.cm ⁻¹ .K ⁻¹)	0.043[37]	-
Température de fusion	T _f (C°)	1623K [21]	-
Température de Debye	θ_D (K°)	180 [37]	1947.732 [38]

I.3. Matériaux semiconducteurs pour l'optoélectronique:

Les émetteurs et les détecteurs optoélectroniques sont essentiellement intervenir dans les matériaux semiconducteurs. Il faut avoir quel est le domaine de longueurs d'onde en fonction de leurs applications. Ils sont appelés aussi les dispositifs photoniques car la particule de base de lumière-photon dans ces dispositifs joue un rôle important.

Le choix du semiconducteur sera en fonction de l'application visée:

- Photodétecteur ($E_g < \frac{hc}{\lambda}$): sont des dispositifs qui transforment la lumière qu'ils absorbent en grandeurs mesurables, à savoir un courant ou une tension électrique. Tout en se basant sur les phénomènes physiques qu'ils présentent les matériaux semiconducteurs comme la cellule photovoltaïque, la cellule solaire et la cellule photoconductrice.

- Photoémètre ($E_g \approx \frac{hc}{\lambda}$): il se trouve que le phénomène d'émission dans les semiconducteurs a été utilisé pour la fabrication de divers dispositifs accommodés, pour assurer une fonction électronique désirée [42] comme les diodes électroluminescentes et les diodes laser.

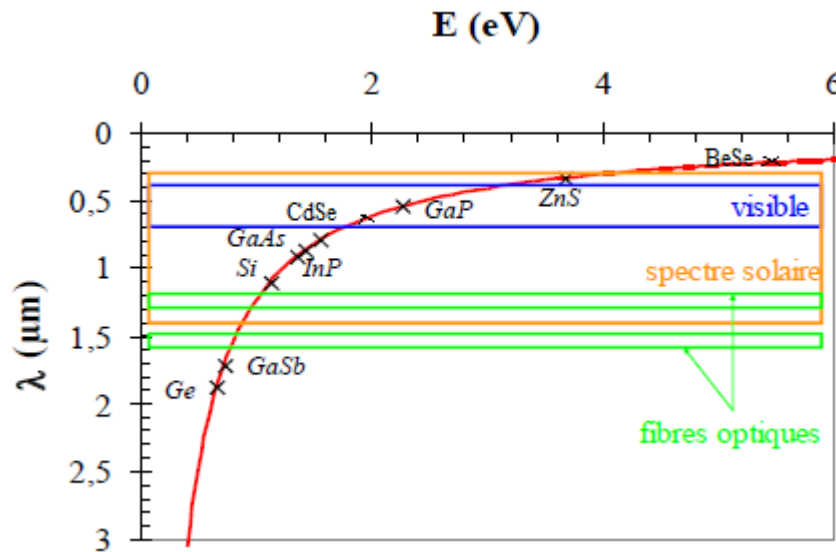


Figure I-15: La variation de la longueur d'onde en fonction du gap.

D'après cette figure I-15, il y'a une grande différence entre les gaps E_g des composés binaires CdSe et BeSe, cela donne une importance technologique aux leurs alliages $Be_xCd_{1-x}Se$ [3].

Les semiconducteurs CdSe et BeSe et leurs alliages ont une grande importance pour l'optoélectronique:

- Les films minces de CdSe ont attirés une grande attention en raison de leurs larges applications dans les diverses technologies optoélectroniques telles que les lasers [3, 9], les capteurs [3, 10], les transistors [3, 11], les photoélectrodes [3, 44], les diodes électroluminescentes [3, 12, 45], les photocatalyseurs [3, 13], les guides d'ondes optiques [3, 46] et les cellules solaires [3, 14-16, 47-49].
- Les propriétés intéressantes du composé BeSe rendent attractives pour les applications technologiques dans le domaine des dispositifs optoélectroniques [3, 50], telles que les diodes lasers bleu-vert et les diodes électroluminescentes [3, 51].
- L'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$ a été récemment proposé comme un matériau important dans les diodes lasers verts [52].

I.3.1. Les photodétecteurs:

I.3.1.1. La cellule photovoltaïque ou photodiode:

Une photodiode est essentiellement une jonction p-n ou un contact métal-semiconducteur fonctionnant sous une polarisation inverse. Lorsqu'un signal optique frappe la photodiode, la région de déplétion sert à séparer les paires électron-trou photogénérées et un courant électrique circule dans le circuit externe. Pour un fonctionnement à haute fréquence, la région de déplétion doit rester

mince pour réduire le temps de transit. D'autre part, pour augmenter l'efficacité quantique, la couche d'appauvrissement doit être suffisamment épaisse pour permettre l'absorption d'une grande partie de la lumière incidente. Il existe donc un compromis entre la vitesse de réponse et l'efficacité quantique [53]. La photodiode est schématisée dans la figure (I-16)

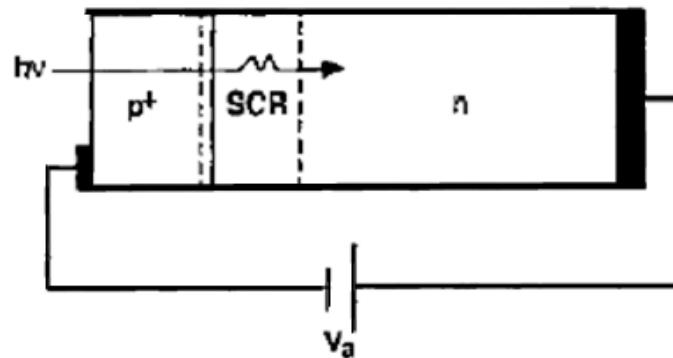


Figure I-16: Présentation schématique d'une jonction p-n photodiode [32].

I.3.1.2. La cellule solaire ou photopile:

Une cellule solaire (figure I-17) est similaire à une photodiode et possède le même principe de fonctionnement. Cependant, la cellule solaire diffère d'une photodiode en ce sens qu'il s'agit d'un dispositif à grande surface et qu'il couvre une large gamme de spectre optique (rayonnement solaire). Les cellules solaires fournissent l'alimentation électrique de longue durée pour les satellites. La cellule solaire est un candidat majeur pour une source d'énergie terrestre d'énergie terrestre, car elle peut convertir directement la lumière du soleil en électricité avec un bon rendement et elle est inoffensive pour l'environnement écologique [53].

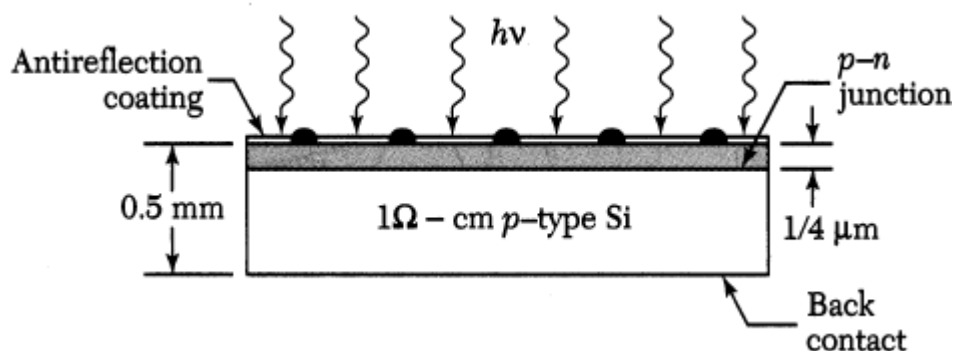


Figure I-17: Présentation schématique d'une cellule solaire [53].

I.3.2. Les photoémetteurs:

I.3.2.1. Les diodes électroluminescentes (LED):

On a dit précédemment qu'il y a une différence considérable entre les gaps d'énergie des composés binaires CdSe et BeSe donc ses alliages sont bien adaptés à l'émission de plusieurs couleurs (figure I-18), toute fois, la maîtrise du dopage a longtemps compliqué la réalisation des jonctions p-n pour ces matériaux.

Les diodes électroluminescentes (Light-emitting diodes) où bien les LEDs sont des jonctions p-n qui peuvent émettre un rayonnement spontané dans les régions ultraviolette, visible ou infrarouge. La LED visible a une multitude d'applications comme lien d'information entre les instruments électroniques et leurs utilisateurs. La LED infrarouge est utile dans les opto-isolateurs et pour la communication par fibre optique [53] (figure I-19).

La figure I-18 montre la réponse relative de l'œil en fonction de la longueur d'onde (ou de l'énergie photonique correspondante), La sensibilité maximale de l'œil est à 0,555 μm , La réponse de l'œil tombe à presque zéro aux extrémités du spectre visible à environ 0,4 et 0,7 μm , Pour une vision normale à la réponse maximale de l'œil, 1 W d'énergie radiante est équivalent à 683 lumen. Comme l'œil n'est sensible qu'à la lumière dont l'énergie photonique $h\nu$ est égale ou supérieure à 1,8 eV (50,7 μm), les semiconducteurs d'intérêt doivent avoir une bande interdite d'énergie supérieure à cette limite. La figure montre également les bandes interdites de divers semiconducteurs [53].

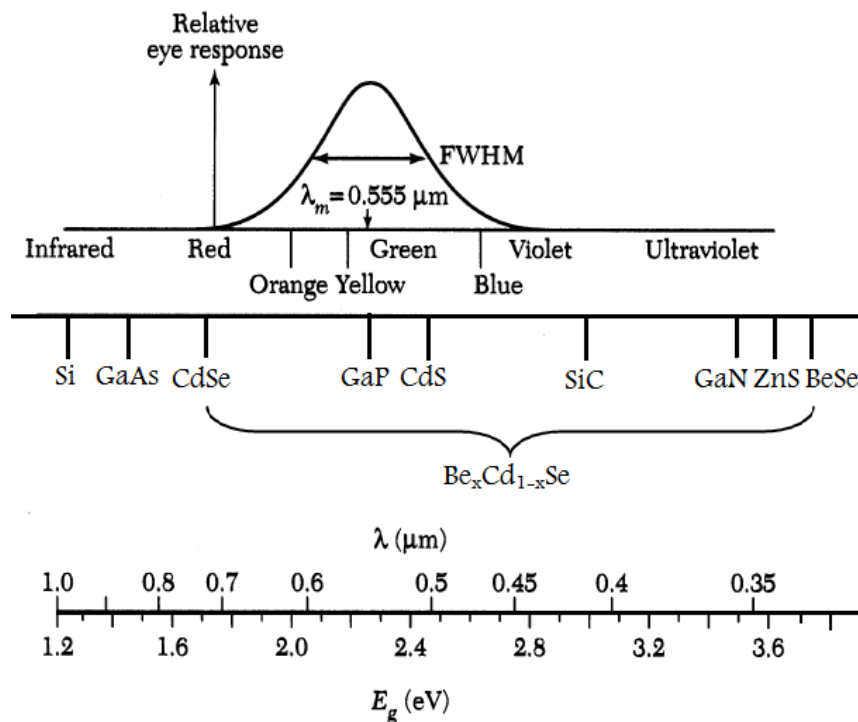


Figure I-18: diodes électroluminescentes réalisés par des semiconducteurs [52].

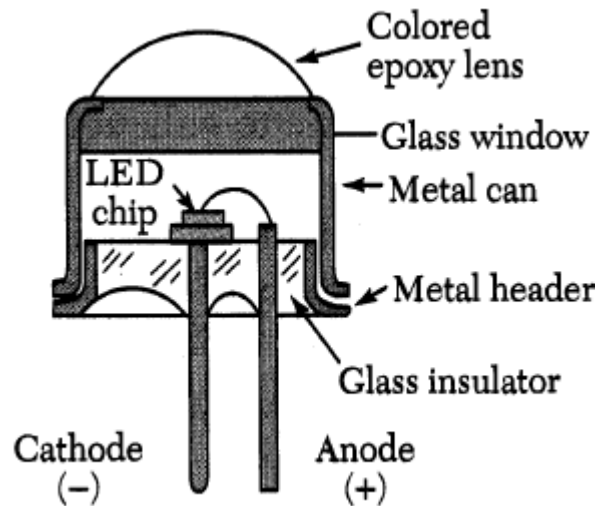


Figure I-19: schéma de deux lampes LED [53].

I.3.2.2. Les diodes laser:

La diode laser est également une jonction p-n fonctionnant dans des conditions de polarisation effrontée. Cependant, la structure de la diode doit assurer le confinement des porteurs et le champ optique pour que la condition d'émission stimulée puisse être établie. Les diodes laser ont évolués de l'homojonction, à la configuration à rétroaction distribuée et aux structures à puits quantiques. Les principaux objectifs sont d'abaisser la densité de courant de seuil pour l'effet laser et d'avoir tous les photons émis à une seule fréquence. La diode laser est un dispositif clé pour les systèmes de communication par fibre optique à longue distance, les systèmes de communication par fibre optique. Elle est également très utilisée pour l'enregistrement vidéo, l'impression à grande vitesse et la lecture optique [53] (figure I-20).

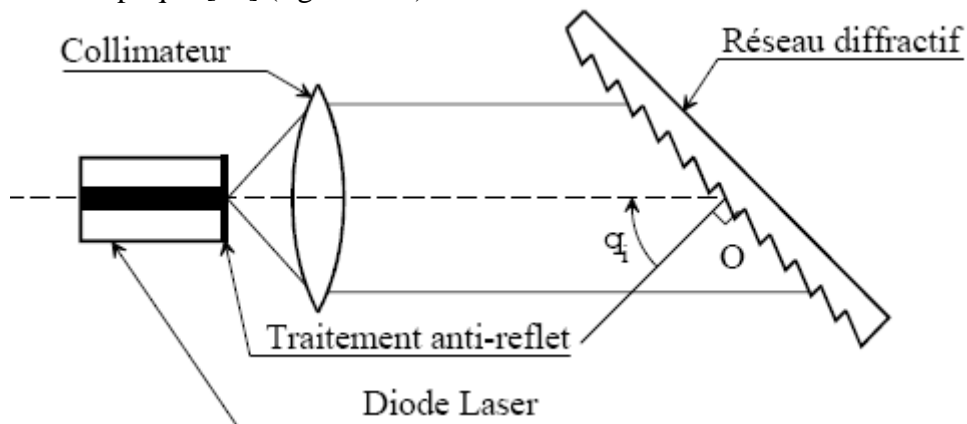


Figure I-20: schéma d'une diode laser [54].

Chapitre II

La méthode du pseudopotentiel

Chapitre II

La méthode du pseudopotentiel

II.1. Introduction:

L'étude de la structure de bandes peut interpréter plusieurs phénomènes physiques qui se passent dans les corps solides afin de comprendre les propriétés et les caractéristiques des matériaux. Toutes les méthodes du calcul de structure de bandes sont nécessaires pour résoudre l'équation de Schrödinger:

$$H\psi_k = E_k \psi_k \quad (\text{II-1})$$

La difficulté de la résolution de cette équation réside dans le terme du potentiel $V(r)$ où on a retrouvé un problème principal qui il est l'absence d'une formule analytique du potentiel cristallin qu'il présente la périodicité du réseau cristallin. Ce potentiel résulte par la présence des forces électrostatiques d'interaction entre les noyaux et les électrons: répulsions ou attractions suivant leurs charges (positives ou négatives) [42]:

$$V(r) = V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{II-2})$$

Avec

V_{ee} : l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

V_{en} : l'énergie potentielle d'attraction noyaux - électrons.

V_{nn} : l'énergie potentielle de répulsion entre les noyaux.

La résolution de l'équation de Schrödinger permet de trouver les énergies et les fonctions d'ondes en état stationnaire de toutes ces particules. Parmi Les méthodes du calcul qu'elle est utilisée pour calculer les énergies et d'autres propriétés des matériaux semiconducteurs, c'est la méthode du pseudopotentiel (PM).

II.2. La méthode du pseudopotentiel:

Le concept de pseudopotentiels a été introduit par Fermi pour étudier les états atomiques observées. Par la suite, Hellman a proposé d'utiliser les pseudopotentiels pour calculer les niveaux d'énergie des métaux alcalins. L'utilisation généralisée des pseudopotentiels n'a pas eu lieu avant la fin des années 1950, lorsque l'activité dans le domaine de la physique de la matière condensée a commencé à accélérer. Dans la méthode du pseudopotentiel, les électrons de valence doivent être seulement pris en compte et les électrons du cœur sont traités comme s'ils étaient figés dans une configuration atomique. Par conséquent, on pense que les électrons de valence se déplacent dans un faible potentiel à un électron ou « pseudopotentiel ».

II.2.1. Le formalisme mathématique de la méthode pseudopotentiel:

La méthode du pseudopotentiel est basée sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW) fût mise au point par Herring. Dans cette méthode, la fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}$ est une combinaison linéaire d'ondes planes orthogonalisées [55]. Cela exprimé par:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{t}} b_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \quad (\text{II-3})$$

Où $b_{\mathbf{k},\mathbf{t}}$ sont les coefficients de l'orthogonalisations, et $\phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}}$ sont les fonctions d'ondes du cœur.

Comme la fonction d'onde du cristal $\Psi_{\mathbf{k}}$ doit être orthogonale aux fonctions d'ondes du cœur, les coefficients de l'orthogonalisation peuvent être calculés, ce qui donne l'expression suivante:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{t}} \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \quad (\text{II-4})$$

Pour obtenir une équation en fonction de $\varphi_{\mathbf{k}}$, l'expression (II-4) de $\psi_{\mathbf{k}}$ sera substituée dans l'équation de Schrödinger, et on trouve:

$$\mathbf{H} \varphi_{\mathbf{k}} - \mathbf{H} \sum_{\mathbf{t}} \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} = E_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (\text{II-5})$$

$$\text{Où} \quad \mathbf{H} \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} = E_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \quad (\text{II-6})$$

$$\text{Alors} \quad \mathbf{H} \varphi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{t}} \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} = E_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (\text{II-7})$$

L'équation précédente peut s'inscrire d'une façon plus détaillée:

$$\mathbf{H} \varphi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{t}} \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} = E_{\mathbf{k}} \left[\varphi_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{t}} \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \right] \quad (\text{II-8})$$

$$\mathbf{H} \varphi_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{t}} (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{t}}) \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \quad (\text{II-9})$$

On faisant intervenir le potentiel $V_{\mathbf{R}}$ en posant:

$$\mathbf{V}_{\mathbf{R}} \varphi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{t}} (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{t}}) \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} \quad (\text{II-10})$$

$V_{\mathbf{R}}$ est le potentiel répulsif (positif) porté la forme:

$$\mathbf{V}_{\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{t}} \frac{(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{t}}) \langle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \phi_{\mathbf{k},\mathbf{t}}}{\varphi_{\mathbf{k}}} \quad (\text{II-11})$$

L'équation (II-9) peut s'écrire alors de la façon condensée:

$$(\mathbf{H} + \mathbf{V}_{\mathbf{R}}) \varphi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \quad (\text{II-12})$$

$$\text{Avec} \quad \mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\mathbf{C}} \quad (\text{II-13})$$

Où

$V_{\mathbf{C}}$ est le potentiel attractif (négatif) du cœur.

Par substitution de l'Hamiltonien dans l'équation (II-12), on trouve:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_C + V_R \right] \varphi_k = E_k \varphi_k \quad (\text{II-14})$$

E_t dans l'équation (II-9) représente la valeur propre de l'énergie atomique, et la sommation sur t représente une sommation sur les états du cœur. Le résultat donné par l'équation (II-9) peut être considéré comme une équation d'onde pour la pseudofonction d'onde φ_k , mais la valeur propre d'énergie E_k correspond à l'énergie réelle de la fonction d'onde du cristal Ψ_k .

En plus, suite à la procédure d'orthogonalisation, le potentiel répulsif V_R , qui sert à annuler le potentiel attractif V_C , est introduit dans l'Hamiltonien de la pseudofonction d'onde. Le résultat est un pseudopotentiel faible $V_P=V_C+V_R$ considéré comme une perturbation:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_P \right] \varphi_k = E \varphi_k \quad (\text{II-15})$$

Ce résultat connu sous le nom de théorème d'annulation de Phillips-Kleinman, justifie pourquoi la structure électronique des électrons de valence fortement liés peut être décrite à l'aide de la méthode d'électron presque libre (NFEM) et des potentiels faibles. Pour simplifier ce problème, il ya des modèles du pseudopotentiel qu'ils sont utilisés à la place du pseudopotentiel réel. Ces modèles sont plus détaillés par la suite.

La figure II-1 représente la variation du pseudopotentiel et le potentiel réel en fonction de la distance au noyau r . Dans celle-ci, le potentiel réel est important et donc fort près du cœur, mais le pseudopotentiel dans cette région est faible, indiquant que l'annulation entre le potentiel réel et le potentiel répulsif dû aux termes d'orthogonalisation est assez complète. En dehors du noyau, le pseudopotentiel est attractif, et identique à celui du potentiel réel de Coulomb. La forme faible du pseudopotentiel dans la figure II-1 a une influence claire sur les pseudofonctions d'onde.

La figure II-2 est une représentation schématique de la variation de la fonction d'onde réelle et de la pseudofonction d'onde avec la variation de la distance au noyau r . On peut voir que la pseudofonction d'onde est lisse, même dans la région du cœur. Par contre avec la fonction réelle qui présente des oscillations spatiales rapides près du cœur.

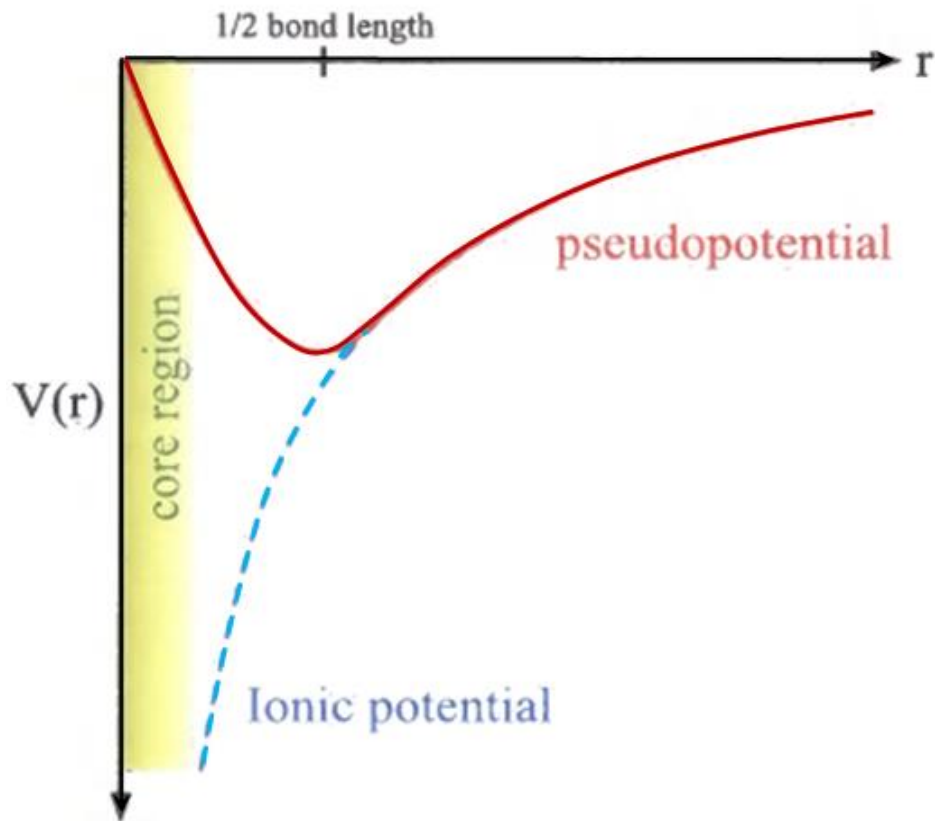


Figure II-1: Présentation schématique du pseudopotentiel de l'espace réel. La ligne pleine représente le pseudopotentiel et la ligne pointillée représente le potentiel réel [56].

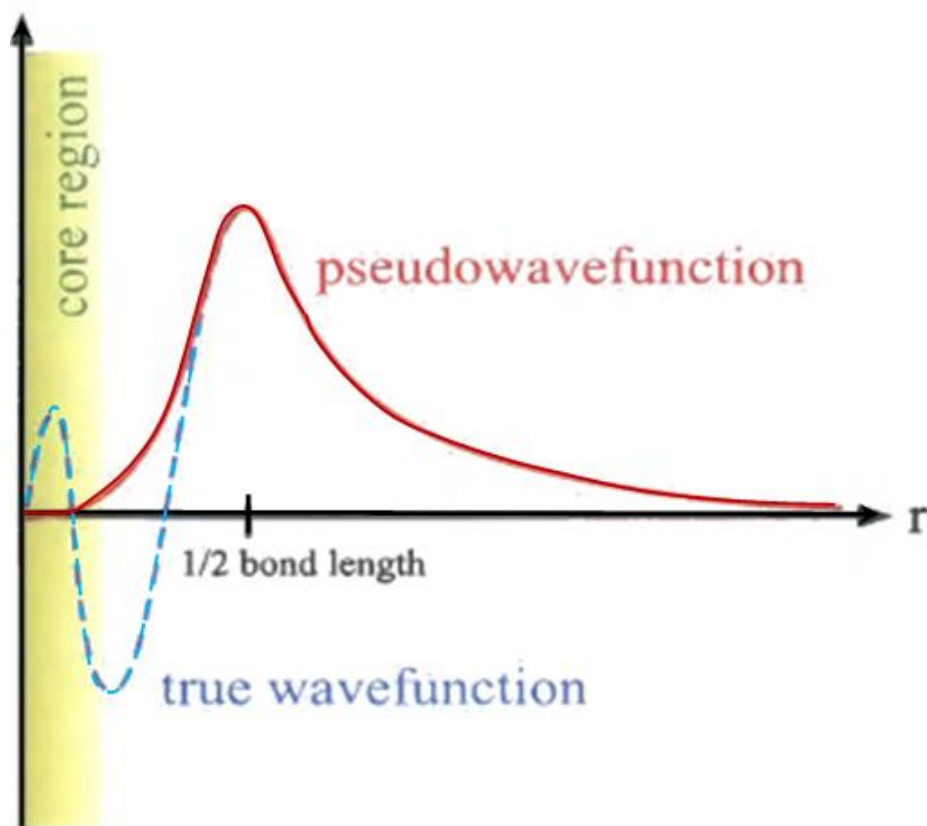


Figure II-2: Présentation schématique de pseudofonction d'onde. La ligne pleine représente la pseudofonction et la ligne pointillée représente la fonction d'onde réelle [56].

II.2.2. Caractéristiques du pseudopotentiel:

Pour connaître et introduire le pseudopotiel V_p dans les calculs, il suffit de connaître ses éléments de matrice sur une base complète de fonctions puisque le V_p n'a pas une expression locale $V_p(r)$.

Dans la formule (II-11), puisque V_R est toujours positif, on donne E_k légèrement supérieure que E_t ainsi V_p est très faible. Si on tient compte l'effet du cœur, le potentiel devient non local. Sinon le pseudopotiel devient local et dépend de la position r . On utilise deux modèles du pseudopotiel: le pseudopotiel local et le pseudopotiel non local.

II.2.2.1. Le modèle local:

Ce modèle est le plus utilisé dans le calcul de la structure de bandes, il dépend de la variable r donc on néglige l'effet du cœur. Dans ce modèle, il ya plusieurs formes des potentiels ont été proposées.

II.2.2.1.1. Modèle de Coulomb:

Dans ce modèle, Le potentiel $V(r)$ est sous la forme [54]:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ -\frac{Ze}{r_c} & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-16})$$

Avec Z est le nombre d'électron et r_c est le rayon du coeur.

Où le potentiel est coulombien à une large distance et constant dans la région du cœur (figure II-3).

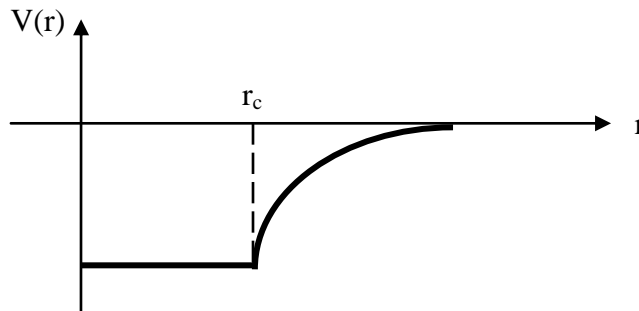


Figure II-3: Potentiel coulombien.

II.2.2.1.2. Modèle de Heine et Abarenkov:

À large distance, le potentiel dans ce modèle est similaire au potentiel dans le modèle précédent. Mais dans la région du cœur, Heine et Abarenkov ont fait un ajustement par l'introduction d'un potentiel A considéré constant (figure II-4) donné par la relation:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II-17})$$

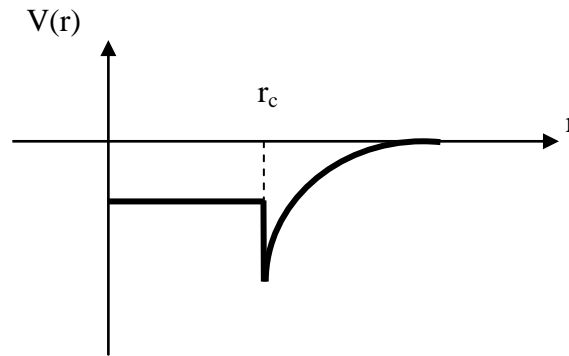


Figure II-4: Potentiel du modèle de Heine et Abarenkov.

II.2.2.1.3. Modèle d’Ashcroft:

Le potentiel dans le modèle d’ashcroft est appelé le potentiel du cœur inoccupé (the empty core potential), où il est nulle à l’intérieur du cœur et à l’extérieur est coulombien (figure II-5), a une forme similaire au forme du potentiel de Heine et Abarenkov. Il a donné par:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r} & r > r_C \\ 0 & r \leq r_C \end{cases} \tag{II-18}$$

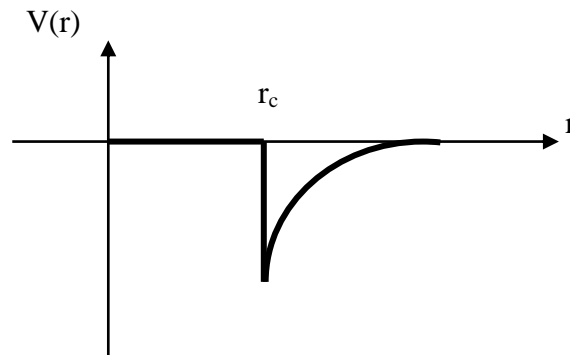


Figure II-5: le potentiel du cœur inoccupé.

II.2.2.2. Modèle non local:

Dans ce modèle, le potentiel est non local car on a tient compte au l’effet du cœur. Où ce potentiel est similaire au potentiel local dans le modèle de Heine et Abarenkov mais la constante A est dépend de l’énergie donc on remplace A par A_l(E) pour chaque valeur l du nombre quantique. Donc le pseudopotentiel non local peut être s’écrire sous la forme suivante [57]:

$$V_P = V_{NL}(\mathbf{r}, E) \sum_l A_l(E) f_l(\mathbf{r}) P_l \tag{II-19}$$

Où

A_l(E): la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

P_l : est l’opérateur de projection de la l^{ième} composante du moment angulaire.

f_l(r) : est la fonction simulant les effets des états du cœur, elle a plusieurs formes, les plus utilisées sont celles de la forme carré de Heine – Abarenkov et de la forme Gaussienne et d’ Ashcroft.

II.2.2.2.1. La fonction de Heine-Abarenkov:

Cette fonction est la plus utilisée à cause de sa simplicité, elle a la forme carrée (figure II-6) et donnée par l'expression:

$$f(r) = \begin{cases} 1 & r \leq r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

Avec r_c est le rayon du cœur ionique.

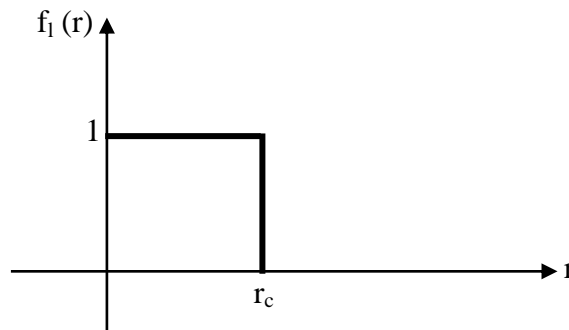


Figure II-6: Fonction carré.

II.2.2.2.2. La fonction de Gauss:

La fonction de la forme Gaussienne (figure II-7) est donnée par l'expression:

$$f_1(r) = \exp(-r^2/r_c^2) \quad (\text{II-21})$$

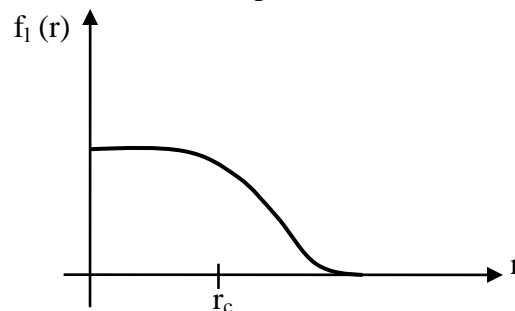


Figure II-7: Fonction Gaussienne.

II.2.2.2.3. La fonction d'Ashcroft:

Cette fonction prend la forme carrée dans la région du cœur où elle est la plus simple et l'effet du cœur est pris en compte. Cet effet est atténué jusqu'à l'annulation lorsque on s'éloigne du cœur (figure II-8).

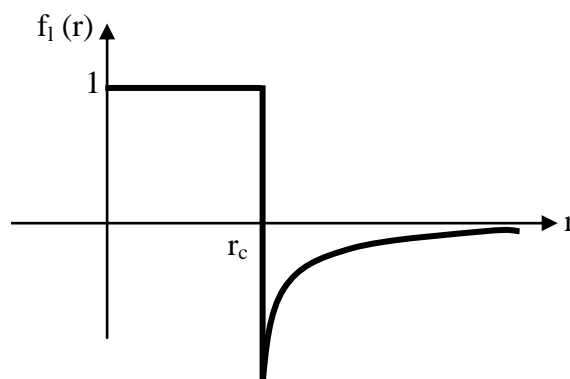


Figure II-8: Fonction d'Ashcroft.

II.3. La méthode empirique des pseudopotentiels (E.P.M):

Parmi les méthodes les plus utilisées dans le calcul de la structure de bandes c'est la méthode de pseudopotentiel empirique E.P.M (Empirical Pseudopotential Method) qui elle est une dérivée de la méthode des pseudopotentiels où les pseudopotentiels sont supposés locaux. Elle est utilisée les données expérimentales et appliquée dans les semiconducteurs de structure diamant ou zinc blende.

Dans cette technique, le pseudopotentiel cristallin V_P est une combinaison linéaire de potentiels atomiques V_a qui peut être exprimée comme une somme sur les vecteurs de translation du réseau R et les vecteurs de base atomique τ pour obtenir l'expression suivante:

$$V_P(\mathbf{r}) = \sum_{R, \tau} v_a(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}) \quad (\text{II-22})$$

Si on étend le potentiel dans le réseau réciproque, la formule (II-22) devient:

$$V_P(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) V_a(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-23})$$

Où $V_a(\mathbf{G})$ est le facteur de forme et $S(\mathbf{G})$ est le facteur de structure. Ce dernier a la forme suivante [55]:

$$S(\mathbf{G}) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-24})$$

Où N_a étant le nombre d'atomes de base.

II.3.1. La méthode du calcul:

La technique du pseudopotentiel empirique nécessite seulement un nombre réduit de facteurs de forme pour le calcul de la structure de bandes électroniques pour cela elle est pratiquement très utilisée. La procédure du calcul de la méthode EPM est illustrée dans le diagramme présenté dans la figure II-9 qui se résume:

- 1- Le choix des facteurs de forme $V(\mathbf{G})$.
- 2- La résolution de l'équation de Schrödinger pour obtenir les valeurs propres $E(\mathbf{k})$ d'énergie et les fonctions d'ondes $\psi(\mathbf{k})$.
- 3- Les valeurs calculées de l'énergie sont comparés avec l'expérience.
- 4- $V(\mathbf{G})$ est altéré si on n'obtient pas un bon accord entre l'expérience et la théorie. Le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'un bon accord entre l'expérience et les calculs trouvés [55].

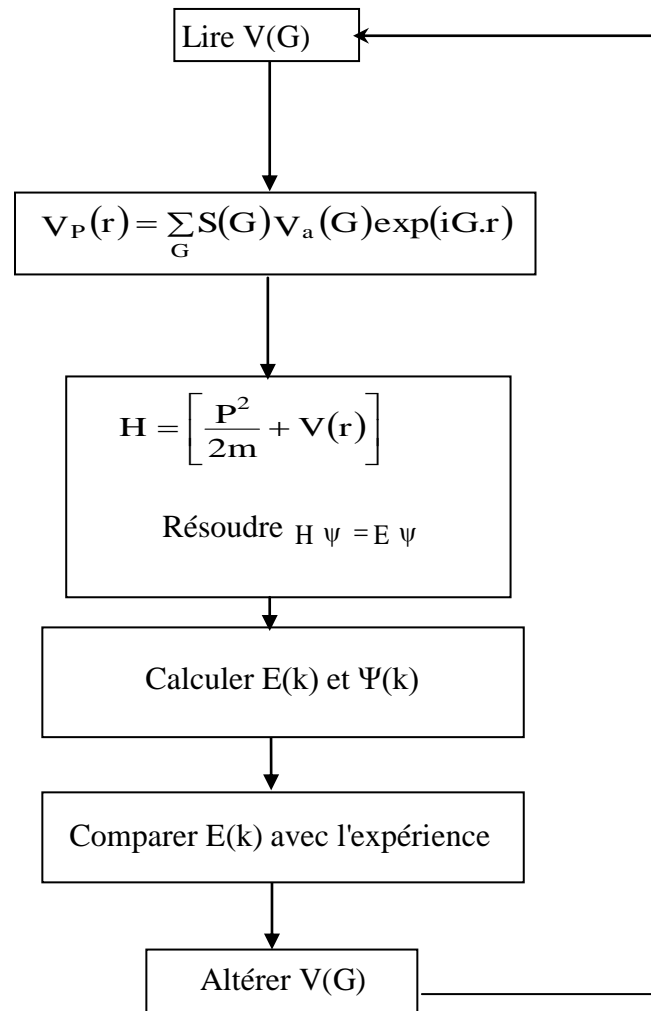


Figure II-9: Diagramme de la procédure du calcul par E.P.M [55].

II.4. La dépendance en composition des propriétés physiques des alliages Semiconducteurs:

La périodicité du réseau de la structure cristalline dans un alliage n'est plus respectée, et la distribution des atomes des composés constituant ces alliages dans les sites des sous réseaux fait un désordre qui il est primordial [29].

A partir des composés binaires et par la variation de leur composition, on peut obtenir des alliages ternaires, quaternaires ou pentaires ça dépend au nombre des éléments qu'ils renferment, trois, quatre ou cinq respectivement. Pour élaborer par exemple un alliage ternaire $A_xB_{1-x}C$ avec une propriété physique de valeur spécifique, il faut relier cette propriété à la composition de l'alliage et elle peut être représentée par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants [58]. La valeur moyenne de la propriété physique $F(x)$ du cristal ternaire $A_xB_{1-x}C$ étant:

$$\overline{F(x)}_{A_xB_{1-x}C} = x F_{AC} + (1-x) F_{BC} \quad (\text{II-25})$$

L'alliage ternaire de la forme $A_xB_{1-x}C$ est composé des molécules AC avec une fraction molaire(x) et des molécules BC avec une fraction molaire (1-x).

Pour l'étude des propriétés physiques de ces alliages, il y'a plusieurs approches théoriques envisagées.

II.4.1. L'approximation du cristal virtuel (VCA):

Grâce à la simplicité de l'approximation du cristal virtuel VCA, elle est la plus préférée et offre des résultats compatibles et raisonnables pour la structure de bandes par couplage avec la méthode du pseudopotentiel empirique (EPM) [59]. Cette approche considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique virtuel avec un potentiel atomique moyen. L'Hamiltonien du cristal considéré pour cette approximation est donné par:

$$H = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{BC}(r) \right] + x[V_{AC}(r) - V_{BC}(r)] \quad (\text{II-26})$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + [xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r)] \quad (\text{II-27})$$

Avec V_{AC} et V_{BC} sont les potentiels périodiques des composés binaires AC et BC respectivement.

Pour la plupart des alliages ternaires, Le gap d'énergie a approximativement la forme quadratique suivante [60, 61]:

$$E_{ABC}(x) = xE_{AC} + (1-x)E_{BC} + Cx(1-x) \quad (\text{II-28})$$

Avec E_{AC} et E_{BC} sont respectivement les gaps énergétiques des composés binaires AC et BC.

C est un paramètre non linéaire nommé le paramètre de courbure ou «Bowling » et prouvé par l'expérience.

Le paramètre de courbure fourni par la VCA est très différent de celui donné expérimentalement, donc il faut ajouter un terme correctif à l'Hamiltonien qu'il représente l'effet du désordre compositionnel. Ce terme est appelé le potentiel du désordre effectif [62].

II.4.2. Le potentiel du désordre effectif:

D'après Baldereschi et Maschke, le potentiel du désordre $V_{dés}$ s'écrit pour un alliage ternaire $A_xB_{1-x}C$ comme suit [62]:

$$V_{dés} = (1-x) \sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) - x \sum_{j_{BC}} \Delta(r - R_j) \quad (\text{II-29})$$

Avec

$$\Delta(r) = V_{AC}(r) - V_{BC}(r) \quad (\text{II-30})$$

j_{AC} et j_{BC} indiquent respectivement que la sommation est sur les sites des composés AC et BC.

La VCA postule deux approximations comme suit:

$$\sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) = x \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{II-31})$$

$$\sum_{j_{BC}} \Delta(r - R_j) = (1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (\text{II-32})$$

Dans l'approximation (VCA), le potentiel du désordre effectif est nulle où cette dernière néglige l'effet du désordre compositionnel. Pour résoudre ce problème, il faut approximer que le potentiel $V_{dés}$ introduit l'effet du désordre compositionnel. Cette approximation appelle la VCA améliorée (VCAA) [62].

II.4.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA):

Le pseudo-potentiel du système dans cette approximation devient sous la forme d'une somme de potentiel périodique du cristal et le potentiel dû au désordre compositionnel [62, 63]:

$$V(r) = V_{VCA} + V_{dés} \quad (II-33)$$

$$V(r) = V_{VCA} - P(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-34)$$

Où

V_{VCA} : le potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}$: le potentiel non périodique dû au désordre compositionnel [63].

Et

$$\sum_{j_{AC}} \Delta(r - R_j) = \alpha x \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-35)$$

$$\sum_{j_{BC}} \Delta(r - R_j) = \beta(1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-36)$$

Où α et β sont des fonctions du désordre qui dépendent de la concentration x et de l'énergie potentielle [65]. Donc le potentiel du désordre devient:

$$V_{dés} = (\alpha - \beta)x(1-x) \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-37)$$

Le terme $(\alpha - \beta)$ est considéré comme un terme ajustable donné par:

$$\alpha - \beta = -\frac{1}{N(x(1-x))^{\frac{1}{2}}} \left[N^2 \frac{(1-x)}{x} + \sum_{n=0}^N C_n^N x^{N-n-1} (1-x)^{n-1} (n^2 - 2nN(1-x)) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (II-38)$$

Où

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

Par la simplification de la formule (II-38), et on a la substitué dans la formule (II-37), on trouve:

$$V_{dés}(r) = -\left(\frac{x(1-x)}{N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-39)$$

L'expression de $V_{dés}$ aura la forme suivante après de prendre en considération tous les sites étudiés [62, 66]:

$$V_{dés}(r) = -P(x(1-x))^{\frac{1}{2}} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad (II-40)$$

Où

$$P = \frac{\left(\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{\sum_{i=1}^n N_i \Delta(d_i)} \quad (\text{II-41})$$

Avec

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

i : indique le i^{ème} plus proche voisin.

n : peut être étendu pour inclure tous les sites du cristal.

d_i: la distance entre i^{ème} plus proche voisin [67].

On peut écrire l'équation (II-34) sous une forme plus étendue [67]:

$$V(r) = xV_{AC}(r) + (1-x)V_{BC}(r) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{AC} - V_{BC}) \quad (\text{II-42})$$

Le potentiel devient comme suit en termes de séries de Fourier:

$$V(r) = \sum_G V(G) \exp(iG.r) \quad (\text{II-43})$$

Avec V(G) est le facteur de forme donné par:

$$V(G) = xV_{AC}(G) + (1-x)V_{BC}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{AC}(G) - V_{BC}(G)) \quad (\text{II-44})$$

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

On utilise ces facteurs de formes pour le calcul des gaps d'énergie de l'alliage ternaire semiconducteur Be_xCd_{1-x}Se:

$$V_{BeCdSe}(G) = xV_{BeSe}(G) + (1-x)V_{CdSe}(G) - P[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{BeSe}(G) - V_{CdSe}(G)) \quad (\text{II-45})$$

En faisant varier la valeur du paramètre P jusqu'à l'obtention du bowing optique expérimental.

Chapitre 3

**Etude des propriétés
optoélectroniques et
diélectriques des
semiconducteurs**

Chapitre III

Etude des propriétés optoélectroniques et diélectriques des semiconducteurs

III.1. Les propriétés électroniques et optiques:

III.1.1. Introduction:

L'électron joue des différents rôles dans la structure des matériaux solides. La connaissance de ces rôles permettez nous de comprendre les propriétés électroniques de ces derniers. On a essayé dans la première partie de ce chapitre de connaître le comportement des électrons et expliquer les interactions entre la lumière et la matière tels que la polarisation, l'absorption, la réflexion ou l'émission de la lumière par certains solides, ainsi que la transparence des certains solides à la lumière et d'autres phénomènes optiques qu'ils sont très importants pour la compréhension de la structure électronique et atomique d'un matériau [69].

Pour connaître comment la lumière réagit avec la matière, nous faisons un rappel pour décrire cette lumière électromagnétique.

III.1.2. Polarisation et l'indice de réfraction d'un milieu:

Sous l'excitation d'un champ électrique, la matière se polarise. Quelque soit ce champ est statique ou oscillant. La polarisation induite \vec{p} par le champ \vec{E} à l'échelle microscopique et pour une entité de symétrie sphérique, est donnée par la relation suivante [70]:

$$\vec{p} = \alpha \cdot \vec{E} \quad (\text{III-1})$$

Avec α est la polarisation microscopique.

Cette formule traduit le déplacement des deux types de charges (positives et négatives) en sens inverse d'un atome ou d'une molécule de symétrie sphérique sous l'action d'un champ électrique qu'il entraîne à apparaître d'un moment dipolaire induit.

Dans le cas d'un grand nombre de molécules constituant un milieu condensé, cette dernière est décrit comme une distribution volumique d'entités microscopiques. La polarisation de ce milieu est donnée par:

$$\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i \quad (\text{III-2})$$

Ainsi, à l'échelle macroscopique, la polarisation induite dans un milieu traversé par une onde est définie comme:

$$\vec{p} = \epsilon_0 \cdot \chi^{(1)} \vec{E} \quad (\text{III-3})$$

Avec

ϵ_0 : Permittivité du vide.

$\chi^{(1)}$: Susceptibilité diélectrique d'ordre (1).

\rightarrow

E : Champ électrique.

L'induction électrique d'un milieu reliée au champ électrique, également appelée vecteur de

déplacement est noté par \vec{D} , il est donné par la relation:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (\text{III-4})$$

Soit
$$\vec{D} = \epsilon_0 \cdot \vec{E} + \epsilon_0 \cdot \chi^{(1)} \cdot \vec{E}$$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \cdot (1 + \chi^{(1)}) \cdot \vec{E}$$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r \cdot \vec{E} = \epsilon \cdot \vec{E} \quad (\text{III-5})$$

Où ϵ_r représente la permittivité diélectrique relative et ϵ représente la permittivité diélectrique absolue du milieu.

Avec
$$\epsilon_r = (1 + \chi^{(1)}) \quad \text{et} \quad \epsilon = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r \quad (\text{III-6})$$

L'indice de réfraction n d'un milieu représente le rapport entre la vitesse de la propagation de l'onde lumineuse dans ce milieu et la célérité de la lumière dans le vide. La composition chimique et les propriétés intrinsèques du matériau influencent sur la vitesse de la lumière dans ce dernier et par conséquent sur l'indice de réfraction. Pour un milieu transparent, on peut écrire et relier ce dernier aux paramètres précédents [71] avec la relation suivante:

$$n^2 = (1 + \chi^{(1)}) = \epsilon_r \quad \text{donc} \quad n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (\text{III-7})$$

La dernière formule révèle la relation implicite entre le battement temporel de l'onde et sa propagation dans l'espace.

III.1.3. Propagation des ondes dans la matière:

Comme l'air nous entoure, Le champ électromagnétique nous entoure en permanence. Ce dernier est créé par la circulation d'un courant électrique qui est créé à son tour par la présence des particules chargées positivement et négativement tels que les électrons et les protons. Une propagation d'une onde électromagnétique est créée par une simple perturbation de ce champ électromagnétique (oscillation d'un champ électrique et champ magnétique sur des plans perpendiculaires) (figure III-1). La lumière visible, comme les autres rayonnements (rayons X, Infrarouge, rayons γ , etc.), est une onde électromagnétique. Les ondes électromagnétiques sont

extrêmement utiles dans notre vie de tous les jours parce qu'elles couvrent un grand nombre de phénomènes [70].

Cette onde est caractérisée par deux paramètres: sa fréquence ν et sa longueur d'onde λ . Cette dernière est le rapport de la vitesse de la lumière dans le vide sur leur fréquence d'oscillation:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad (\text{III-8})$$

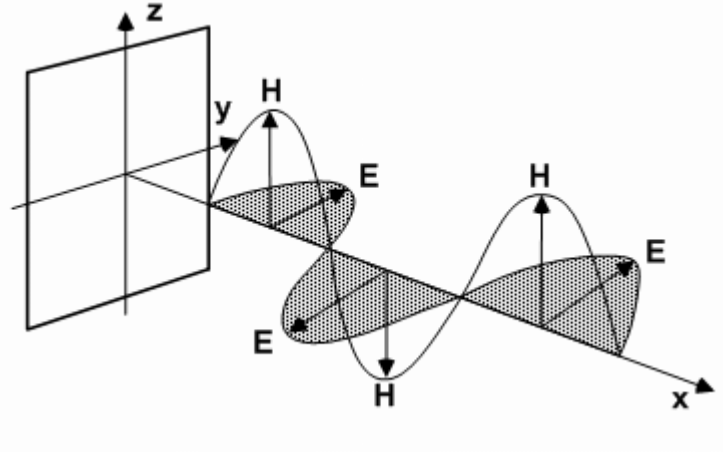


Figure III-1: L'onde électromagnétique.

On donne l'expression de l'amplitude du champ électrique associé à une onde lumineuse plane propageant dans un milieu d'indice n , comme suit [70]:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (\text{III-9})$$

Avec

E_0 : L'amplitude du champ.

ω : Pulsation du champ ($\omega = 2\pi\nu$).

t : Temp.

$\vec{}$

k : Vecteur d'onde.

$\vec{}$

r : Coordonnée spatiale.

Dans un milieu isotrope, le champ \vec{E} est toujours perpendiculaire au vecteur d'onde \vec{k} car ce dernier définit la direction de propagation de l'onde lumineuse. Par exemple, dans un repère orthonormé (O, x, y, z) , si l'onde se propage selon (oz) , le vecteur d'onde est colinéaire à (oz) et le champ pourra s'exprimer en fonction de (ox) et (oy) [70].

Dans le cas d'une onde naturelle, le champ électrique est statistiquement distribué sur le front d'onde perpendiculaire au vecteur d'onde car la polarisation correspond à la direction et à l'amplitude du champ. Donc la polarisation d'une onde correspond à donner une direction définie

d'oscillation du champ électrique [70]. La différence de phase entre les composantes perpendiculaire et parallèle donnent trois types différents de polarisation (figure III-2):

- Si la composante perpendiculaire est en phase avec la composante parallèle, et \vec{E} reste toujours dans un même plan, formé par lui-même, cette polarisation s'appelle la polarisation linéaire.
- Pour une amplitude maximale de \vec{E} d'une onde et le vecteur d'onde \vec{k} est nul pour l'autre onde, c'est-à-dire les deux composantes ont un décalage de phase d'un quart de période, où le champ résultant reste constant mais tourne autour de son axe en formant un cercle, c'est le cas d'une polarisation circulaire.
- Si le champ tourne autour de son axe et change d'amplitude pour former une ellipse, où les deux composantes ont un déphasage quelconque, on appelle cette polarisation par la polarisation elliptique.

On parlera de polarisation gauche ou droite selon le sens de rotation du champ, pour les polarisations circulaire ou elliptique.

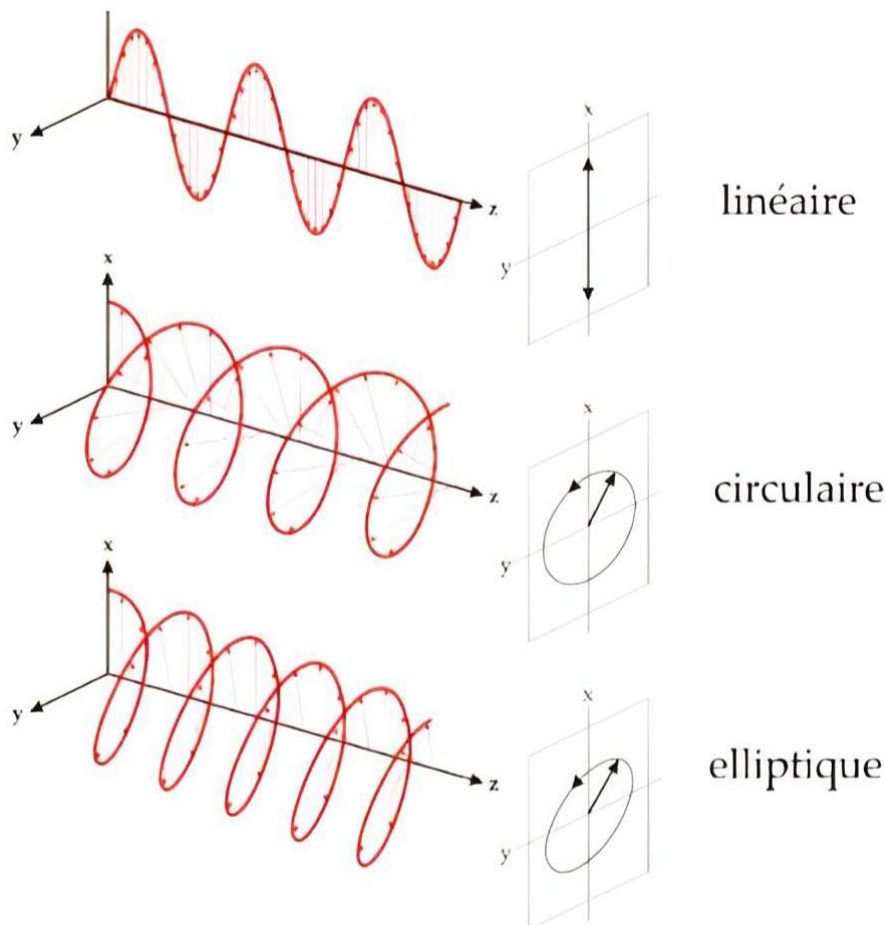


Figure III-2: la polarisation de la lumière.

III.1.4. Le spectre électromagnétique:

Les ondes électromagnétiques sont des rayonnements de la même nature mais se manipulent très différemment les uns des autres, et à ce raison elles portent des noms différents. Ces ondes sont illustrées dans la figure III-3 [72]:

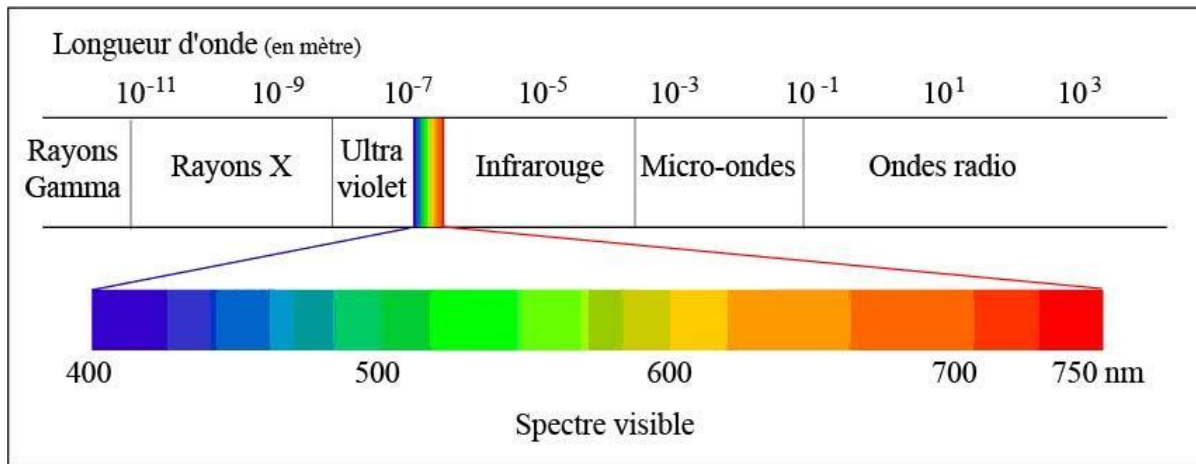


Figure III-3: Le spectre électromagnétique - Couleurs du spectre visible et longueur d'onde correspondante.

Chaque type de ces ondes est caractérisé par une gamme de fréquence différente à l'autre, en partant de ceux qui ont des longueurs d'onde les plus courtes. L'ensemble de ces ondes constitue ce qu'on appelle «spectre électromagnétique» [72].

D'après la figure précédente, la partie du spectre électromagnétique qui est visible pour l'œil humain s'appelle «la lumière visible» ou «le spectre optique» qui correspond aux longueurs d'onde situées entre plus de 400 nm et moins de 750 nm. Ce spectre n'y a aucune limite exacte, il est bien continu; on peut dire qu'il n'y a pas de frontière entre une couleur visible et la suivante [73].

III.1.5. Le photon:

La lumière n'est pas seulement une onde électromagnétique, en fait, elle est composée de particules appelées photon ou « quanta de lumière ». Dans le vide, le photon a les propriétés d'une onde et celles d'une particule. L'énergie du photon est donnée par la formule:

$$E = h \nu = \frac{h}{T} = \hbar \omega \quad (\text{III-10})$$

Où

h : La constante de Planck, et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

ω : La pulsation.

ν : La fréquence d'onde.

T : La période.

On peut écrire l'énergie du photon d'une autre manière:

$$E(\text{eV}) = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.24}{\lambda} \quad (\text{III-11})$$

Dans le cas d'une interaction rayonnement – matière, cette énergie va être échangée. Chaque photon a une longueur d'onde précise donc une couleur bien définie. Comme le photon est à son longueur d'onde, il est lié aussi à son énergie d'où le photon est bleu plus il transporte de l'énergie, plus il est rouge moins il l'en transporte.

Il est clair que la couleur du photon émis par l'électron dépend de la différence entre les niveaux d'énergie de leur structure de bandes.

III.1.6. L'interaction rayonnement- matière:

Le comportement corpusculaire du rayonnement est mieux adapté dans les semiconducteurs optoélectroniques. Le rayonnement interagit avec les atomes des semiconducteurs et plus particulièrement avec les électrons, il peut être absorbé, réfléchi, dévié ou émis par l'électron [42].

III.1.6.1. L'absorption de la lumière:

Un électron d'un état occupé de la bande de valence d'énergie E_1 , peut être quitté son état vers un état libre de la bande de conduction d'énergie E_2 appelé aussi état excité, par l'incitation d'un photon avec une énergie $E = h\nu = E_2 - E_1$. Ce phénomène s'appelle l'absorption fondamentale. Ce principe est utilisé dans les capteurs de rayonnement. Cette dernière est schématisée dans la figure III-4.

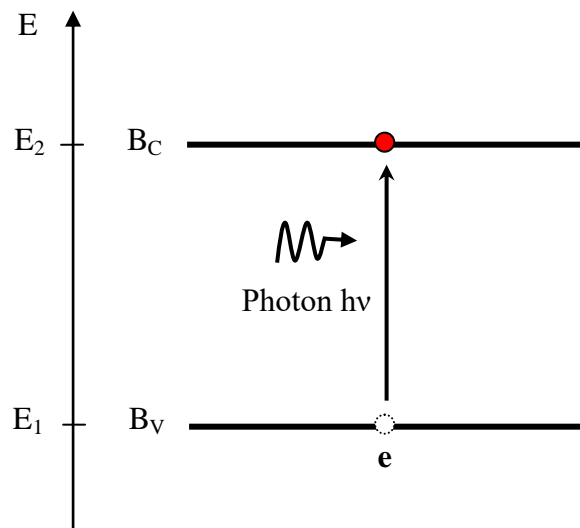


Figure III-4: L'absorption fondamentale de la lumière.

III.1.6.2. L'émission spontanée:

Dans le cas d'un état excité instable, l'électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence pour revenir à son état d'équilibre avec émission d'un photon d'énergie $h\nu$. C'est l'émission spontanée. Ce principe est utilisé dans le fonctionnement des émetteurs de rayonnement et les diodes électroluminescentes. Cette dernière est présentée dans la figure III-5.

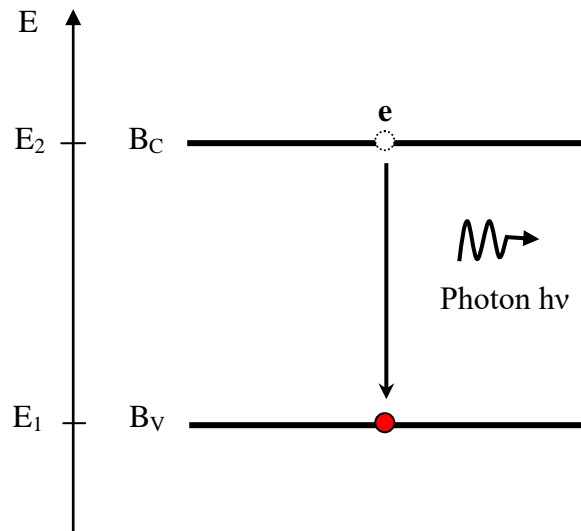


Figure III-5: L'émission spontanée.

III.1.6.3. L'émission stimulée:

Un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état libre de la bande de valence pour retourner à l'état d'équilibre avec émission d'un deuxième photon de même énergie, Ce phénomène s'appelle l'émission stimulée. Les lasers à semi conducteurs utilisent cette émission dans leurs fonctionnements. Ce principe schématisé dans la figure III-6 ci-dessous:

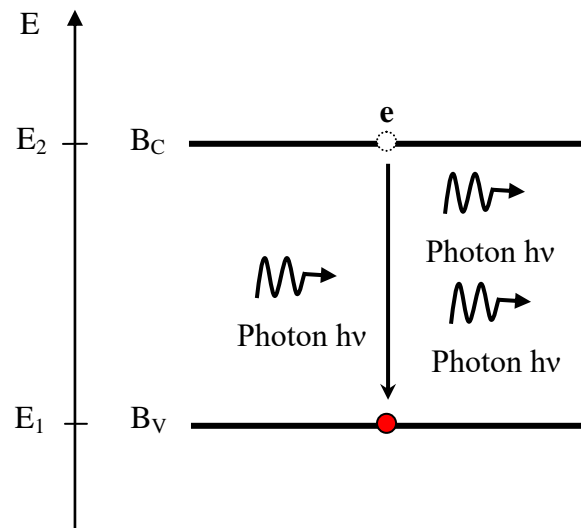


Figure III-6: L'émission stimulée.

Ces différents processus sont conditionnés par les deux règles: La conservation de l'énergie et la conservation de la quantité de mouvement, qui régissent les chocs élastiques entre l'électron et le photon. Ces deux règles décrites par les relations suivantes:

$$E = \frac{P^2}{2m} \tag{III-12}$$

Avec

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \tag{III-13}$$

→
Où \vec{k} est le vecteur d'onde.

Les règles de conservation s'écrivent comme suit:

$$\begin{aligned} E_f - E_i &= \pm E_p \\ \vec{k}_f - \vec{k}_i &= \pm \vec{k}_p \end{aligned} \quad \text{(III-14)}$$

Où i et f sont respectivement l'état initial et l'état final de l'électron, et par l'indice p l'état du photon, le signe $+$ correspond à l'absorption et le signe $-$ à l'émission.

Le vecteur d'onde d'un photon est négligeable devant celui de l'électron, il l'en résulte une

conservation du vecteur d'onde \vec{k} , l'équation (III-14b) s'écrit tout simplement:

$$\vec{k}_f \approx \vec{k}_i \quad \text{(III-15)}$$

L'absorption ou l'émission d'un photon se fait d'après la transition d'un électron, donc on dit que les transitions sont radiatives. C'est la raison pour la quelle les phénomènes d'absorption ou d'émission d'un photon au voisinage du gap fondamental sont importants dans les matériaux à gap direct que dans ceux à gap indirect [42].

III.1.7. Les transitions directes et indirectes:

Les transitions à travers la bande interdite appelée gap. Notamment les recombinaisons électron-trou sont des transitions régies en mécanique quantique, par les règles de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Dans un semiconducteur, on s'intéresse aux ces transitions.

Il est important d'avoir en esprit la relation énergie - longueur d'onde dans l'étude des composants pour traduire en (eV) la caractéristique d'un rayonnement définie en μm optoélectroniques [42].

Si la valeur $\frac{1.24}{\lambda} > E_g$ (eV), le photon a alors une énergie suffisante pour exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction, le cristal semiconducteur sera donc transparent. Il devient opaque lorsque $\frac{1.24}{\lambda} < E_g$ (eV).

La transition de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence (Transition à gap indirect) fait intervenir deux quanta: Emission d'un photon d'énergie $h\nu > E_g$ du vecteur d'onde négligeable. Et émission (ou absorption) d'un phonon a un grand vecteur d'onde et une variation d'énergie faible. Le phonon est un quanta de vibration du réseau cristallin dû à l'échange d'énergie absorbée lors d'une génération électron- trou, ou dissipée lors d'une recombinaison. En d'autre terme, c'est l'énergie échangée sous forme de chaleur. On a à faire à une transition de type indirect de faible probabilité vue qu'elle nécessite l'intervention simultanée de deux quanta. Dans le second cas (gap direct), le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se

trouve au même vecteur d'onde, la recombinaison ne fait intervenir qu'un seul photon et la transition est dite directe, elle est par contre très probable [74].

La figure III-7 représente quelques semiconducteurs à gap direct et à gap indirect et leurs spectres d'émission correspondants.

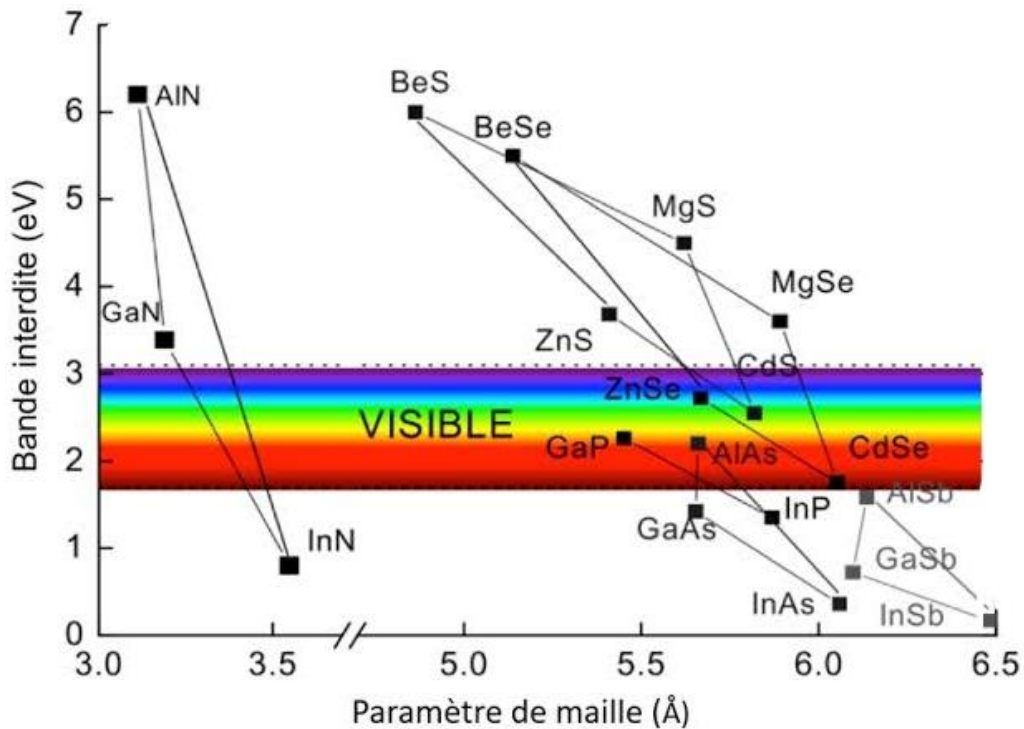


Figure III-7: Gaps des semiconducteurs en fonction du paramètre de maille [74].

III.1.8. Calcul de l'indice de réfraction:

Pour connaître la possibilité d'un matériau de ralentir et de dévier la lumière il faut étudier son indice de réfraction. L'étude de ce paramètre est nécessaire pour l'optimisation des composants optoélectroniques tels que les diodes lasers à hétérojonction, les amplificateurs optiques et les fibres optiques...etc [76].

En effet, il existe plusieurs modèles pour calculer l'indice de réfraction pour un grand ensemble de semiconducteurs tels que les relations empiriques reliant l'indice de réfraction au gap énergétique [77]. Parmi les modèles:

❖ Le modèle de Moss:

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

$$E_g n^4 = k \quad \text{Donc} \quad n = \sqrt[4]{\frac{k}{E_g}} \quad (\text{III-16})$$

Avec

E_g : est le gap d'énergie.

k : Une constante égale à 108 eV.

n : L'indice de réfraction.

❖ **Le modèle de Ravindra et ses collaborateurs:**

Ravindra et ses collaborateurs donnent une formule linéaire entre n et E_g donnée par [78]:

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-17})$$

Où $\alpha = 4,084$ et $\beta = 3,4 \text{eV}^{-1}$

❖ **Le modèle de Herve et Vandamme:**

Herve et Vandamme proposeront un modèle basé sur la théorie des oscillations classiques

Pour $\omega \ll \omega_o$ [77]:

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{III-18})$$

Avec $A = 13,6 \text{ eV}$.

$B = 3,4 \text{ eV}$.

ω_o : La fréquence de résonance ultraviolette.

Dans nos calculs nous avons adopté le modèle de Moss.

III.2. Etude des propriétés diélectriques:

III.2.1. La constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞ et statique ϵ_0 :

La permittivité électrique ou bien la constante diélectrique est importante pour l'étude des propriétés physiques du solide parce que ce paramètre décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique. La constante diélectrique intervient particulièrement dans l'optique tels que l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière. Elle est une fonction de la fréquence et du vecteur

\vec{k} d'onde k où pour les petites valeurs de ce dernier on parlera sur la constante diélectrique statique ϵ_0 ou constante diélectrique optique. Cette dernière dépend de la constante diélectrique ϵ_∞ correspondant à sa limite pour les hautes fréquences. Elle dépend aussi de l'équilibre thermodynamique et intervient dans la contribution du cortège électronique des ions [29].

III.2.2. La constante diélectrique complexe:

Pour la plupart des phénomènes optiques, la longueur d'onde du rayonnement est grande par rapport aux dimensions du système et par conséquent le vecteur d'onde \vec{k} du rayonnement est très petit et peut être considéré comme nul dans tous les domaines du spectre électromagnétique. Alors, la fonction diélectrique prend une forme complexe [29, 54]:

$$\epsilon = \epsilon'(\omega) + i \epsilon''(\omega) \quad (\text{III-19})$$

On peut déterminer la fonction diélectrique complexe par la mesure du coefficient de réflexion $R(\omega)$, de l'indice de réfraction $n(\omega)$ et du coefficient d'extinction $k(\omega)$ (coefficient d'absorption) car elle ne peut pas être obtenue expérimentalement [29].

III.2.3. La réflexion optique:

Les mesures du coefficient de réflexion de la lumière $R(\omega)$ à la surface du cristal sous incidence normale donnent l'information complète sur les systèmes électroniques. Ce coefficient est le rapport du champ électrique réfléchi au champ électrique incident, il est exprimé sous forme complexe par la formule suivante [29]:

$$R(\omega) = \frac{E(\text{ref})}{E(\text{inc})} = \rho(\omega) e^{i\theta(\omega)} \quad (\text{III-20})$$

$\theta(\omega)$ et $\rho(\omega)$ sont la phase et l'amplitude du coefficient de réflexion respectivement.

III.2.4. L'indice de réfraction et le coefficient d'absorption:

Le coefficient de réflexion $R(\omega)$ sous incidence normale dépend de l'indice de réfraction $n(\omega)$ et le coefficient d'extinction $k(\omega)$, donc on peut les s'écrire dans une seule relation [29]:

$$R(\omega) = \frac{n + ik - 1}{n + ik + 1} \quad (\text{III-21})$$

III.2.5. L'indice de réfraction et la constante diélectrique:

On sait que la constante diélectrique ε prend la forme complexe mais peut être réduite à un scalaire si le milieu est isotrope ou dans le cas d'un cristal cubique. L'indice de réfraction à son forme complexe, peut décrire la réponse d'un système à une onde électromagnétique plane [29]:

$$N(\omega) = n(\omega) + i k(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} \quad (\text{III-22})$$

Avec $n(\omega)$ représente l'indice normal du cristal dans une région de transparence et $k(\omega)$ représente l'absorption optique du cristal. Ces deux coefficients seront calculés à partir de la relation précédente (III-21) pour des valeurs expérimentales du coefficient de réflexion $R(\omega)$. D'autre part, la constante diélectrique sera déduite de l'équation (III-22). Sa forme complexe finale donnée par [29 54, 79]:

$$\varepsilon = \varepsilon_1(\omega) + i \varepsilon_2(\omega) \quad (\text{III-23})$$

Où

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 \quad (\text{III-24})$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2 n k \quad (\text{III-25})$$

On peut conclure que la fonction diélectrique $\varepsilon_2(\omega)$ qui représente la partie imaginaire dans la formule (III-23) est dépend des phénomènes d'émission ou d'absorption du champ électromagnétique par le matériau. Alors les coefficients n et k sont reliés par des relations de dispersion où on peut déterminer l'un de ces coefficients à partir de la connaissance de l'autre [29].

III.2.6. Calcul des constantes diélectriques:

III.2.6.1. Calcul de la constante diélectrique à haute fréquence:

Pour le modèle précédent de Moss (la relation (III-16)), on considère que la constante diélectrique à haute fréquence est calculée pour les diverses concentrations de Béryllium comprises dans l'intervalle [0–1] de l'alliage semiconducteur ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en utilisant la relation suivante:

$$\varepsilon_{\infty} = n^2 \quad (\text{III-26})$$

L'indice de réfraction n est fortement lié avec le gap d'énergie E_g en donnant le fait que ε_{∞} dépend de n . Les relations proposées par Adachi de la variation de ε_{∞} avec le gap d'énergie fondamental E_g sont [80]:

$$\varepsilon_{\infty} = 10,3804 - 1,3803E_g \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-27})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 11,26 - 1,42E_g \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-28})$$

III.2.6.2. Calcul de la constante diélectrique statique:

Le modèle de **Harisson** «bond-orbital model» est utilisé pour investir la dépendance en composition de la constante diélectrique statique (ε_0) donnée par [81, 82]:

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_{\infty} + 1} = 1 + \vartheta \quad (\text{III-29})$$

Avec ϑ est donné par:

$$\vartheta = \frac{\alpha_p^2 (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{III-30})$$

α_p est la polarité, qui est déterminée en utilisant la définition de Vogl:

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III-31})$$

$V_A(3)$ et $V_S(3)$ sont respectivement les facteurs de forme antisymétrique et symétrique.

α_c représente la covalence du matériau définie en fonction de la polarité par:

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{III-32})$$

La constante diélectrique à haute fréquence ε_{∞} est fortement liée avec le gap d'énergie E_g en donnant le fait que ε_0 dépend de ε_{∞} . Les relations proposées par Adachi de la variation de ε_0 avec le gap d'énergie fondamental E_g sont [80]:

$$\varepsilon_0 = 16,6122 - 2,9939E_g \quad (\text{VCA}) \quad (\text{III-33})$$

$$\varepsilon_0 = 18,52 - 3,08E_g \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{III-34})$$

Chapitre IV

**Etude des propriétés
mécaniques des
semiconducteurs**

Chapitre IV

Etude des propriétés mécaniques des semiconducteurs

IV.1. Introduction:

Les matériaux sont souvent soumis à des forces lorsqu'ils sont utilisés. Les spécialistes en matériaux calculent ces forces expliquent comment les matériaux se déforment (allongement, compression, torsion) ou se cassent en fonction de la force appliquée, du temps, de la température et d'autres conditions, Les spécialistes des matériaux découvrent ces propriétés mécaniques en testant les matériaux. Les résultats des essais dépendent de la taille et de la forme du matériau à tester, de la manière dont il est maintenu et de la façon dont l'essai est réalisé. Dans ce chapitre, on a fait un rappel sur les propriétés mécaniques et les approches qu'elles sont envisagées pour calculer les constantes mécaniques des matériaux semiconducteurs.

IV.2. Domaine élastique:

IV.2.1. Contrainte et Déformation:

La contrainte σ et la déformation ε nous permettent de décrire l'évolution d'un matériau soumis à une sollicitation quelconque (figure IV-1). Le comportement élastique qu'il est lié les contraintes et les déformations linéairement s'appelle le comportement élastique linéaire, son modèle est le plus simple et limité aux petites déformations pour son applicabilité au matériau réel [83-85].

On définit l'intensité de la contrainte subite par un solide est comme le rapport entre la force F qu'on applique sur ce solide et la surface d'application S :

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (\text{IV-1})$$

D'autre part, la déformation est le rapport de la longueur déformée sur la longueur initiale.

On peut écrire cette relation sous forme d'une notation tensorielle:

$$\sigma_{ij} = A_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{soit} \quad \overline{\sigma} = \overline{A} \overline{\varepsilon} \quad (\text{IV-2})$$

$$\varepsilon_{ij} = \Lambda_{ijkl} \sigma_{kl} \quad \text{soit} \quad \overline{\varepsilon} = \overline{\Lambda} \overline{\sigma} \quad (\text{IV-3})$$

Où la grandeur A représente le tenseur de rigidité et Λ est le tenseur de complaisance.

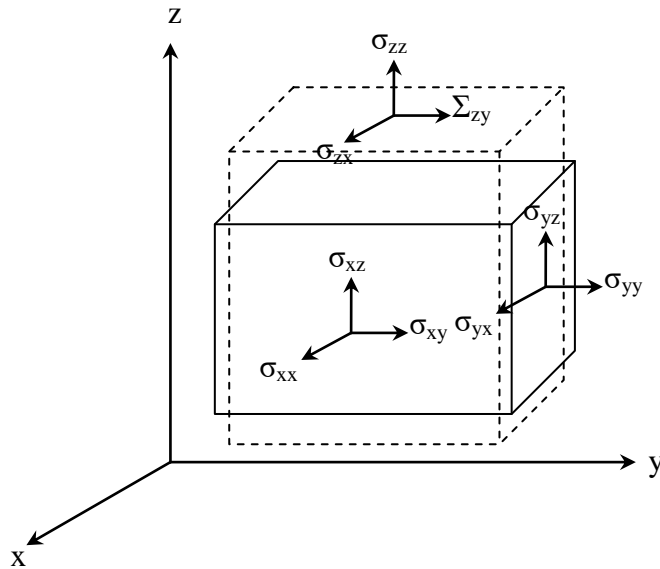


Figure IV-1: La déformation d'un solide mis sous contrainte.

IV.2.2. Isotropie et Anisotropie:

L'élasticité linéaire impose deux hypothèses: La première hypothèse c'est que les tenseurs des contraintes et des déformations soient symétriques par exemple:

$$A_{ijkl} = A_{klij} \tag{IV-4}$$

Et la deuxième hypothèse (hypothèse de stabilité) c'est que les tenseurs de rigidité et de complaisance doivent être définis positifs, c'est-à-dire il faut fournir un travail positif pour déformer le matériau. Pour A, il vient alors [85]:

$$A_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \geq \alpha \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \tag{IV-5}$$

Où $\alpha > 0$.

Le tenseur d'élasticité qui caractérise complètement le matériau, dépend de 21 coefficients. L'utilisation des propriétés d'isotropie ou d'anisotropie du matériau peut réduire ce nombre de coefficients. Dans le cas d'un matériau isotrope, la représentation du tenseur de rigidité est indépendante du repère choisi. Par contre, si on utilise un matériau anisotrope, ce dernier est déformé selon des directions privilégiées.

Dans le cas anisotrope, la matrice de rigidité dans la base constituée de ses directions principales est:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} F & B & E & 0 & 0 & 0 \\ B & F & E & 0 & 0 & 0 \\ E & E & D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & F-B \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix} \tag{IV-6}$$

Les cinq coefficients restants sont pour définir la rigidité d'un matériau. Ce nombre des coefficients est réduit dans le cas e l'isotropie, on peut écrire la matrice de rigidité sous la forme:

$$A_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \tag{IV-7}$$

Donc on peut écrire la loi de comportement suivants les composantes de l'espace comme suit:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \tag{IV-8}$$

Alors la matrice de rigidité prend la forme:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{ij} - \frac{\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} \sigma_{kk} \delta_{ij} \tag{IV-9}$$

Avec λ et μ représentent les coefficients de Lamé.

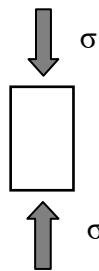
Il faut envisager quelques états de déformations et de contraintes particuliers pour dégager la signification de ces coefficients.

IV.2.3. Exemples de lois élastiques linéaires:

IV.2.3.1. Compression hydrostatique:

On a

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \sigma \delta_{ij} \\ \varepsilon_{ij} &= \varepsilon \delta_{ij} \end{aligned} \tag{IV-10}$$



Par substitution de cette relation dans la formule (IV-9), on trouve:

$$\sigma = (3\lambda + 2\mu)\varepsilon = 3B\varepsilon \tag{IV-11}$$

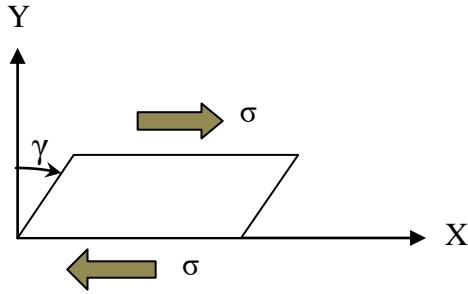
Le paramètre B est appelé le module de compression du matériau.

IV.2.3.2. Glissement simple uniaxial:

On a

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma}{2} & 0 \\ \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{IV-12}$$

Pour une déformation γ suivant X perpendiculairement à Y.



Alors
$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \mu\gamma & 0 \\ \mu\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{IV-13}$$

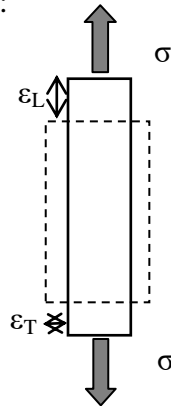
On remplace le symbole μ par G et appelé module de cisaillement ou module de coulomb.

IV.2.3.3. Traction simple uniaxiale:

N'importe quel paramètre peut être s'écrire sous forme d'une matrice comme:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{IV-14}$$

Pour une contrainte appliquée suivant X:



Il vient donc:
$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_L & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_T & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_T \end{pmatrix} \tag{IV-15}$$

Avec

$$\epsilon_L = \frac{\lambda + \mu}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \sigma = \frac{\sigma}{Y} \tag{IV-16}$$

$$\epsilon_T = -\frac{\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} \sigma = -\nu \epsilon_L \tag{IV-17}$$

On s'appelle les paramètres Y et ν respectivement le module d'Young et le coefficient de poisson.

En résumé:

- La loi de comportement $\sigma = Y\epsilon$ est appelée loi de Hooke.

- On peut écrire les coefficients de Lamé λ et μ et le module de compression B en fonction de module d'Young Y et le coefficient de poisson ν .

On a

$$Y = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \quad (\text{IV-18})$$

$$\mu = G = \frac{Y}{2(1 + \nu)} \quad \lambda = \frac{\nu Y}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)} \quad 3B = \frac{Y}{(1 - 2\nu)} \quad (\text{IV-19})$$

Pour les petites déformations, La loi du comportement d'élasticité linéaire isotrope s'écrit sous la forme:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1 + \nu}{Y} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{Y} \sigma_{kk} \delta_{ij} \quad (\text{IV-20})$$

IV.2.4. Limite élastique:

Pour les matériaux ont un comportement élastoplastique, le modèle de comportement d'élasticité est utilisable, la déformation est temporaire et le matériau peut retourner à son état initial si on ne dépasse pas le seuil d'élasticité. Au delà de ce seuil, la déformation sera rémanente et le matériau aura un comportement plastique.

Le critère de limite d'élasticité dans le cas unidimensionnel s'écrit par:

$$|\sigma| < \sigma_e \quad (\text{IV-21})$$

Avec σ_e représente la limite d'élasticité en traction simple.

On note par f le seuil d'élasticité. Dans le cas général, cette dernière peut être définie par une fonction réelle nommée fonction seuil. Elle limite la région élastique dans l'espace des contraintes, où dans cette région doit rester le point représentatif des contraintes de coordonnées principales $(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)$:

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) < 0 \quad (\text{IV-22})$$

Que soit la pression hydrostatique appliquée sur un métal, Le seuil d'élasticité f de ce dernier est fort, donc la déformation reste élastique. Alors l'une des trois directions principales des contraintes qui n'intervient pas dans la définition de la limite élastique. Et par conséquent la fonction seuil devient un cylindre dans l'espace des contraintes avec des coordonnées $\left(\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ de l'axe hydrostatique.

IV.2.5. Critère de Tresca et von Mises:

Le seuil élastique a deux critères: le critère de **Tresca** et le critère de **Von Mises**. La contrainte effectuée dans le plan principal $(\sigma_1 \sigma_2)$ est considérée comme la présentation la plus simple. La figure IV-2 illustre cette présentation:

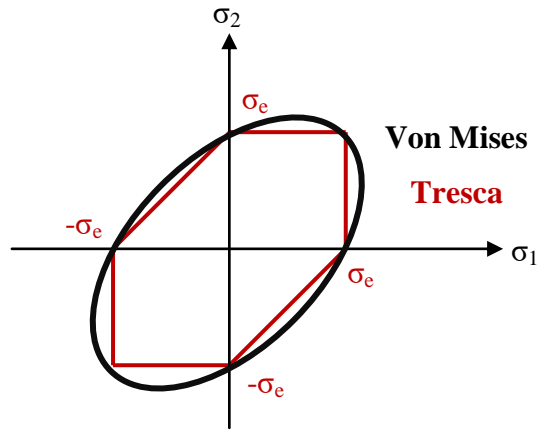


Figure IV-2: Critères de limites élastiques dans le plan principal.

On nomme aussi par le plan déviateur, le plan normal à l'axe hydrostatique. La représentation dans ce plan est illustrée par la figure IV-3.

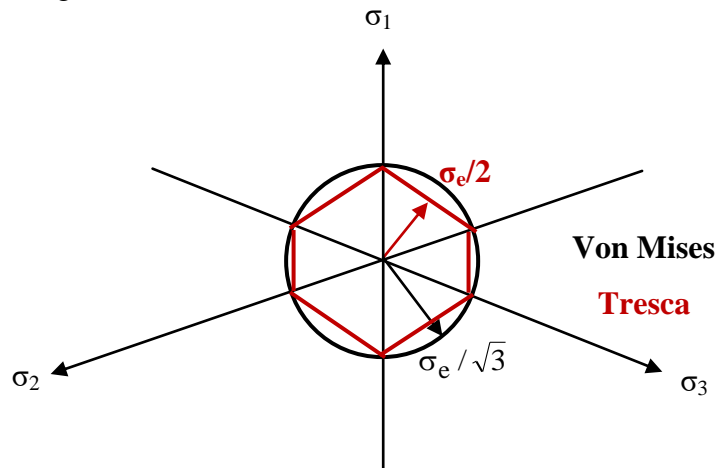


Figure IV-3: Critères de limites élastiques dans le plan déviateur.

Le critère de Von Mises correspond donc à une fonction seuil qui est représentée par un cylindre à base circulaire. Ce critère correspond aussi à un critère de type norme distance tel que:

$$f(\|\sigma\|) < \sqrt{\sum \frac{(\sigma_i - \sigma_j)^2}{3}} = \frac{\sigma_e}{\sqrt{3}} \tag{IV-23}$$

Par contre, Le critère de Tresca correspond à un cylindre à base hexagonale dans le plan déviateur. Ce critère correspond aussi à un critère de type norme supérieure:

$$f(\|\sigma\|) < \sup(\sigma_i - \sigma_j) = \frac{\sigma_e}{2} \tag{IV-24}$$

Le matériau se comporte comme un matériau plastique quand la contrainte dépasse ce seuil, donc pour le décrire, il faut utiliser d'autres lois de comportement que la loi élastique.

IV.2.6 .Grandeurs mécaniques:

Dans les essais mécaniques de dynamiques classiques, on utilise une formulation le plus souvent sinusoïdale qu'elle est la sollicitation. On détecte la réponse du matériau par le calcul de la fonction de transfert liée au matériau. Si la sollicitation est une sollicitation de contrainte de

cisaillement par exemple (figure IV-4), on définira $\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t}$ et la réponse en déformation $\gamma = \gamma_0 e^{i(\omega t - \delta)}$ avec δ angle de perte [83-85]:

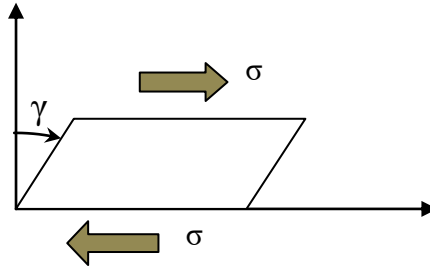


Figure IV-4: Solide sollicité en cisaillement par la contrainte σ - La déformation γ qui en résulte est associée à l'angle de déformation.

Les deux grandeurs complexes précédents σ et γ sont définis comme suit:

$\sigma = G^* \gamma$ où G^* est le module complexe de cisaillement.

$\gamma = J^* \sigma$ où J^* est le module complexe de complaisance.

Chaque module complexe s'écrit sous la forme:

$$G^* = G' + iG'' \quad , \quad J^* = J' - iJ'' \quad (IV-25)$$

Avec

G' est la partie réelle qui est en phase avec la sollicitation, elle s'appelle le module de restitution et G'' est la partie imaginaire qui est en quadrature de phase avec la sollicitation, elle s'appelle le module de perte ou de dissipation.

J' est la partie réelle qui est en phase avec la sollicitation, elle s'appelle la complaisance de restitution et J'' est la partie imaginaire qui est en quadrature de phase avec la sollicitation, elle s'appelle la complaisance de perte.

On peut définir G en fonction de module de Young Y , donc ce dernier peut l'on écrire sous une forme complexe:

$$Y^* = Y' + iY'' \quad (IV-26)$$

Avec Y' est le module de restitution en compression, égal à:

$$Y' = 2(1 + \nu)G' \quad (IV-27)$$

Y'' est le module de perte en compression, égal à:

$$Y'' = 2(1 + \nu)G'' \quad (IV-28)$$

Enfin, on écrit l'angle de perte:

$$\tan(\delta) = \frac{G''}{G'} = \frac{J''}{J'} \quad (IV-29)$$

IV.3. Domaine plastique:

Le comportement plastique correspond une déformation irréversible au cours d'un essai mécanique. La frontière entre une déformation réversible et une déformation irréversible s'appelle la limite élastique, cette limite s'appelle aussi seuil d'élasticité ou seuil de plasticité.

IV.3.1. Plasticité parfaite:

Si une fois la limite élastique atteinte, la plasticité sera parfaite. Dans ce cas, quelle que soit la déformation, le matériau se comportera comme ayant toujours la même réponse en contrainte (figure IV-5) [85, 88]:

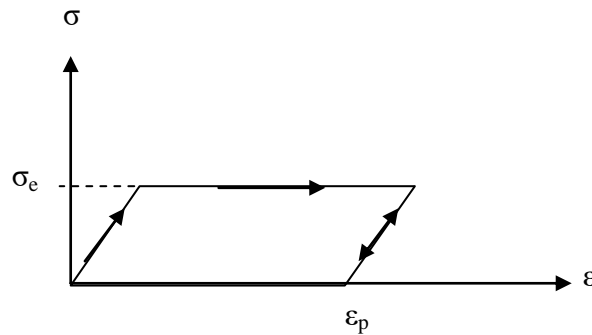


Figure IV-5: Courbe [Contrainte-Déformation] type d'un matériau élastique-parfaitement plastique.

IV.3.2. Plasticité avec écrouissage:

On parlera de plasticité avec écrouissage, Si il ya une augmentation de la contrainte avec l'augmentation de la déformation une fois le seuil de élasticité atteint. Donc la déformation se croissante et le matériau se «durcit» [85, 88]:

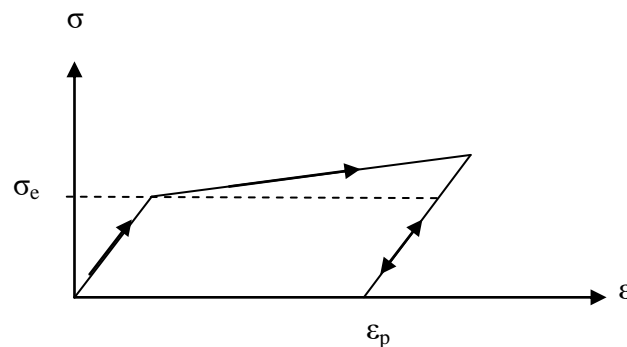


Figure IV-6: Courbe [Contrainte-Déformation] type d'un matériau élastique-plastique avec écrouissage.

IV.4. Domaine élastoplastique:

De façon plus générale, il est difficile de définir la limite d'élasticité car le comportement d'un matériau ne passe jamais d'une loi de comportement élastique à une loi de comportement plastique. On choisit alors, comme limite d'élasticité conventionnelle, la valeur de la contrainte relevée à 0.2% de déformation dans la courbe de traction. Le comportement obtenu dans la zone de transition après la zone élastique et avant la zone plastique s'appelle le comportement élastoplastique (figure IV-7) [84, 85].

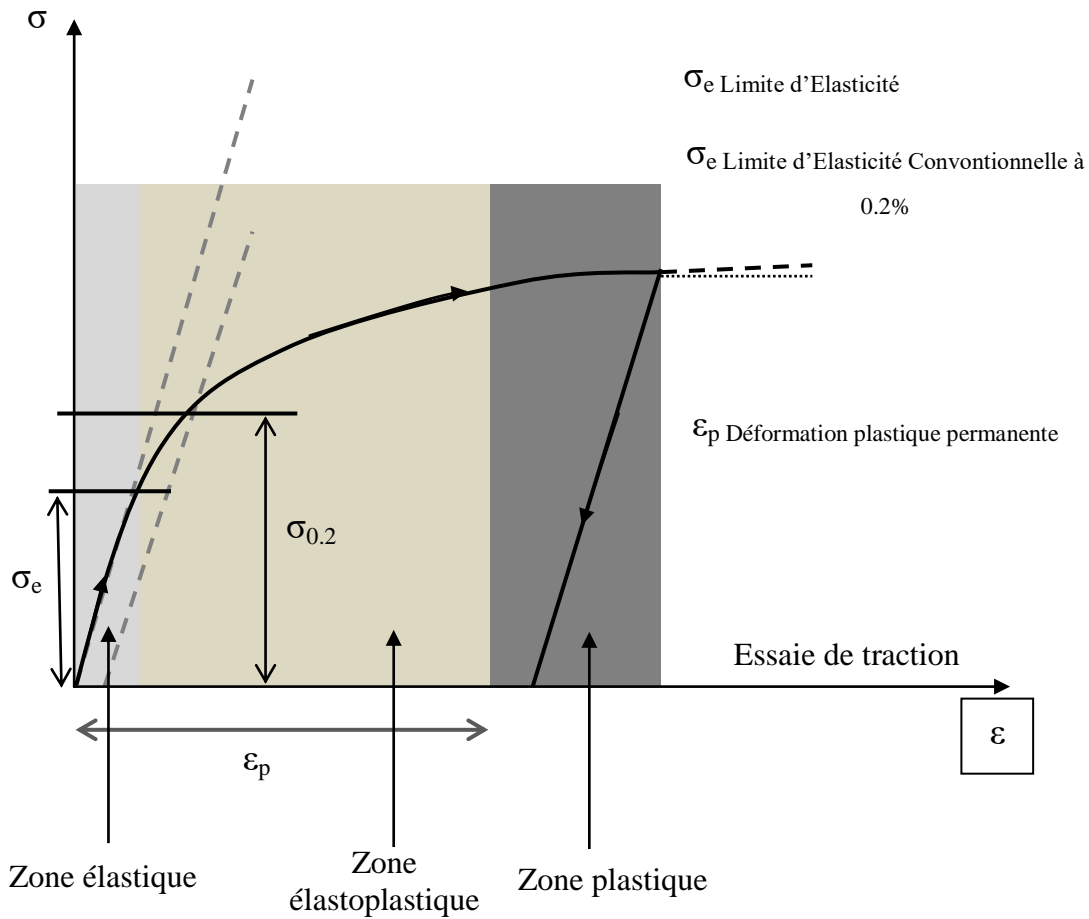


Figure IV-7: Courbe de Traction typique d'un matériau élastoplastique. Synoptique des différentes zones de comportement ainsi que des principales notations utilisées.

IV.5. Calcul des paramètres mécaniques:

IV.5.1. Les constantes élastiques:

La dépendance des constantes élastiques de la composition d'alliage x prend une importance particulière dans l'étude des propriétés mécaniques de l'alliage. Plusieurs approches ont été envisagées pour calculer les constantes élastiques des semiconducteurs.

Adachi a proposé des relations pour calculer les constantes élastiques, elles sont mentionnées dans les relations suivantes [79]:

$$C_{11} = B(1 + \alpha_C^2) \tag{IV-30}$$

$$C_{12} = C_{11}(0.469f_i + 0.313) \tag{IV-31}$$

Où B: représente le module de compressibilité.

f_i : est le facteur de l'ionicté.

La constante élastique C_{44} est obtenue avec le modèle de champ de force de valence [87].

$$C_{44} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{7C_{11} + 2C_{12}} \tag{IV-32}$$

IV.5.2. Module de compressibilité:

Le module de compressibilité B de semiconducteurs est d'un intérêt physique et aussi d'une importance pratique dans le calcul des constantes élastiques. Il est donné par la relation de Verma [88] comme suit:

$$B = CK^{0.75} \quad (IV-33)$$

Où C = 235 pour les éléments II-VI.

K: est la conductivité thermique est donnée par la relation suivante [89] :

$$K = \frac{S(Z_1 Z_2)^V}{d^5} \quad (IV-34)$$

Où S=2; v=1.5 pour les semiconducteurs de structure zinc blende.

$Z_1 Z_2 = 4$; pour les semiconducteurs II-VI.

$d = \frac{\sqrt{3}}{4} a$: est la distance entre les plus proches voisins (a est le paramètre du réseau).

IV.5.3. Le facteur de l'ionocité et les constantes des forces:

À partir de la distance entre les plus proches voisins d, on peut calculer le facteur de l'ionocité f_i et les constantes des forces d'élongation α et de recourbement β par les relations suivantes [89, 90]:

$$f_i = \frac{0.87891 d^{0.24}}{(Z_1 Z_2)^{0.4}} \quad (IV-35)$$

$$\alpha = \frac{A(Z_1 Z_2)^S}{d^3} \quad (IV-36)$$

$$\beta = \frac{V(Z_1 Z_2)^B}{d^3} \quad (IV-37)$$

Avec A = 410 et S = 0.2, V = 17.6 et B = 0.85.

IV.5.4. Le module de cisaillement, Young et coefficient de Poisson:

Le module de cisaillement G est lié au constantes élastiques C_{11} et C_{12} par la relation suivante:

$$G = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (IV-38)$$

Le module d'Young Y est une mesure de la rigidité d'un matériau donné. Il décrit l'élasticité à la traction ou la tendance d'un matériau à se déformer selon un axe lorsque des forces opposées sont appliquées le long de cet axe. Par conséquent, la connaissance de module d'Young est utile pour la prédiction de l'allongement ou la compression d'un matériau, tant que la contrainte est inférieure à la limite d'élasticité du matériau [91]. Il est aussi lié au constantes élastiques C_{11} et C_{12} comme suit:

$$Y = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{IV-39})$$

Le coefficient de Poisson ν permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué. Il est donné par:

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{IV-40})$$

IV.5.5. Le facteur d'anisotropie et Le paramètre de Kleinman:

Le paramètre Kleinman ξ (Internal-strain parameters), pour un système de blende, il décrit les positions relatives des cations et anions sous-réseaux sous le volume en conservant les distorsions de contrainte dans laquelle les positions ne sont pas fixées par symétrie. Le paramètre de déformation interne ξ est calculé en utilisant la relation suivante:

$$\xi = \frac{C_{11} + 8C_{12}}{7C_{11} + 2C_{12}} \quad (\text{IV-41})$$

On peut citer un autre paramètre liée aux constantes élastique C_{11} , C_{12} et C_{44} c'est le facteur d'anisotropie A exprimé par la relation:

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{IV-42})$$

Chapitre V

Résultats et discussions

Chapitre V

Résultats et discussions

V.1. Etude des propriétés électroniques:

La méthode du pseudo-potentiel empirique locale, couplée à l'approximation du cristal virtuel qui introduit l'effet du désordre compositionnel comme un potentiel effectif est utilisée pour étudier les propriétés électroniques, à savoir: le gap énergétique, la structure de bandes électroniques, le gap antisymétrique, la densité de charge électronique ainsi que leur variations en fonction de la concentration x de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

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

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) + V_{NL}(\mathbf{r}) \quad (\text{V-1})$$

Où

$V_L(\mathbf{r})$ et $V_{NL}(\mathbf{r})$ sont respectivement les parties locale et non locale.

Dans ce travail, on a pris en considération que la partie locale où la partie non locale est omise, donc la formule (V-1) prend la forme suivante:

$$V_p(\mathbf{r}) = V_L(\mathbf{r}) = \sum_G V(\mathbf{G})S(\mathbf{G})\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}) \quad (\text{V-2})$$

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

On détermine les paramètres du pseudo-potentiel empirique par la méthode non linéaire des moindres carrées [92-94], dans laquelle tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie calculés par la méthode des pseudo-potentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement ($\delta=10^{-10}$). Il est donné par [95, 96]:

$$\delta = \left[\sum_{i,j}^m \frac{(\Delta E_{i,j})^2}{m-N} \right]^{1/2} \quad (\text{V-3})$$

Où

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

E_{ij}^{exp} et E_{ij}^{cal} sont respectivement, les énergies mesurées et celles calculées entre le $i^{\text{ième}}$ état au vecteur d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i$ et le $j^{\text{ième}}$ état au vecteur d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_j$ dans les m paires choisis (i,j) , N étant le nombre des paramètres du pseudo-potentiel empirique.

Les valeurs du départ des facteurs de forme sont améliorées par itération jusqu'à minimiser le δ [96].

Les facteurs de forme du pseudo-potential local symétriques et antisymétriques ainsi que les paramètres du réseau des composés binaires semiconducteurs BeSe et CdSe dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau V-1.

Tableau V-1: Les facteurs de forme symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des matériaux semiconducteurs BeSe et CdSe dans la phase zinc blende ainsi que les paramètres du réseau a en (u.a) et en (A°).

Composé	Facteurs de formes (Ryd)						Paramètre du réseau a
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
BeSe	-0.296300	0.020000	0.137450	0.03965	0.040	-0.00902	9.71130 (u.a)
							5.139 (A°)
CdSe	-0.404199	0.174645	0.340923	0.1311	0.280	0.572395	11.4366 (u.a)
							6.052 (A°)

V.1.1. Structure de bandes d'énergie:

La structure de bandes électroniques de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ est calculée pour les points de haute symétrie de la première zone de Brillouin, pour quelques valeurs de x avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

On a déterminé les structures de bandes de chaque composé: CdSe et BeSe. Elles sont représentées dans les figures V-1 et V-2.

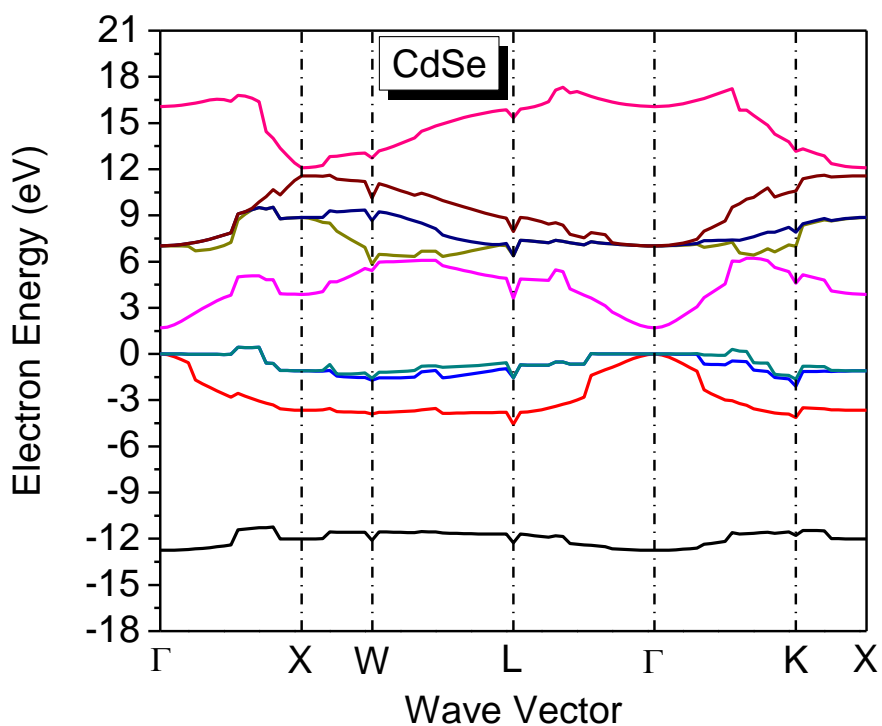


Figure V-1: La structure de bandes électroniques du composé CdSe.

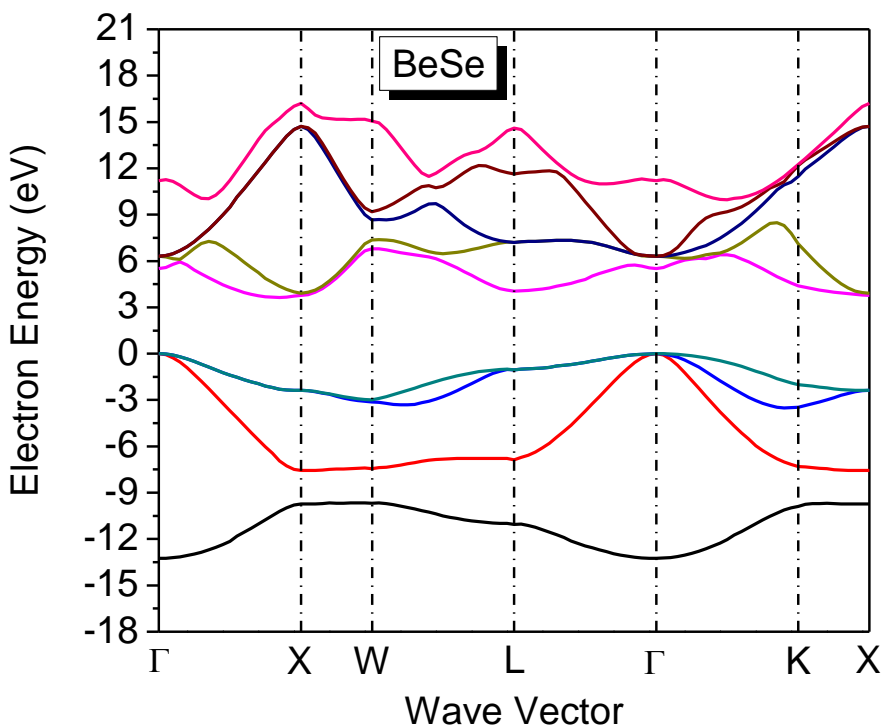


Figure V-2: La structure de bandes électroniques du composé BeSe.

Suivant la figure V-1 (la structure de bandes électroniques de CdSe), on observe que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au même point Γ . Par contre dans la figure V-2 (la structure de bandes électroniques de BeSe), on remarque que le maximum de la bande de valence est au point de haute symétrie Γ et le minimum de la bande de conduction est au point de haute symétrie X. Donc on peut dire que le composé CdSe est un semiconducteur à gap d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et que le composé BeSe est un semiconducteur à gap d'énergie indirect E_{Γ}^X . Les bandes de conduction sont plus dispersées que celles de valence, cela est dû au fait que les électrons de bandes de conduction sont plus délocalisés.

On note aussi l'existence d'un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point X, c'est le gap antisymétrique. Ce dernier est relié à la différence du potentiel entre les cations et les anions. Cette hypothèse a été confirmée par la proposition de Chelikowsky et *al.* [3, 97] ainsi que les résultats trouvés par Bouarissa et *al.* [6, 98]. On peut remarquer que la largeur du gap antisymétrique dans la structure du composé CdSe est plus grande comparativement avec celle du composé BeSe, cela est dû au fait que CdSe est plus ionique que BeSe.

Les gaps antisymétriques et l'ionicté selon Phillips, Christensen et Harrison des composés binaires semiconducteurs BeSe et CdSe dans la phase zinc blende sont présentés dans le tableau V-2.

Tableau V-2: Les gaps antisymétriques et l'ionicté des composés binaires CdSe et BeSe selon Phillips, Christensen et Harrison.

Composé	Gaps antisymétriques $E_{(2-1)v}^x$ (eV)	Ionicté
CdSe	8.35281	0.699 ⁽⁹⁸⁾ , 0.74 ⁽¹⁰⁰⁾ , 0.841 ⁽⁹⁹⁾
BeSe	2.16326	0.261 ⁽⁹⁸⁾ , 0.420 ⁽⁹⁹⁾

Les figures V-3, V-4 et V-5 représentent les structures de bandes électroniques de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ pour certaines concentrations ($x = 0.3, 0.5$ et 0.7) le long des points de haute symétrie de la première zone de Brillouin avec la VCA et la VCAA. On prend le maximum de la bande de valence comme une référence du zéro d'énergie.

On remarque que les bandes de conduction sont plus dispersées que celles de valence puisque les électrons de la bande de conduction sont plus délocalisés.

Pour les concentrations $x = 0.3$ et 0.5 (figures V-3 et V-4), le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point Γ , donc les alliages ternaires semiconducteurs $Be_{0.3}Cd_{0.7}Se$ et $Be_{0.5}Cd_{0.5}Se$ ont un gap direct. L'effet de la concentration apparaît à

partir de la concentration $x = 0.7$ (figure V-5) où le gap devient indirect (le maximum de la bande de valence est au point Γ et le minimum de la bande de conduction est au point X), si on prend en considération l'effet de désordre compositionnel le gap reste direct. Ces résultats sont très similaires avec d'autres travaux [18] pour les concentrations x (0.25, 0.5, 0.75) et le gap d'énergie reste toujours direct. D'autre part, à partir de la concentration $x=0.7$, si on ne tient pas compte de l'effet de désordre, l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ devient un semiconducteur à gap d'énergie indirect E_{Γ}^X . Il faut noter aussi que l'effet de la concentration x et l'effet du désordre compositionnel sont importants et on ne peut pas les négliger.

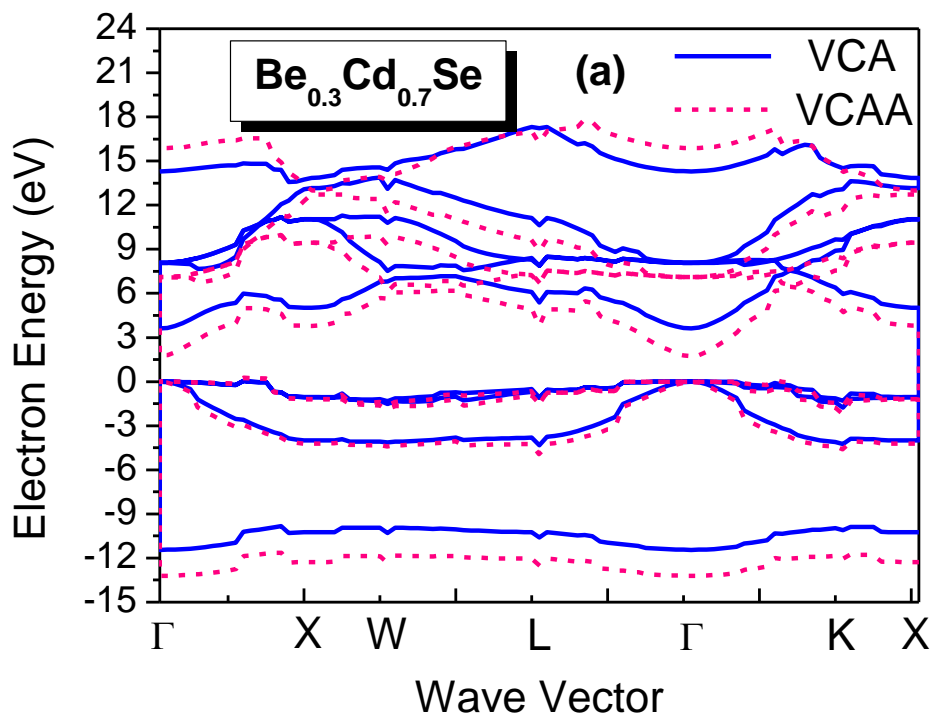


Figure V-3: La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Se}$.

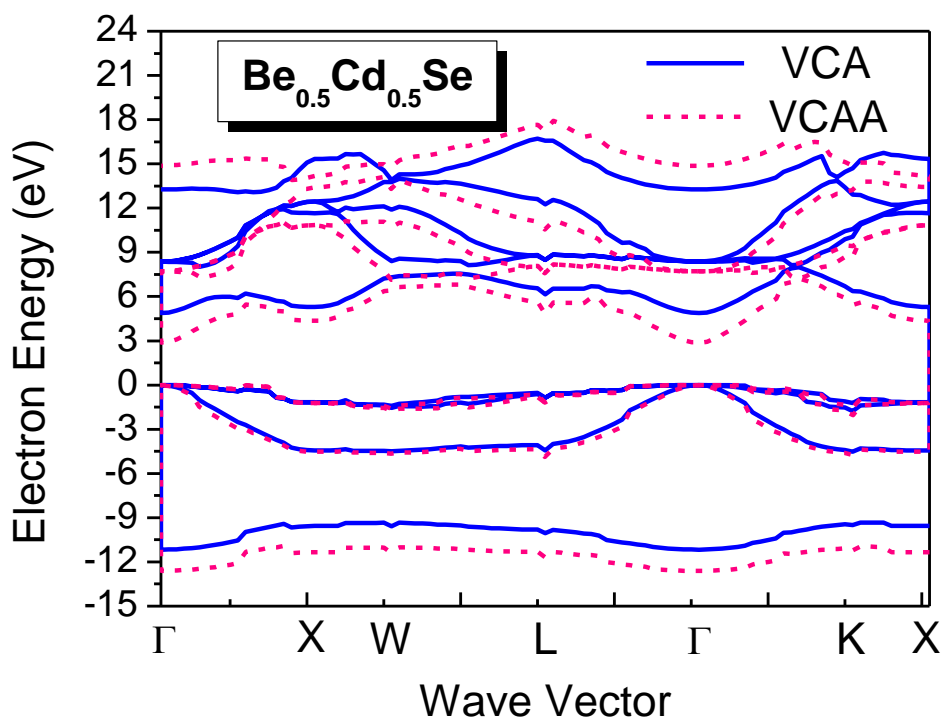


Figure V-4: La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$.

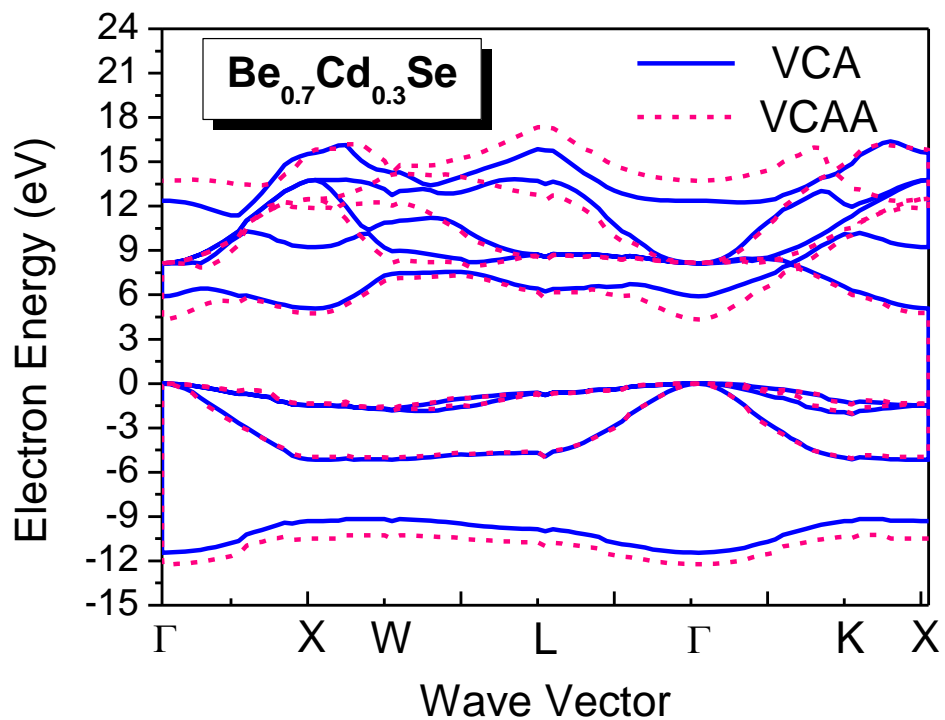


Figure V-5: La structure de bandes électroniques de l'alliage semiconducteur $\text{Be}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Se}$.

V.1.2. Les gaps d'énergie:

Il est important de voir la dépendance en composition des gaps d'énergie de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ nommés gaps directs E_{Γ}^{Γ} et gaps indirects E_{Γ}^{χ} et E_{Γ}^{Γ} .

Les calculs des gaps d'énergie directs et indirects pour les composés binaires de l'alliage ternaire étudié sont illustrés dans le tableau V-3. Les gaps d'énergie calculés de CdSe et BeSe sont de 1,68774 et 3,7728 eV respectivement. Les valeurs des gaps directs E_{Γ}^{Γ} sont 1.68774 eV pour CdSe et de 5,50603 eV pour BeSe. Et les valeurs des gaps indirects E_{Γ}^{χ} sont de 3,87253 eV pour CdSe et 3,7728 eV pour BeSe. On constate que ces gaps d'énergie sont en bon accord comparativement avec ceux de l'expérience et d'autres calculs.

Tableau V-3: Les gaps d'énergie direct et indirect des composés binaires semiconducteurs zinc-blende CdSe et BeSe en (eV).

Composé	Gaps d'énergie (eV)					
	E_{Γ}^{Γ}		E_{Γ}^{χ}		E_{Γ}^{Γ}	
	Exp.	Cal.	Exp.	Cal.	Exp.	Cal.
CdSe	1.69 ⁽¹⁰⁰⁾ , 1.675 ⁽³⁹⁾	1.68774	3.875 ⁽⁴⁰⁾ , 4.37 ⁽³⁹⁾	3.87253	3.612 ⁽⁴⁰⁾	3.61119
BeSe	5.6 ⁽³⁹⁾ , 5.5 ^(97,101)	5.50603	4.5 ⁽³⁹⁾ , 3.71 ⁽¹⁰¹⁾ , 3.61 ⁽⁹⁷⁾	3.7728	4.01 ⁽¹⁰¹⁾ 4.88 ⁽⁹⁷⁾	4.05263

Les figures V-6, V-7 et V-8 montrent la variation des gaps d'énergie en fonction de la concentration x en allant de CdSe (x = 0) vers le BeSe (x = 1) avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les trois gaps d'énergie augmentent non linéairement en fonction de la fraction molaire du Béryllium (Be), les courbes des figures sont des interpolations quadratiques de la forme:

$$E_g(x) = (1-x)E_g^{\text{CdSe}}(x) + xE_g^{\text{BeSe}} + Cx(1-x) \quad (\text{V-5})$$

Où C: est le paramètre de courbure du gap d'énergie.

Leurs expressions analytiques sont données comme suit:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(\text{eV}) = 1.42267 + 9.58437x - 5.05456x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-6})$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(\text{eV}) = 1.11584 + 2.09694x + 3.00002x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-7})$$

$$E_{\Gamma}^{\chi}(\text{eV}) = 3.82611 + 5.86375x - 5.87340x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-8})$$

$$E_{\Gamma}^{\chi}(\text{eV}) = 3.31941 + 3.18827x - 2.23121x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-9})$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(\text{eV}) = 3.34152 + 10.26727x - 9.23363x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-10})$$

$$E_{\Gamma}^{\perp}(\text{eV}) = 2.81246 + 6.09444x - 3.74214x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-11})$$

Suivant l'équation (V-6), on remarque que pour la VCA ($p=0$) le « bowing » est égal à -5.05456 eV, qui est en désaccord avec l'expérimental donnant un « bowing » optique est égal à 3 eV [14], mais lorsque on ajoute le terme correctif c 'est à dire en utilisant la VCA améliorée ($p \neq 0$) qui fait intervenir le potentiel effectif dû à l'effet du désordre compositionnel dans le potentiel total du cristal, un très bon accord est trouvé avec le «bowing» expérimental $C=3.00002$ eV pour $p=0.54964117$. Le «bowing» du gap E_{Γ}^{\perp} est le plus grand comparativement avec le «bowing» des gaps E_{Γ}^{\perp} et E_{Γ}^{\times} , cela signifie que le gap d'énergie E_{Γ}^{\perp} est fortement affecté par l'effet de désordre compositionnel. Le gap d'énergie direct E_{Γ}^{\perp} avec désordre est similaire au gap trouvé par les autres auteurs [18, 27].

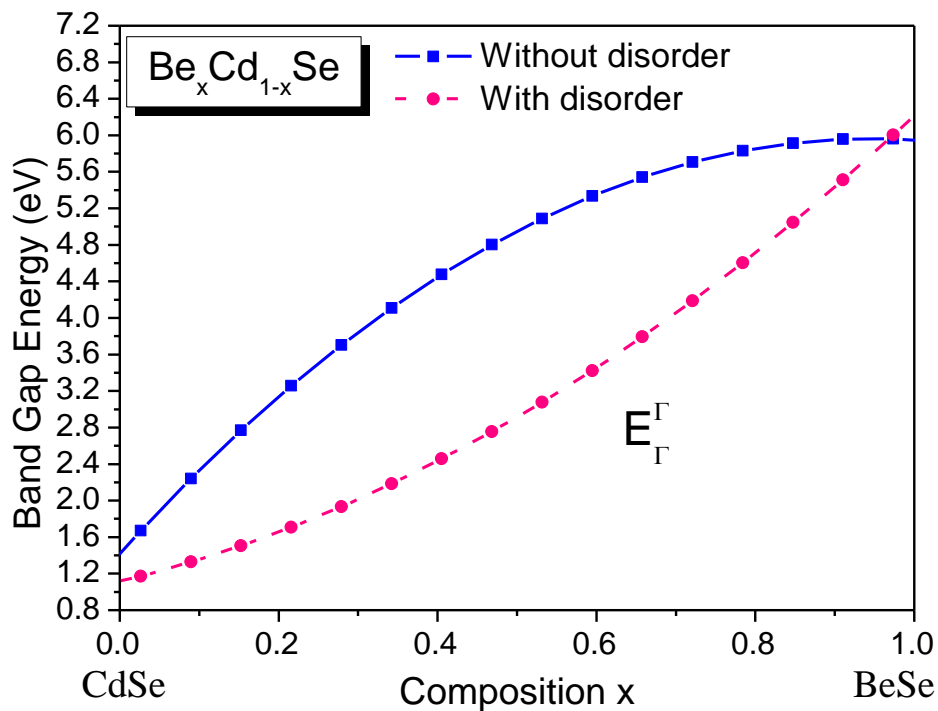


Figure V-6: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^{\perp} en fonction de la composition x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

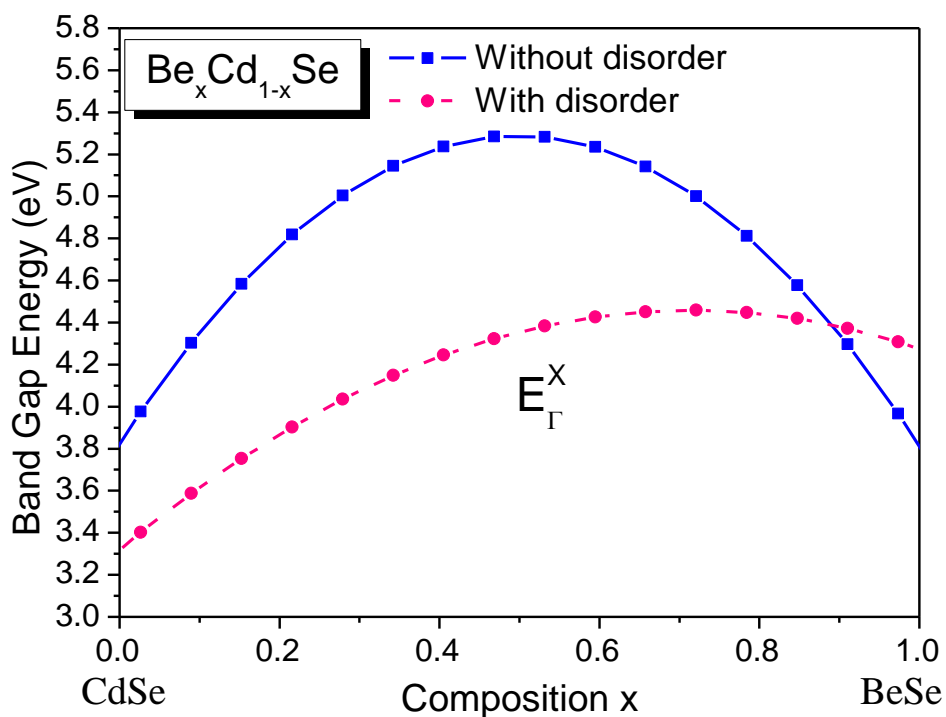


Figure V-7: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^X en fonction de la composition x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

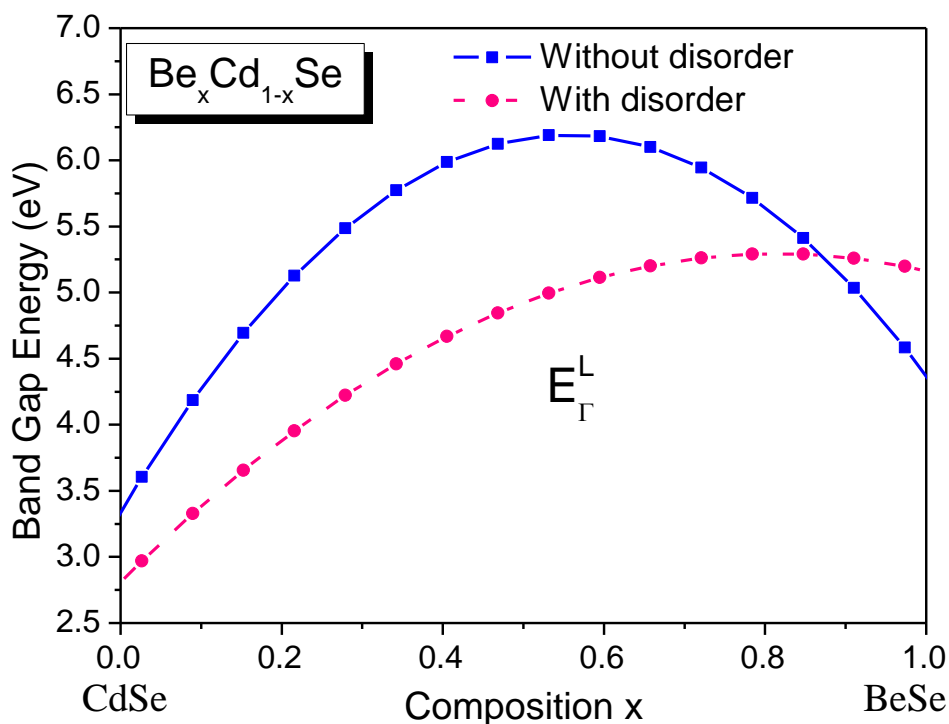


Figure V-8: La variation du gap d'énergie E_{Γ}^L en fonction de la composition x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

D'après les valeurs de bowing calculées, on peut conclure que la méthode (VCA) fournit des paramètres de bowing plus grands et négatifs pour les différents gaps d'énergie, tandis que l'incorporation de l'effet du désordre dans le potentiel de l'alliage donne des paramètres positifs pour les bandes interdites directes et restent négatifs et plus petits pour les bandes interdites indirectes.

Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ pour les concentrations $x=0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0 avec et sans tenir compte de l'effet du désordre sont représentés dans tableau V-4.

On note l'augmentation du gap d'énergie avec l'augmentation de la concentration x de Béryllium (Be). D'après le tableau, il est clair que l'effet du désordre est important.

Pour le composé CdSe, l'accord avec les données disponibles est dans l'intervalle [99.86%-99.24%] [14,18], et pour le composé BeSe est dans l'intervalle [94.32%-83.84%-98.33%-95.68%] [39, 40, 101].

Pour l'alliage $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$, l'accord avec les données disponibles est dans l'intervalle [56.12%-68.42 %-89.22%] lorsqu'on ne tient pas compte à l'effet du désordre compositionnel et cet intervalle devient [65.94%-85.98%-95.51%] si on prend en considération à l'effet du désordre. On peut dire que nos calculs sont en très bon accord avec les données disponibles [18, 26].

Tableau V-4: Les gaps d'énergie fondamentaux de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ pour les concentrations $x= 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ et 1.0 .

Composé	E_g (eV)		
	Cal.		Autres
	Sans désordre	Avec désordre	
CdSe	1.68774	1.68774	$1.69^{(102)}, 1.675^{(40)}$
$\text{Be}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Se}$	2.32239	1.09905	-
$\text{Be}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Se}$	3.61563	1.72897	-
$\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$	4.87551	2.86862	$3.336, 4.35^{(27)}$ $2.74^{(18)}$
$\text{Be}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Se}$	5.0836	4.33521	-
$\text{Be}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{Se}$	4.35659	4.57333	-
BeSe	3.7728	3.7728	$4-4.5^{(40)}, 3.71^{(39)}, 3.61^{(101)}$

La figure V-9 représente la variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre

compositionnel. Ce gap augmente non linéairement en fonction de la fraction molaire du Béryllium (Be). Il est clair que ce gap est affecté par le désordre compositionnel.

Les expressions analytiques des courbes de ce gap sont données comme suit:

$$E_g = 1.3723 + 10.9681x - 8.4266x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-12})$$

$$E_g = 0.9027 + 4.6282x - 0.8857x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-13})$$

D'après ces deux expressions, on remarque que le paramètre de courbure reste négatif et plus petit. On peut dire que le gap fondamental E_g est affecté par le désordre compositionnel.

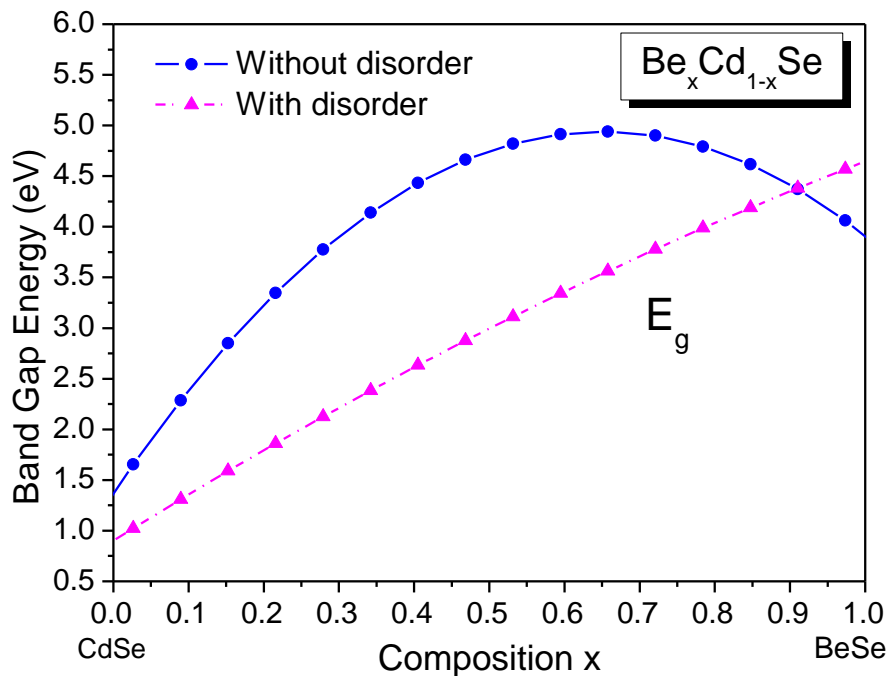


Figure V-9: Variation du gap fondamental E_g en fonction de la concentration x de Béryllium de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

Les figures V-10 a et V-10 b représentent la variation de gaps énergétiques en fonction de la composition x de Béryllium sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA) respectivement.

Notant que tous les gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^X et E_{Γ}^L varient non linéairement avec l'augmentation de la concentration de Béryllium sur la gamme 0–1 de la composition. Cependant, le taux de la variation est différent de l'un à l'autre. La variation des gaps d'énergies en fonction de la concentration de Béryllium de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ montre une transition entre le gap d'énergie directe E_{Γ}^{Γ} et le gap d'énergie indirecte E_{Γ}^X à la concentration x est égale à 0.57 de Béryllium sans désordre (VCA), mais cette valeur augmente jusqu'à $x = 0.76$ de Béryllium avec désordre (VCAA).

Nos résultats si on prend en considération l'effet du désordre sont compatibles avec les autres travaux [18], le gap devient indirect pour une concentration de béryllium $x \approx 0.85$.

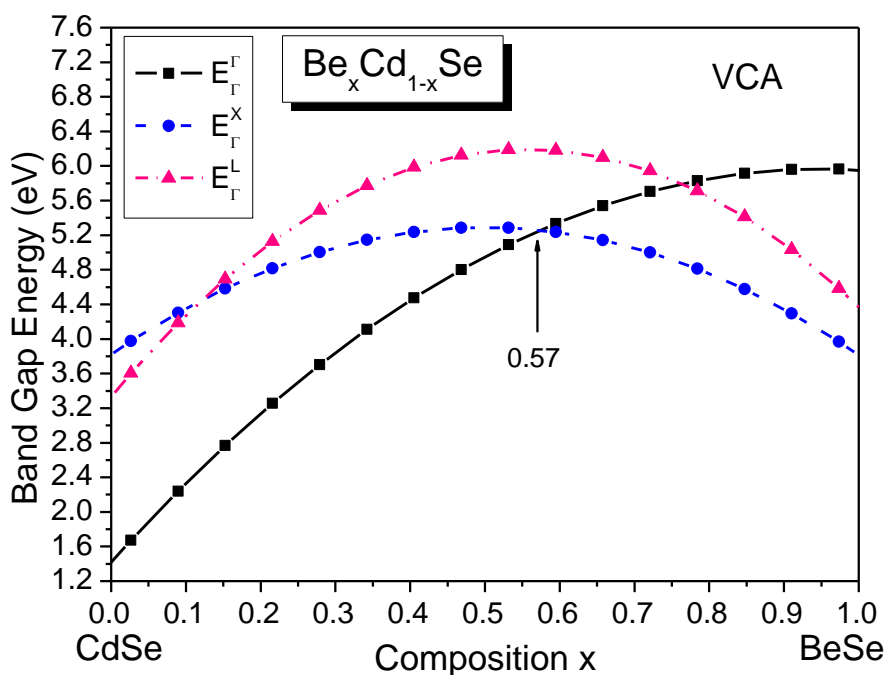


Figure V-10 (a): Gaps d'énergie directs et indirects en fonction de la fraction molaire x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ calculés sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel.

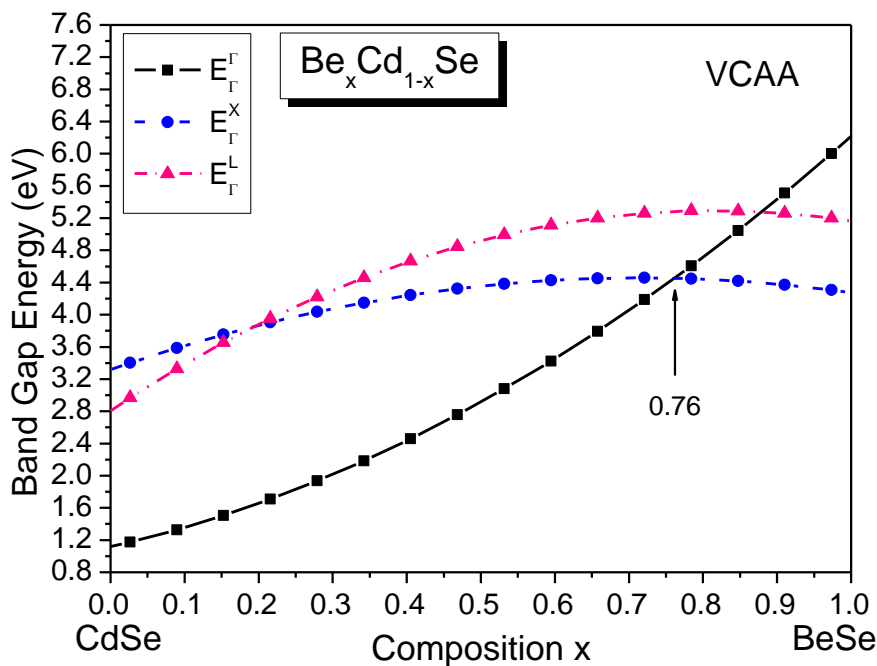


Figure V-10 (b): Gaps d'énergie directs et indirects en fonction de la fraction molaire x de Béryllium Be de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ calculés en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

V.1.3. La densité de charge électronique:

La connaissance de la densité de charge dans les solides présente un intérêt fondamental, dans le domaine des sciences des matériaux notamment les propriétés chimiques et physiques des semiconducteurs. Elle nous renseigne sur le caractère de la liaison chimique [103].

L'étude de la topologie de la densité de charge électronique est une des caractéristiques intéressante qui découle de la structure de bande et cela par l'utilisation des fonctions d'ondes calculées dans notre cas par la méthode E.P.M. Cette densité de charge électronique peut être obtenue en fonction de la position dans le cristal, en élevant au carré la fonction d'onde pour chaque état et en sommant la contribution de tous les états:

$$\rho_n(\mathbf{r}) = e \sum_{n,k} |\Psi_{n,k}(\mathbf{r})|^2 \quad (\text{V-14})$$

Où e est la charge électronique et $\Psi_{n,k}$ est la fonction d'onde à l'état k dans la $n^{\text{ième}}$ bande.

On ne s'intéresse pas à la densité de charge totale dans la zone de Brillouin, mais seulement à certains points de haute symétrie de cette zone et à des bandes bien spécifiques.

V.1.3.1. Densité de charge électronique des composés binaires BeSe et CdSe:

Le profil, le contour et la surface 3D de la densité de charge électronique pour la somme des quatre bandes de valence au point Γ du composé binaire BeSe sont présentés dans la figure V-11.

On constate que le maximum de la densité de charge est localisé presque au milieu des deux atomes (Be) et (Se) mais avec un peu de décalage vers le côté de l'anion (Se). La distribution de la densité de charge électronique est localisée au centre de la liaison et que la plus part de la densité est localisée au site anionique (Se) par rapport au site cationique (Be). Cette situation est presque similaire à celle trouvée dans la structure diamant [104, 105] où la densité de charge électronique est concentrée entre les deux atomes.

La Figure V-12 présente la densité de charge totale de valence du composé binaire CdSe au point Γ . Cette figure illustre le profil, le contour et la surface 3D. Le maximum de la densité de charge électronique est localisé à côté de l'anion (Se). Cette distribution asymétrique autour des centres des liaisons, ainsi que le transfert important de charge du cation vers l'anion indique que l'anion (Se) possède un potentiel plus fort que le cation (Cd). Cette différence du potentiel est responsable à l'ionicité de l'anion.

On note que le déplacement de la densité de charge vers l'anion (Se) est plus important pour le composé CdSe (figure V-12) que pour le composé BeSe (figure V-11), ce qui signifie que le composé CdSe est plus ionique que le composé BeSe. Ceci est compatible avec l'ionicité calculée selon Phillips, Christensen et Harrison [3, 98].

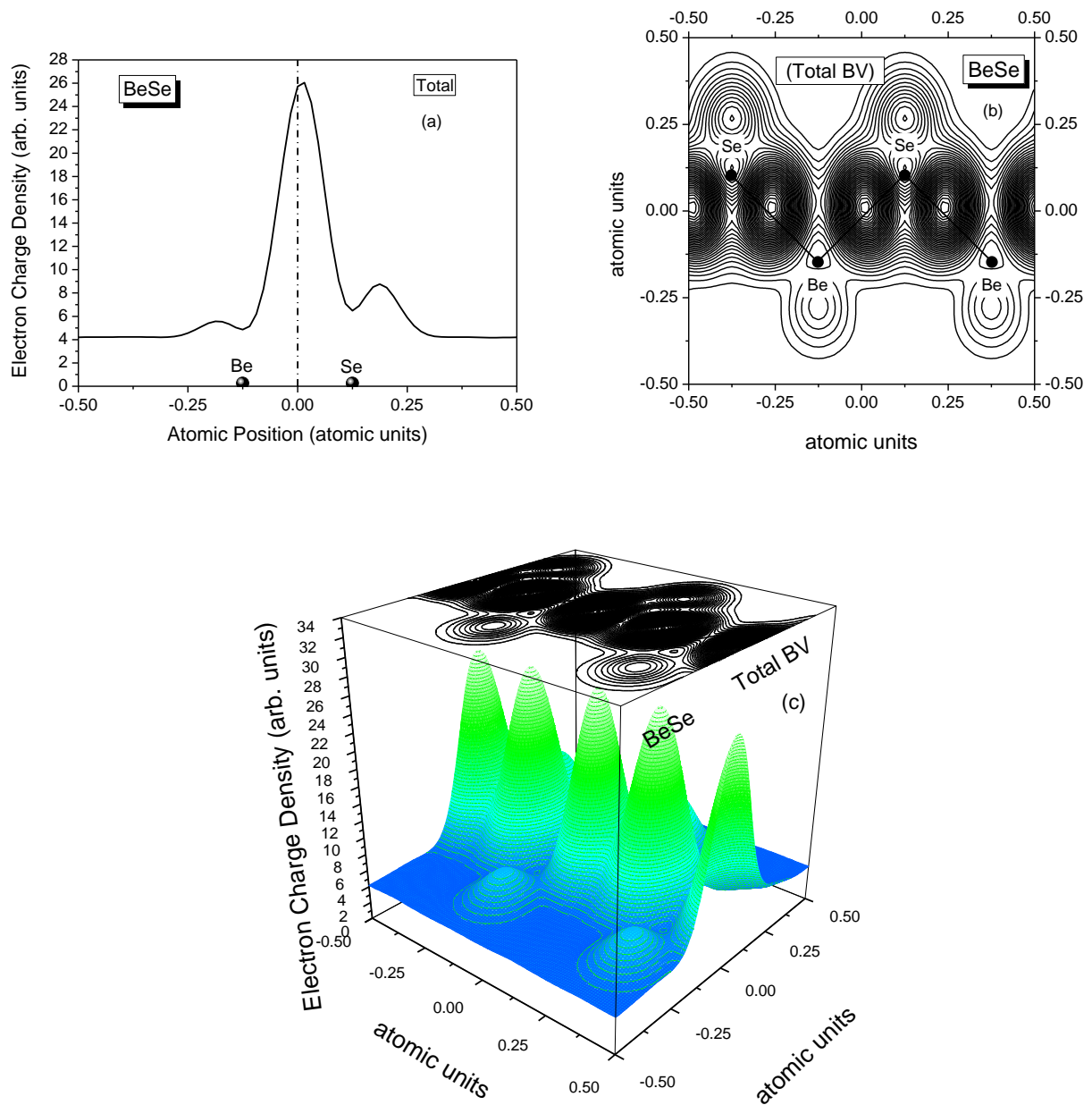


Figure V-11: Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence du composé BeSe: (a) profil selon la direction [111]; (b) contour dans le plan (110); (c) surface 3D.

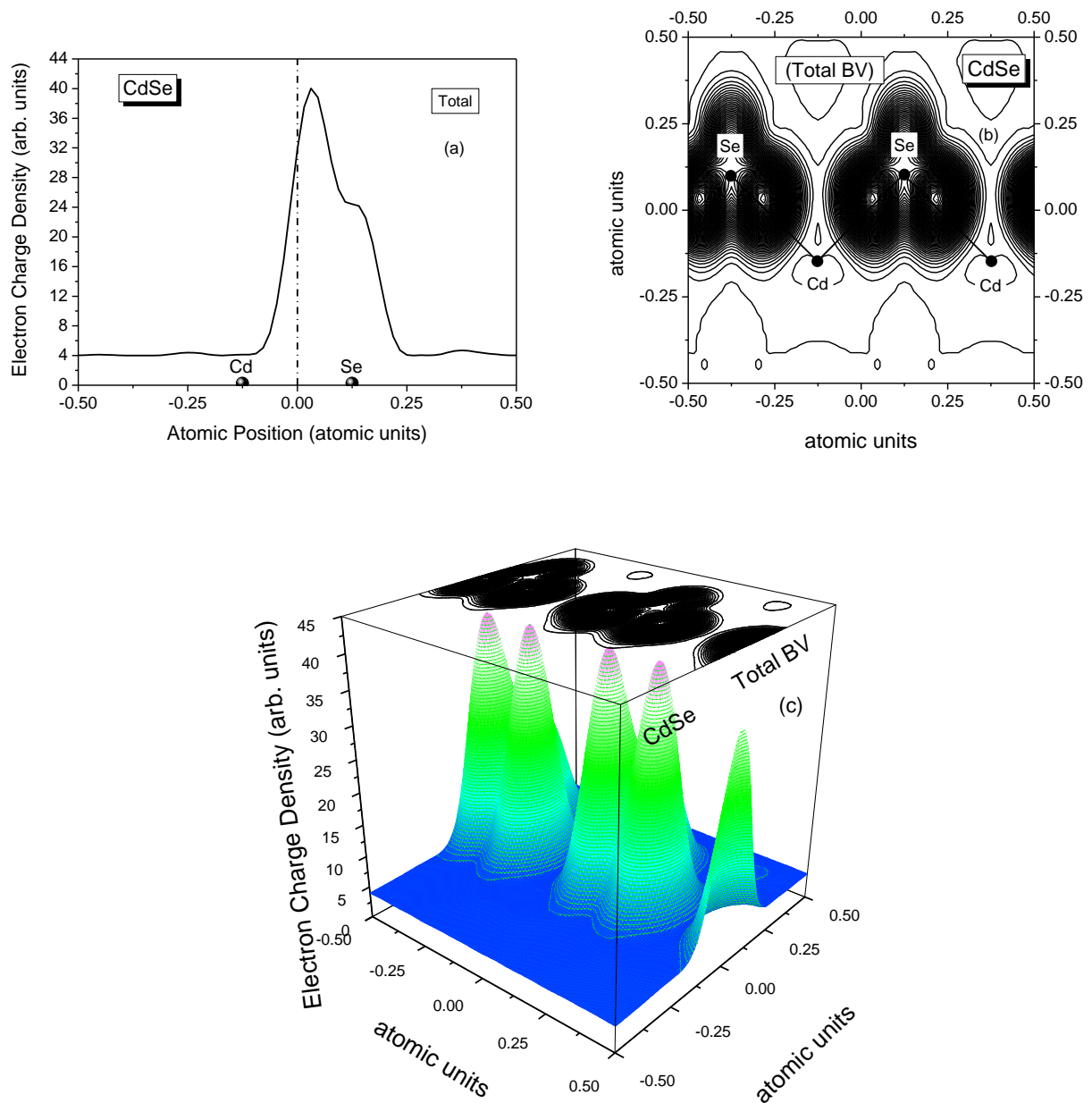


Figure V-12: Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence du composé CdSe: (a) profil selon la direction $[111]$; (b) contour dans le plan (110) ; (c) surface 3D.

V.1.3.2. Densité de charge électronique de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$:

La Figure V-13 illustre la densité de charge électronique de la somme des quatre bandes de valence au point Γ du semiconducteur $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ pour la concentration $x=0.5$, avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel.

On note qu'il y a un décalage par la présence de l'effet de désordre. Ce dernier a une influence importante sur la distribution de la densité de charge coté anionique (Se). Ce résultat est en accord avec les résultats trouvés par Bouarissa et *al.* [106, 107], dans leurs études des densités de charge calculées pour les bandes de valence des alliages III-V où ces bandes sont affectées par la présence de l'effet du désordre.

L'étude du caractère contributif dans les liaisons atomiques, en utilisant les densités de charge, donne toujours un grand succès. Par exemple, le facteur d'ionicté peut être donné en calculant le rapport de la surface de la densité de charge de l'anion sur la surface totale de la densité de charge. En outre, l'aspect qualitatif des courbes de la densité de charge peut donner quelques informations sur le caractère qui domine dans les liaisons atomiques [3].

Une autre observation à faire est que les distributions de charges sont concentrées surtout entre le cation et l'anion; ceci explique que les électrons se trouvent entre les deux atomes pour participer à la formation d'un type de liaison spécifique dans les conditions normales de température et de pression. De plus, l'étude de la densité de charge montre qualitativement le type d'hybridation. Dans notre cas, il s'agit d'une liaison de type "sp³" [108].

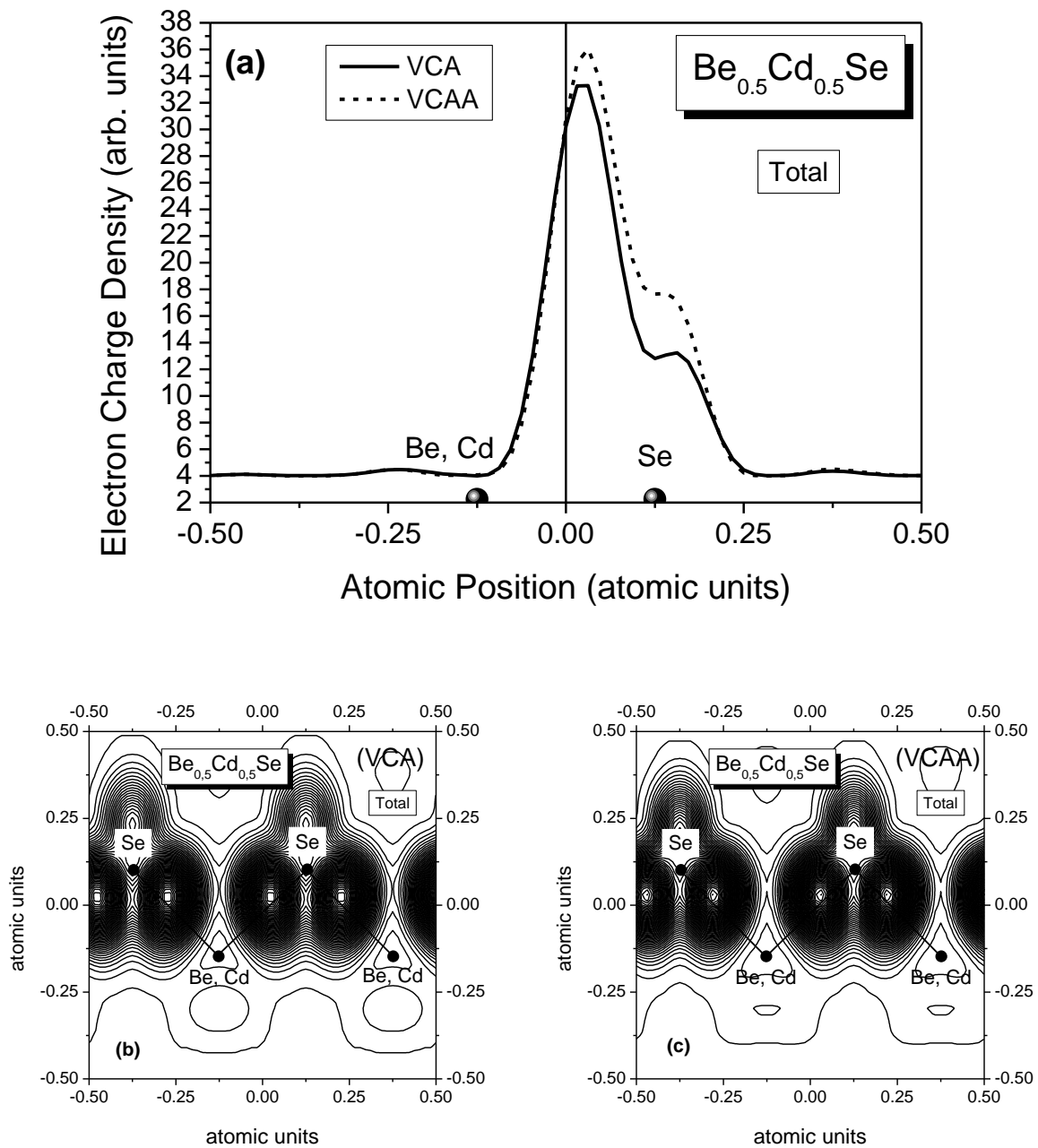


Figure V-13: Densité de charge électronique au point Γ de la somme des quatre bandes de valence de l'alliage ternaire $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$: (a) profil selon la direction $[111]$ avec et sans désordre compositionnel; (b) contour dans le plan (110) VCA; (c) contour dans le plan (110) VCAA.

V.2. Etude des propriétés optiques et diélectriques:

V.2.1. L'indice de réfraction:

La connaissance du gap d'énergie, nous a permis de calculer l'indice de réfraction n et de voir sa dépendance en fonction de la concentration x suivant le modèle de Moss qui a été envisagé pour apporter le gap énergétique du semiconducteur à leur indice de réfraction.

Les valeurs de l'indice de réfraction n obtenues est 2.82 pour CdSe et 2.31 pour BeSe. Les valeurs disponibles de n pour CdSe et BeSe sont 2.83, 2.5, 2.64 et 2.47 pour le composé CdSe; 2.20, 2.25 et 3.61 pour le composé BeSe [36, 38, 39, 100, 101, 108-112, 113]. Noter que pour CdSe, l'accord entre nos résultats et les données disponibles est dans les intervalles [99.64%-88.65%-93.61%-87.58%], et [95.23%-97.4%-64%] pour BeSe.

Pour l'alliage $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$, l'accord avec les données disponibles est 39.58%, si on ne tient pas en compte l'effet du désordre compositionnel. Cet accord est 67.28 % avec l'effet du désordre. Donc nos calculs sont en bon accord avec les données disponibles, si on tient compte de l'effet du désordre compositionnel (tableau V-5).

Dans la figure V-14, nous avons tracé les courbes de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Béryllium sans et avec désordre. Nous observons qu'il y a une diminution de ce paramètre en augmentant la concentration de Béryllium et cette diminution est non linéaire pour le modèle utilisé. On note aussi que l'effet du désordre compositionnel est important et ne doit pas être négligé. La courbe de l'indice de réfraction avec désordre est très similaire à celle trouvée par d'autres méthodes [18].

Les courbes de la figure V-14 sont des interpolations quadratiques. Leurs expressions analytiques sont données comme suit:

$$n = 2.8155 - 2.0753x + 1.5822x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-15})$$

$$n = 3.1019 - 1.4238x + 0.4910x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-16})$$

D'après ces équations, on observe que le bowing est affecté par l'effet du désordre compositionnel où ce dernier fait diminuer le bowing.

On remarque aussi que l'effet du désordre fait augmenter l'indice de réfraction. On peut conclure que dans l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, le plus grand gap d'énergie correspond au plus petit indice de réfraction.

Tableau V-5: L'indice de réfraction n calculé par la relation de Moss et les gaps d'énergie fondamentaux des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.

Composé	E_g (eV)		n	
	Cal.	Autres cal.	Moss	Autres cal.
CdSe	1.68774	1.69 ⁽¹⁰²⁾ , 1.675 ⁽⁴⁰⁾	2.82832657	2.83 ^{(109),(110)} , 2.5 ⁽¹¹¹⁾ , 2.64 ⁽¹¹²⁾ , 2.47 ⁽¹¹³⁾
Be _{0.1} Cd _{0.9} Se	2.32239* 1.09905**	-	2.61139249* 3.14848462**	-
Be _{0.3} Cd _{0.7} Se	3.61563* 1.72897**	-	2.33781394* 2.81131218**	-
Be _{0.5} Cd _{0.5} Se	4.87551* 2.86862**	3.336 ⁽²⁷⁾ , 4.35 ⁽²⁷⁾ 2.74 ⁽¹⁸⁾	2.1694564* 2.4770666**	1.93 ⁽¹⁸⁾
Be _{0.7} Cd _{0.3} Se	5.0836* 4.33521**	-	2.14690633* 2.23410409**	-
Be _{0.9} Cd _{0.1} Se	4.35659* 4.57333**	-	2.23135806* 2.20443757**	-
BeSe	3.7728	4-4.5 ⁽⁴⁰⁾ , 3.71 ⁽³⁹⁾ , 3.61 ⁽¹⁰¹⁾	2.31307648	2.20 ⁽¹¹³⁾ , 2.25 ⁽³⁷⁾ , 3.61 ⁽¹¹⁴⁾

* Nos calculs sans désordre.

** Nos calculs avec désordre.

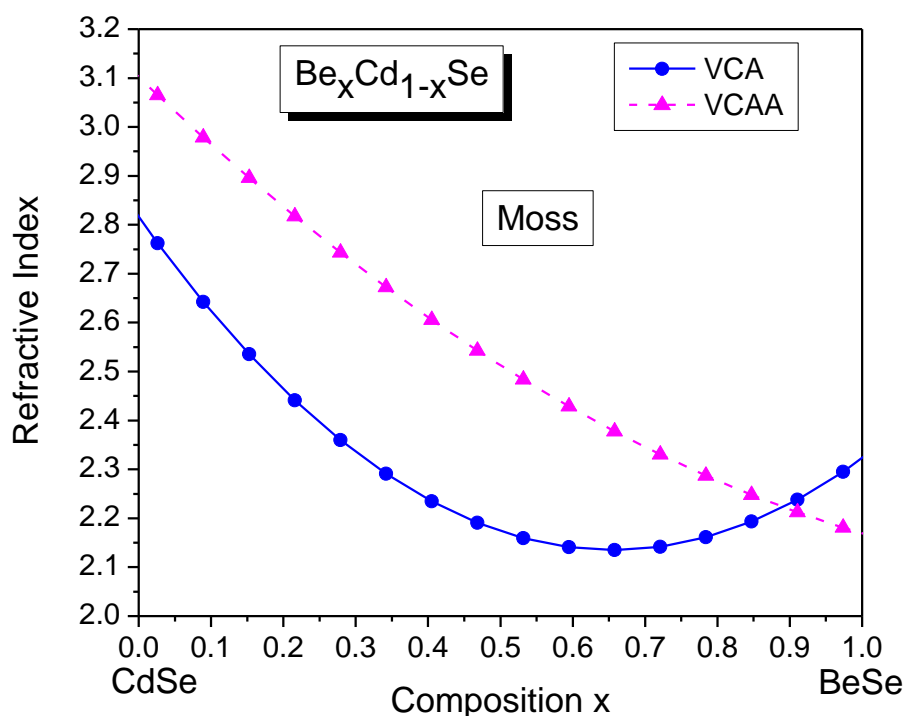


Figure V-14: La variation de l'indice de réfraction n en fonction de la concentration x de Béryllium, calculé par la relation de Moss sans et avec désordre de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$.

V.2.2. Les constantes diélectriques:

V.2.2.1. La constante diélectrique à haute fréquence:

À partir des valeurs de l'indice de réfraction calculées, on peut déterminer la constante diélectrique à haute fréquence.

Les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ obtenues par le modèle de Moss et par les relations d'Adachi sont présentées dans le tableau V-6.

Les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ sont respectivement 7.99 et 8.86 pour CdSe; 5.35 et 5.90 pour BeSe. Les valeurs disponibles de ϵ_∞ sont 7.99 et 6.2 pour le composé CdSe; 7.597, 6.9, 6.334, 6.1 et 5.806 pour le composé BeSe [109, 110, 115-118]. On note que l'accord des résultats obtenus est bon avec les travaux disponibles et il est dans les intervalles [100% - 77.6%] et [90.18% - 70%] pour CdSe; par contre, il est dans l'intervalle [70.4% - 77.5% - 84.46% - 87.70% - 92.14%] et [77.66% - 85.5% - 93.14% - 96.7% - 98.3%] pour BeSe.

Pour la concentration $x = 0.5$, l'accord avec les données disponibles est 79.46% et 86.24% si on ne tient pas compte à l'effet du désordre compositionnel. Cet accord est 60.95 % et 52.04% avec l'effet du désordre. On peut dire que nos calculs sont en bon accord avec les données disponibles.

Tableau V-6: La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée avec les relations de Moss et d'Adachi des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.

Composé	Eg (eV)	ϵ_{∞}		
	Cal.	Moss	Adachi	Autres cal.
CdSe	1.68774	7.99943117	8.8634092	7.99 ^{(109), (110)} , 6.2 ⁽¹¹⁵⁾
Be _{0.1} Cd _{0.9} Se	2.32239*	6.81937073*	7.9622062*	-
	1.09905**	9.91295541**	9.699349**	
Be _{0.3} Cd _{0.7} Se	3.61563*	5.46537401*	6.1258054*	-
	1.72897**	7.90347618**	8.8048626**	
Be _{0.5} Cd _{0.5} Se	4.87551*	4.70654106*	4.3367758*	3.74 ⁽¹⁸⁾
	2.86862**	6.13585894**	7.1865596**	
Be _{0.7} Cd _{0.3} Se	5.0836*	4.60920678*	4.041288*	-
	4.33521**	4.99122109**	5.1040018**	
Be _{0.9} Cd _{0.1} Se	4.35659*	4.9789588*	5.0736422*	-
	4.57333**	4.859545**	4.7658714**	
BeSe	3.7728	5.35032281	5.902624	7.597 ⁽¹¹⁶⁾ , 6.9 ⁽¹¹⁷⁾ 6.334 ⁽¹¹⁶⁾ , 6.1 ⁽¹¹⁸⁾ 5.806 ⁽¹¹⁶⁾

* Nos calculs sans désordre.

** Nos calculs avec désordre.

La figure V-15 montre l'évolution de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration de Béryllium de l'alliage Be_xCd_{1-x}Se, calculée par la relation de Moss. Noter qu'en augmentant la concentration x de Béryllium, la constante diélectrique à haute fréquence diminue. On remarque que le comportement de ϵ_{∞} est qualitativement semblable à celui de l'indice de réfraction n, et similaire à ceux étudié par d'autre méthode [18].

Il est clair que l'effet du désordre compositionnel influe sur la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} et on ne peut pas être le négligé.

Les courbes de la figure V-15 sont des interpolations quadratiques. Leurs expressions analytiques données comme suit:

$$\epsilon_{\infty} = 7.8571 - 10.1869x + 7.7619x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-17})$$

$$\epsilon_{\infty} = 9.5305 - 7.7213x + 2.8572x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-18})$$

Par la comparaison entre les deux expressions, On remarque que le désordre compositionnel fait diminuer le bowing.

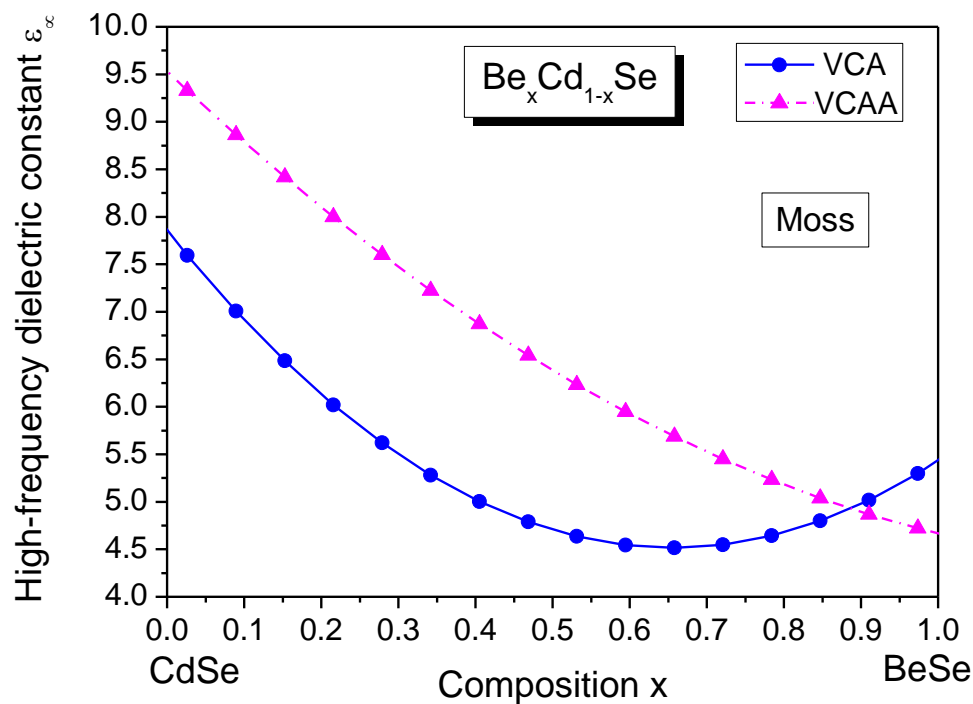


Figure V-15: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration x de Béryllium, calculée par la relation de Moss sans et avec désordre de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$.

Nous avons tracés les courbes des constantes diélectriques à haute fréquence ϵ_{∞} en fonction du gap d'énergie E_g de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ dans la figure V-16 avec et sans désordre. Les ajustements quadratiques donnent les relations suivantes:

$$\epsilon_{\infty} = 9.9464 - 2.0711E_g + 0.1991E_g^2 \quad (\text{relation de Moss}) \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-19})$$

$$\epsilon_{\infty} = 12.9908 - 3.4777E_g + 0.3738E_g^2 \quad (\text{relation de Moss}) \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-20})$$

Les équations (V-19) et (V-20) obtenues de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$ indiquent clairement que notre échelle des données a un comportement non linéaire en fonction du gap d'énergie E_g qui est différent du comportement linéaire estimé à partir des relations rapporté par Adachi [78] pour les composés semiconducteurs (équations V-21 et V-22).

$$\epsilon_{\infty} = 10.3804 - 1.3803E_g \quad (\text{relation d'Adachi}) \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-21})$$

$$\epsilon_{\infty} = 11.2600 - 1.4200E_g \quad (\text{relation d'Adachi}) \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-22})$$

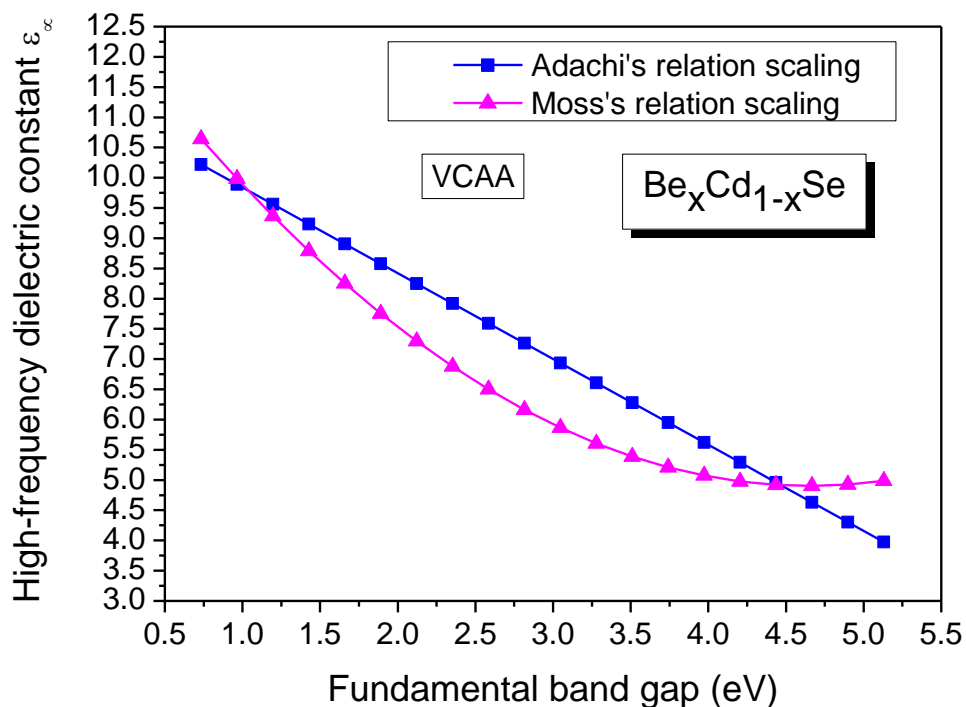
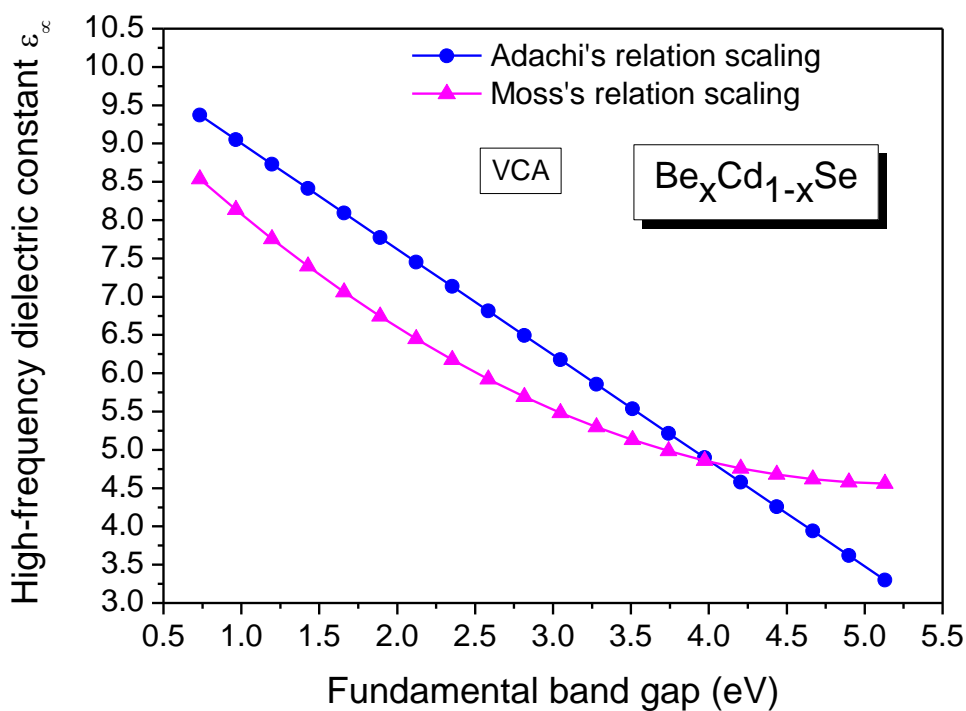


Figure V-16: Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique à haute fréquence avec le gap d'énergie fondamental de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, en utilisant la relation d'Adachi et la relation de Moss sans et avec désordre.

V.2.2.2. La constante diélectrique statique:

À partir des valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence calculées, on peut déterminer la constante diélectrique statique par l'usage du modèle de Moss et par le modèle de Adachi. Les résultats concernant ϵ_0 pour CdSe, BeSe et ses alliages sont listés dans le tableau V-7.

Les valeurs de la constante diélectrique statique (ϵ_0) en utilisant le modèle de Moss et le modèle d'Adachi sont respectivement 9.28 et 13.32 pour CdSe et 5.47 et 6.89 pour BeSe. Les valeurs disponibles de ϵ_0 sont 9.23 et 9.6 pour le composé CdSe; et 7.47 pour le composé BeSe [26, 27, 33, 38, 39]. Noter que pour CdSe, l'accord entre les résultats et les données disponibles est dans les intervalles [99.46%-96.66%] et [69.3%-72.1%]. Par contre, pour BeSe l'accord est 73.22% avec le modèle de Moss et 92.23% avec le modèle d'Adachi. Il est clair de ces comparaisons que ces résultats sont en concordance avec les données disponibles (tableau V-7).

La dépendance de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de Béryllium est tracée dans la figure V-17. Nous observons que la constante diélectrique statique ϵ_0 diminue non linéairement avec la concentration de Béryllium.

Les courbes de la figure V-17 sont des interpolations quadratiques. Leurs expressions analytiques données comme suit:

$$\epsilon_0 = 9.0729 - 12.5882x + 9.1153x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-23})$$

$$\epsilon_0 = 11.1496 - 9.3465x + 2.9063x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-24})$$

On remarque d'après ces équations que le désordre compositionnel fait diminuer le bowing.

Nous avons tracés les courbes de la constante diélectrique statique ϵ_0 avec le gap d'énergie E_g de alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ dans la figure V-18 avec et sans désordre. Une graduation des calculs concernant ϵ_0 avec E_g , en utilisant un ajustement quadratique donne les relations suivantes:

$$\epsilon_0 = 12.0752 - 2.9123E_g + 0.2936E_g^2 \quad (\text{relation de Moss}) \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-25})$$

$$\epsilon_0 = 15.6958 - 4.5094E_g + 0.4841E_g^2 \quad (\text{relation de Moss}) \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-26})$$

Ces deux équations indiquent clairement que la constante diélectrique statique ϵ_0 a un comportement non linéaire en fonction du gap d'énergie E_g qui est différent du comportement linéaire estimé à partir des relations rapporté par Adachi [78] pour les composés semiconducteurs (équations V-27 et V-28).

$$\epsilon_0 = 16.6122 - 2.9939E_g \quad (\text{relation d'Adachi}) \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-27})$$

$$\epsilon_0 = 18.5200 - 13.0800E_g \quad (\text{relation d'Adachi}) \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-28})$$

La constante diélectrique statique ϵ_0 montre presque le même comportement qualitatif que celui de ϵ_∞ (figures V-19 et V-20).

Tableau V-7: La constante diélectrique statique ϵ_0 calculée avec les relations de Moss et d'Adachi des composés binaires semiconducteurs CdSe, BeSe et leurs alliages.

Composé	Eg (eV)	ϵ_0		
		Cal.	Moss	Adachi
CdSe	1.68774	9.28216786	13.3217608	9.23 ^{(109),(110)} , 9.6 ^{(115),(23)}
Be _{0.1} Cd _{0.9} Se	2.32239*	7.78027467*	11.3670388*	-
	1.09905**	11.6528003**	15.134926**	
Be _{0.3} Cd _{0.7} Se	3.61563*	6.04573671*	7.3838596*	-
	1.72897**	9.10807306**	13.1947724**	
Be _{0.5} Cd _{0.5} Se	4.87551*	5.06514815*	3.5034292*	-
	2.86862**	6.86989472**	9.6846504**	
Be _{0.7} Cd _{0.3} Se	5.0836*	4.84796787*	2.862512*	-
	4.33521**	5.41088529**	5.1675532**	
Be _{0.9} Cd _{0.1} Se	4.35659*	5.13488514*	5.1017028*	-
	4.57333**	5.0954481**	4.4341436**	
BeSe	3.7728	5.4700285	6.899776	7.47 ⁽¹¹⁹⁾

* Nos calculs sans désordre.

** Nos calculs avec désordre.

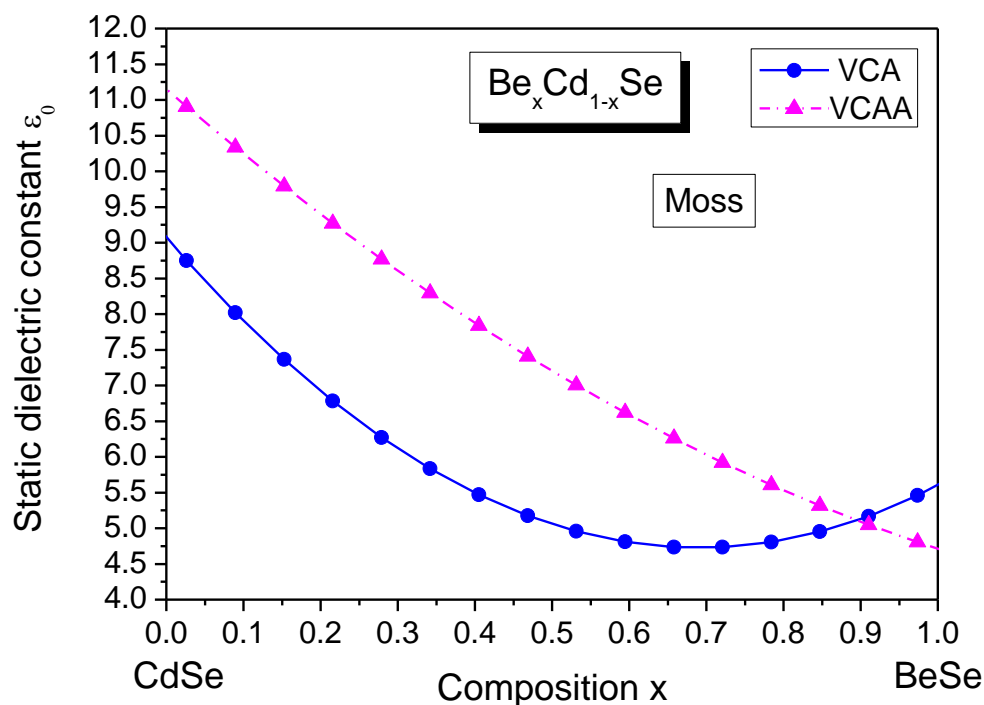


Figure V-17: La variation de la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de la concentration de Béryllium, calculée par la relation de Moss avec et sans désordre de l'alliage Be_xCd_{1-x}Se.

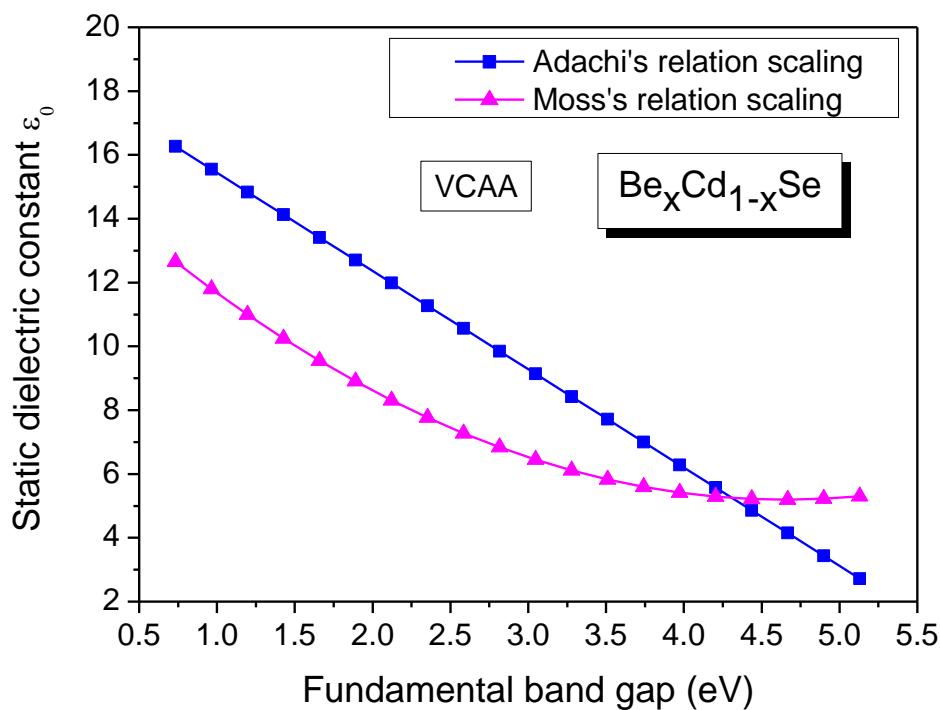
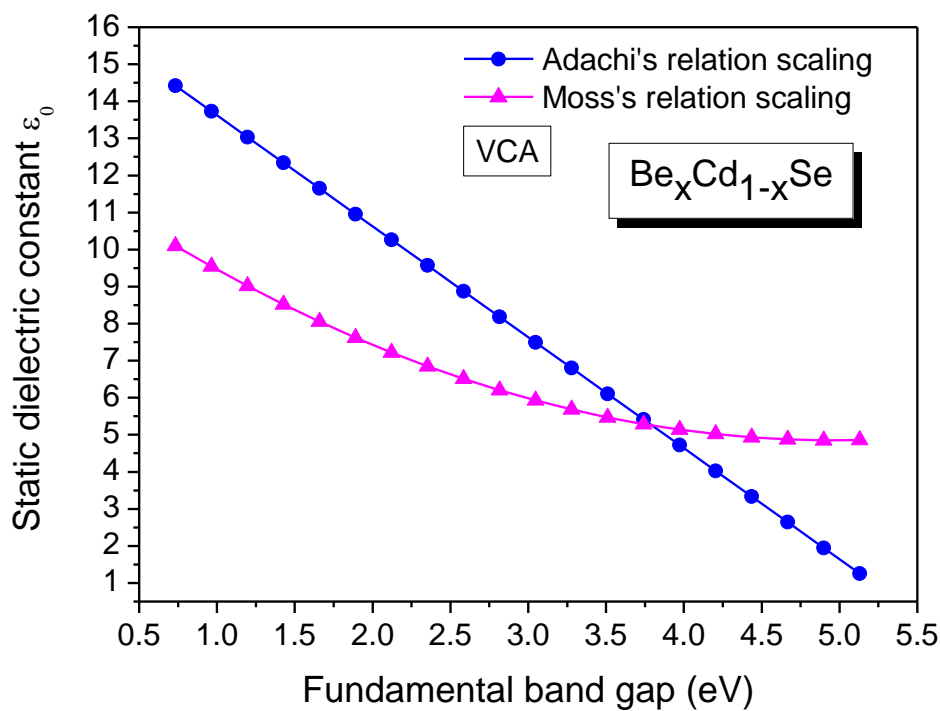


Figure V-18: Comparaison de la dépendance de la constante diélectrique statique ϵ_0 avec le gap d'énergie fondamentale de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$, en utilisant la relation d'Adachi et la relation de Moss sans et avec désordre.

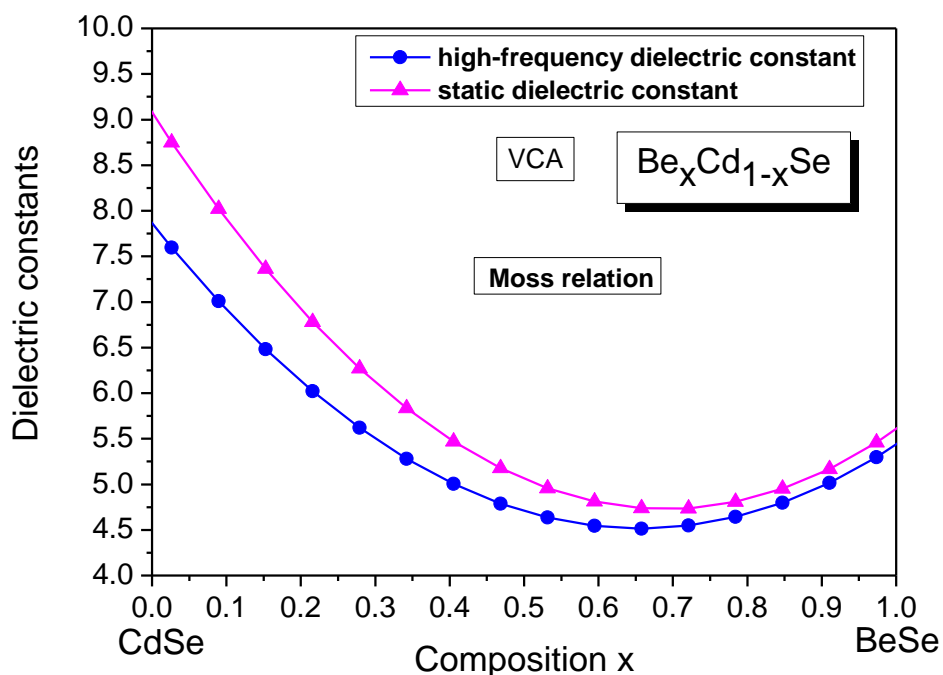


Figure V-19: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de Béryllium, calculées par la relation de Moss sans désordre de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$.

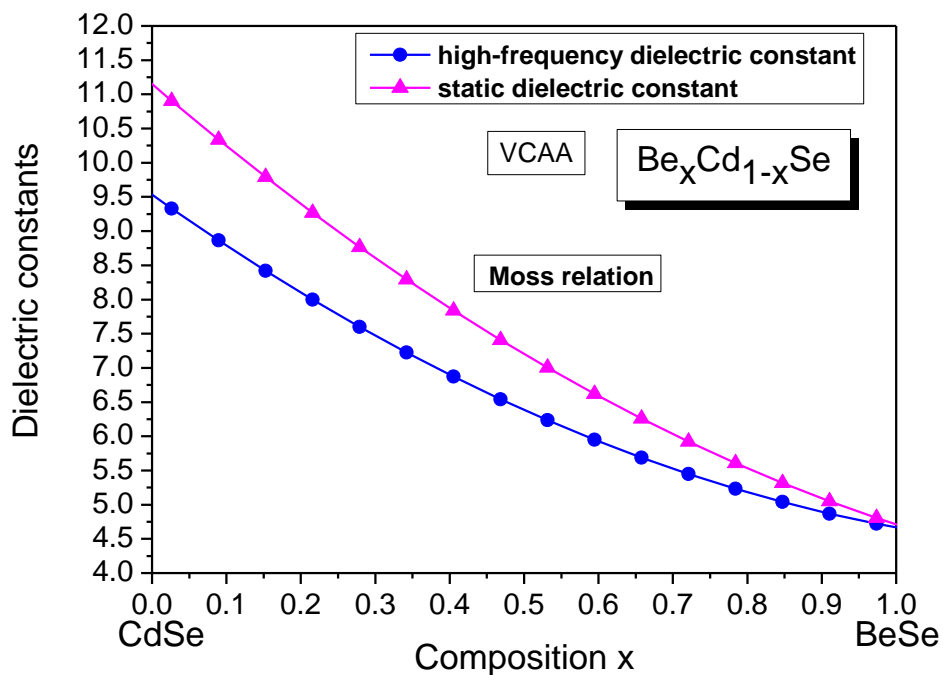


Figure V-20: La variation de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ et la constante diélectrique statique ϵ_0 en fonction de concentration x de Béryllium, calculées par la relation de Moss avec désordre de l'alliage $Be_xCd_{1-x}Se$.

V.3. Les propriétés Mécaniques:

V.3.1. Les constantes élastiques:

Les valeurs des constantes sont résumées dans le tableau V-8. On constate qu'il ya une augmentation des constantes élastiques en fonction de la concentration x de Béryllium en allant du composé CdSe au composé BeSe. On remarque aussi que l'effet de désordre fait diminuer les constantes élastiques.

On peut dire que l'accord entre nos résultats et ceux trouvés dans la littérature est raisonnable. Les valeurs de la constante C_{11} obtenues sont 9.6 pour CdSe et 18.56 pour BeSe. Les valeurs disponibles de C_{11} sont 8.84, 8.81 et 11.0 pour le composé CdSe et 15.17, 14.9 et 14.97 pour le composé BeSe [40, 110, 120-123]. On note que pour CdSe, l'accord entre nos calculs et les données disponibles est dans les intervalles [92%-91.77%-87.27%], et [81.73%-80.28%-80.65%] pour BeSe. Les valeurs de la constante C_{12} obtenues sont 5.87 pour CdSe et 11.13 pour BeSe. Les valeurs disponibles de C_{12} pour CdSe et BeSe sont 3.83, 5.36 et 6.66 pour le composé CdSe; 5.33, 5.9 et 8.24 pour le composé BeSe [40, 110, 120-123]. Noter que pour CdSe, l'accord entre nos résultats et les données disponibles est dans les intervalles [65.24%-91.31%-88.13%], et [47.88%-53%-74%] pour BeSe.

Enfin, les valeurs de la constante C_{44} sont 4.26 pour CdSe et 8.33 pour BeSe. Les valeurs disponibles de C_{44} pour CdSe et BeSe sont 3.57, 2.74 et 5.03 pour le composé CdSe; 5.37, 8.1 et 4.02 pour le composé BeSe [40, 110, 120-123]. Noter que pour CdSe, L'accord entre nos résultats et les données disponibles est dans les intervalles [83.8%-64.31%-84.69%], et [64.46%-97.23%-48.25%] pour BeSe.

Les critères de la stabilité mécanique de Born pour le système cubique sont donnés par les relations suivantes :

$$C_{11} - C_{12} > 0; \quad C_{11} + 2C_{12} > 0; \quad C_{11} > 0; \quad C_{44} > 0$$

On remarque que les composés binaires CdSe, BeSe et leurs alliages répondent aux critères de stabilité mécanique, Ce qui confirme qu'ils sont mécaniquement stables.

Les calculs des constantes élastiques avec et sans l'effet de désordre compositionnel sont tracés dans la figure V-21. Les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) varient non linéairement avec la croissance de la concentration x de Béryllium. On peut noter que le désordre compositionnel est important sur ces constantes donc on ne peut pas le négligé.

Les courbes des figures sont des interpolations quadratiques de nos résultats exprimés par les relations suivantes:

$$C_{11} = 9.6450 + 5.3652x + 3.5133x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-29})$$

$$C_{11} = 9.6439 + 4.6689x + 4.1769x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-30})$$

$$C_{12} = 5.8945 + 3.2034x + 2.0150x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-31})$$

$$C_{12} = 5.8935 + 2.7823x + 2.4169x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-32})$$

$$C_{44} = 3.0410 + 1.7379x + 1.1854x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-33})$$

$$C_{44} = 3.0408 + 1.5157x + 1.3967x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-34})$$

À partir des équations en dessus, il est clair que la valeur du bowing de la constante élastique C_{11} est plus importante que les valeurs du bowing des autres constantes élastiques C_{12} et C_{44} pour l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ avec et sans désordre, se qui signifie une forte variation non linéaire de la constante élastique C_{11} en fonction de la concentration x de Béryllium (figure V-22).

Tableau V-8: Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dyne / cm^2) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

Composé	Les constantes élastiques (10^{11} dyne / cm^2)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
CdSe	9.60999	8.84 ⁽¹¹⁰⁾	5.8750	3.83 ⁽¹¹⁰⁾	4.2638	3.57 ⁽¹¹⁰⁾
		8.81 ⁽¹²⁰⁾		5.36 ⁽¹²⁰⁾		2.74 ⁽¹²⁰⁾
		11.0 ⁽⁴⁰⁾		6.66 ⁽⁴⁰⁾		5.03 ⁽⁴⁰⁾
$\text{Be}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Se}$	10.2226*	-	6.2383*	-	4.5426*	-
	10.1422**	-	6.1893**	-	4.4954**	-
$\text{Be}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Se}$	11.5985*	-	7.0524*	-	5.1690*	-
	11.4591**	-	6.9676**	-	5.088**	-
$\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$	13.2074*	-	8.0007*	-	5.9016*	-
	13.0359**	-	7.8968**	-	5.8034**	-
$\text{Be}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Se}$	15.0940*	-	9.1086*	-	6.7605*	-
	14.9208**	-	9.004**	-	6.6628**	-
$\text{Be}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{Se}$	17.3108*	-	10.4050*	-	7.7687*	-
	17.1933**	-	10.334**	-	7.7036**	-
BeSe	18.5614	15.17 ⁽¹²¹⁾	11.1340	5.33 ⁽¹²¹⁾	8.3369	5.37 ⁽¹²¹⁾
		14.9 ⁽¹²²⁾		5.9 ⁽¹²²⁾		8.1 ⁽¹²²⁾
		14.97 ⁽¹²³⁾		8.24 ⁽¹²³⁾		4.02 ⁽¹²³⁾

*Nos calculs sans désordre.

**Nos calculs avec désordre

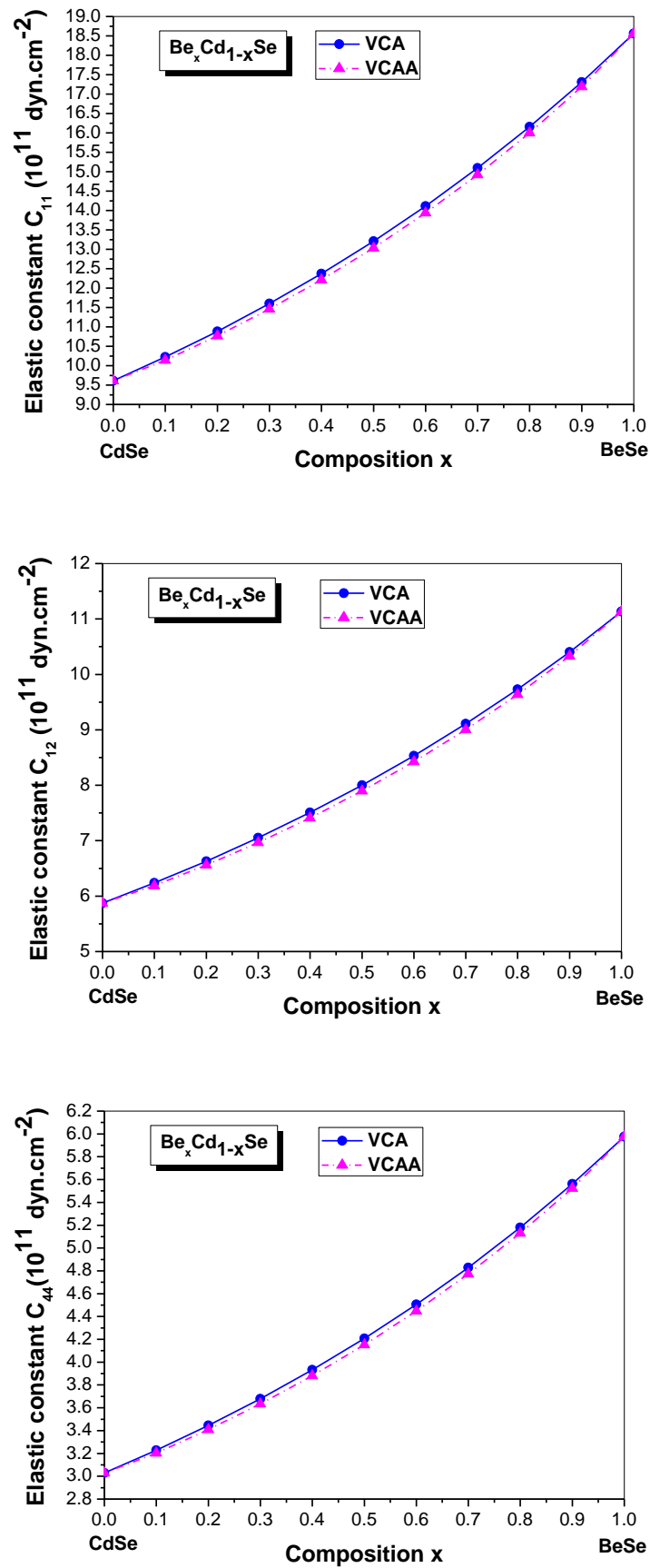


Figure V-21: Les variations des constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} en fonction de la concentration x de Béryllium: sans désordre (VCA) et avec désordre (VCAA) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

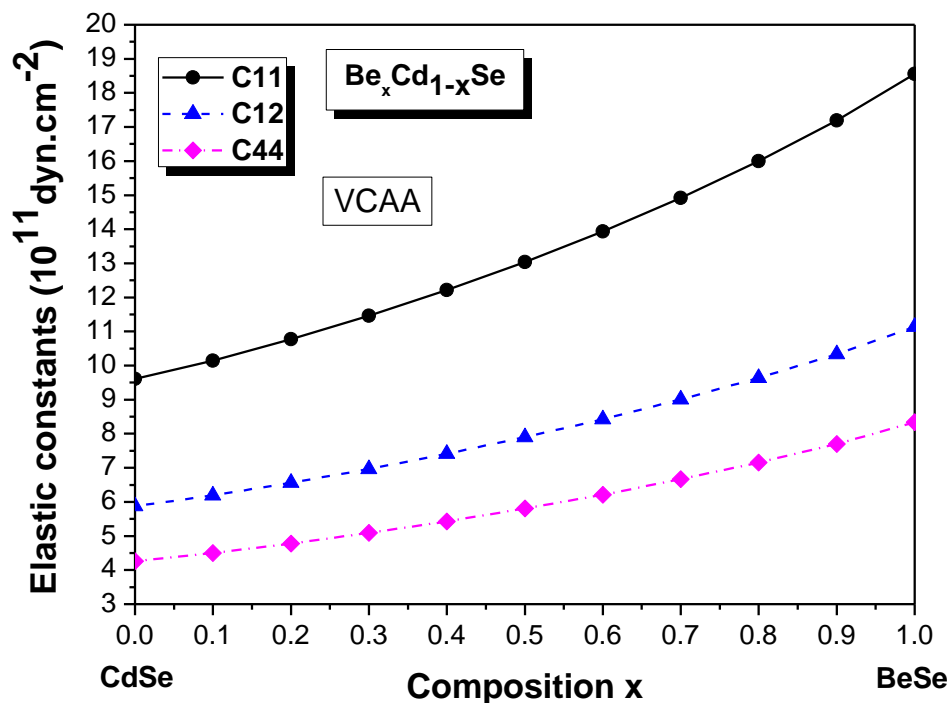
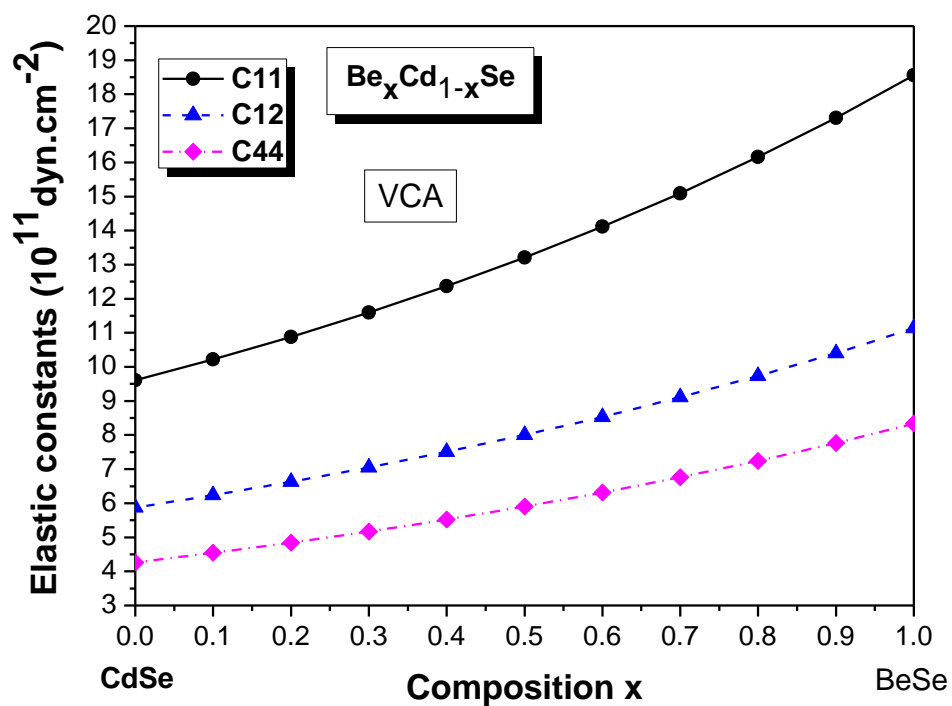


Figure V-22: Comparaison entre les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de concentration x de Béryllium de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$, avec et sans désordre.

V.3.2. Module de compressibilité B et les constantes de force:

Les valeurs du module de compressibilité B et celles des constantes de force α et β calculées sont représentées dans le tableau V-09.

On remarque qu'il ya une augmentation du module de compressibilité B et des constantes de force α et β en fonction de la concentration x de Béryllium en allant du composé CdSe au composé BeSe. On remarque aussi que l'effet de désordre fait diminuer ces paramètres.

Les résultats obtenus pour les trois paramètres sont en accord avec les valeurs disponibles [18, 26]. Pour le module B, les résultats trouvés pour les composés binaires CdSe et BeSe sont respectivement 5.07 et 9.36. Et les valeurs disponibles pour CdSe sont 5.5 et 5.4 [124, 125] et 9.22, 9.12, 8.16, 9.88 et 8.60 pour BeSe [121, 122, 126, 127] où l'accord entre les valeurs calculées et celles trouvées est dans l'intervalle [92.18%-93.88%] pour le composé CdSe, et [98.5%-97.44%-87.17%-94.73%-96.97%] pour le composé BeSe.

Pour l'alliage $\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$, les calculs obtenus sont 7.21 (VCA) et 6.03 (VCAA). Et les données trouvées dans les littératures sont 5.61 et 6.31 [18,27], où l'accord avec les données disponibles est dans l'intervalle [77.81% - 87.52%] si on tient compte de l'effet du désordre et dans l'intervalle [93%-95.56%] sans désordre.

Les résultats calculés de la constante de force α pour les composés binaires CdSe et BeSe sont 30.06 et 49.09 respectivement et les données disponibles sont 35.38 pour CdSe, 56.96 et 56.19 pour BeSe [121, 128, 129]. L'accord entre ces derniers et les résultats trouvés 84.96% pour le composé CdSe, et dans l'intervalle [86.18%-87.36%] pour le composé BeSe.

Et pour la constante de force β , les résultats calculés des composés binaires CdSe et BeSe sont respectivement 3.17 et 5.18. Les autres valeurs disponibles dans la littérature [129, 130] sont 3.16 et 3.12 pour CdSe, 5.33 et 5.44 pour BeSe avec un accord entre les résultats trouvés et les données disponibles est dans l'intervalle [99.68%-98.42%] pour le composé CdSe, et dans l'intervalle [97.18%-95.22%] pour le composé BeSe.

Les résultats trouvés pour le module de compressibilité B sont tracés dans la figure V-23. On observe que le module de compressibilité B augmente linéairement en fonction de la concentration x de Béryllium sans tenir compte à l'effet de désordre compositionnel, et cette augmentation devient non linéaire si on prend en considération à l'effet du désordre. Donc ce dernier est important et on ne peut pas le négligé. Cette figure est semblable à celle étudiée dans les autres travaux [27].

La courbe est une interpolation quadratique exprimée par les relations suivantes:

$$B = 5.0718 + 4.2928x - 5.8275 \cdot 10^{-5} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-35})$$

$$B = 4.9388 - 0.2494x + 4.5421x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-36})$$

Tableau V-9: Module de compressibilité B en (10^{11} dyne / cm^2) et les constantes de force d'élongation α et de recourbement β en (N/m) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

Composé	B (10^{11} dyne/ cm^2)		α (N/m)		β (N/m)	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
CdSe	5.0718	5.5 ⁽¹²⁴⁾ , 5.4 ⁽¹²⁵⁾	30.0606	35.38 ⁽¹²¹⁾	3.1773	3.16 ⁽¹²⁹⁾ 3.128 ⁽¹³⁰⁾
$\text{Be}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Se}$	5.5011* 4.7932**	-	31.9643* 28.8253**	-	3.3785* 3.0467**	-
$\text{Be}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Se}$	6.3596* 5.2784**	-	35.7716* 30.9767**	-	3.7810* 3.2741**	-
$\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$	7.2182* 6.0384**	5.6128 ⁽²⁷⁾ 6.319 ⁽¹⁸⁾	39.5790* 34.3473**	-	4.1834* 3.6304**	-
$\text{Be}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Se}$	8.0767* 6.9955**	-	43.3864* 38.5914**	-	4.5858* 4.0790**	-
$\text{Be}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{Se}$	8.9352* 8.2274**	-	47.1937* 44.0547**	-	4.9883* 4.6565**	-
BeSe	9.3645	9.22 ⁽¹²⁶⁾ , 9.12 ⁽¹²⁷⁾ 8.16 ⁽¹²⁷⁾ , 9.88 ⁽¹²²⁾ 8.608 ⁽¹²¹⁾	49.0974	56.967 ⁽¹²⁸⁾ 56.19 ⁽¹²⁹⁾	5.1895	5.33 ⁽¹²⁹⁾ 5.445 ⁽¹³⁰⁾

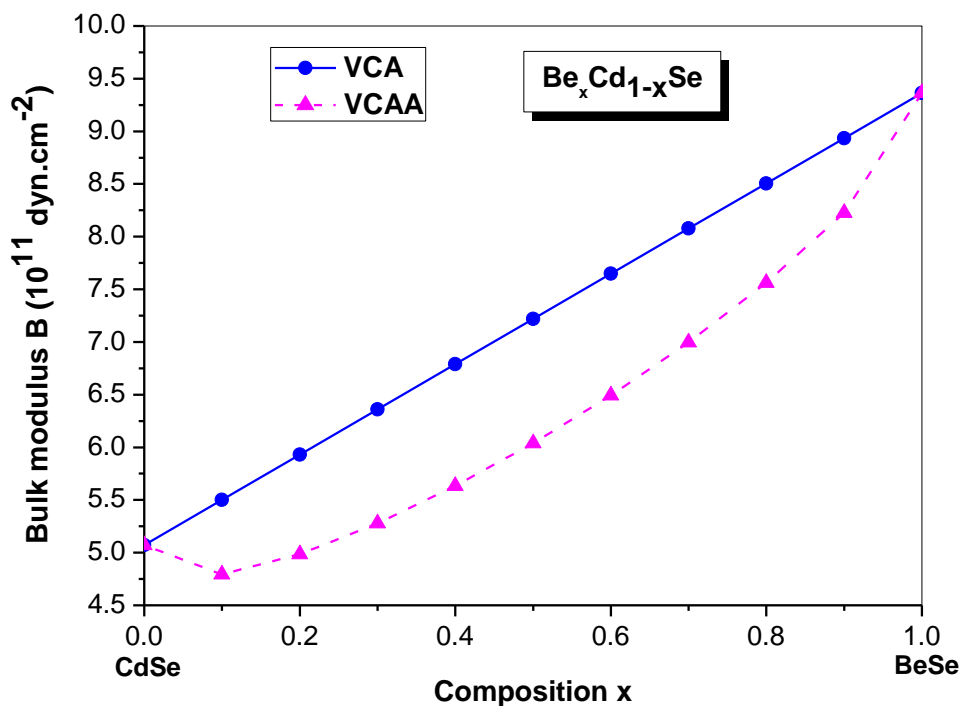


Figure V-23: La variation du module de compressibilité B de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium, avec et sans désordre.

La figure V-24 présente la variation des constantes de force d'élongation α et de recourbement β de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$. Ces constantes augmentent d'une manière presque linéaire en fonction de la concentration x de Béryllium. On constate que les deux constantes sont affectées par l'effet de désordre compositionnel et on ne peut pas le négligé.

Les expressions analytiques de ces courbes sont données par les relations suivantes:

$$\alpha = 30.0606 + 19.0368x - 3.5527 \cdot 10^{-15} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-37})$$

$$\alpha = 29.4709 - 1.1062x + 20.143x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-38})$$

$$\beta = 3.1773 + 2.0122x - 6.6613 \cdot 10^{-16} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-39})$$

$$\beta = 3.1149 - 0.1169x + 2.1291x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-40})$$

À partir des relations en dessus il est clair que la valeur de bowing de la constante de force d'élongation α est plus importante que le bowing de la constante de force de recourbement β pour l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, se qui signifie une forte variation non linéaire de la constante de force d'élongation α en fonction de la concentration x de Béryllium donc la constante de force α est plus affectée par l'effet de désordre compositionnel que la constante de force β (figure V-25).

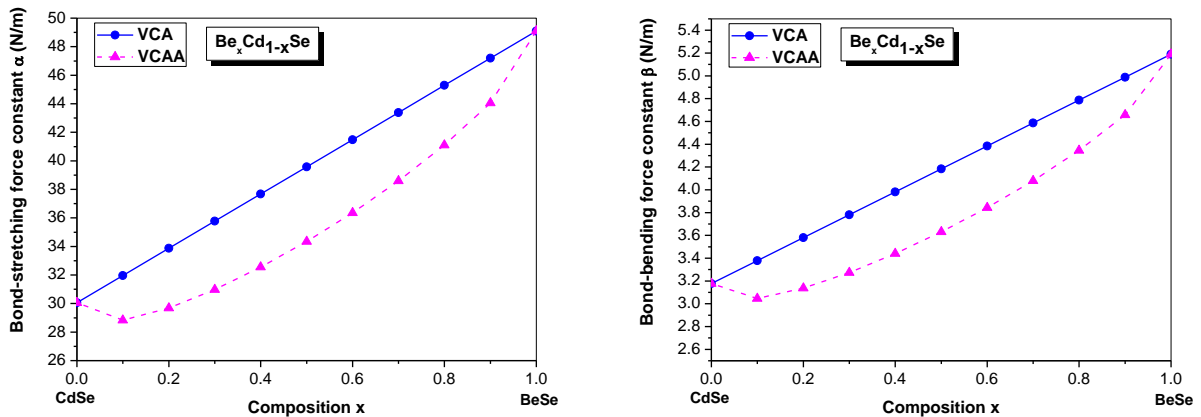


Figure V-24: La variation des constantes de force α et β de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium, avec et sans désordre.

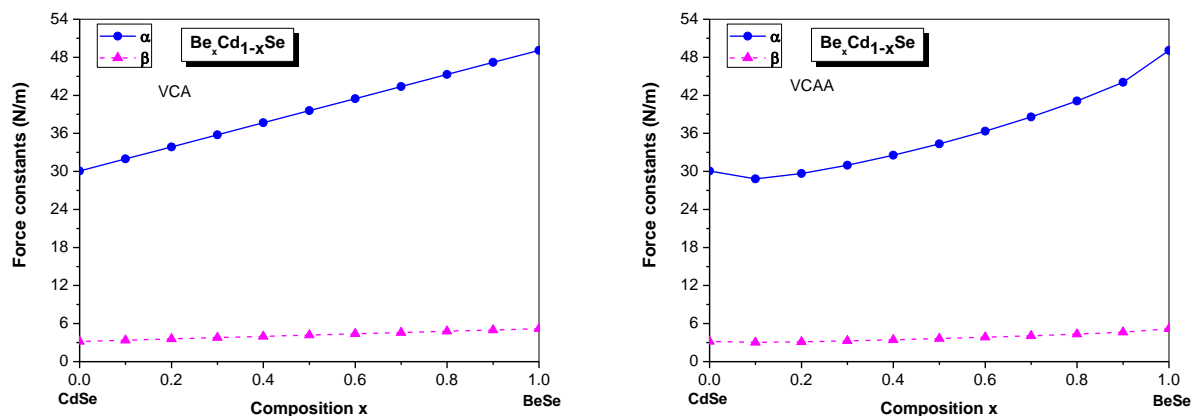


Figure V-25: Comparaison entre les constantes de force α et β de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de la concentration x de Béryllium, avec et sans désordre.

V.3.3. Modules de cisaillement, Young, coefficient de Poisson et le facteur d'anisotropie:

Les résultats du module de cisaillement, module de Young, coefficient de Poisson et facteur d'anisotropie calculés sont représentés dans le tableau V-10.

On constate qu'il y a une augmentation des modules de cisaillement G , Young G et le facteur d'anisotropie A , en fonction de la concentration x de Béryllium en allant du composé CdSe au composé BeSe. Par contre il y a une diminution de coefficient de Poisson ν en fonction de la concentration x de Béryllium. On remarque aussi que l'effet du désordre fait diminuer les modules de cisaillement G , Young G et le facteur d'anisotropie A et il fait augmenter le coefficient de Poisson ν . Ces résultats sont comparés avec d'autres travaux disponibles, et ils sont satisfaisants.

Les valeurs du Module de Young Y obtenues 5.15 pour CdSe; 10.21 pour BeSe. Les valeurs disponibles de Y pour CdSe et BeSe sont 5.2, 4.58 et 3.68 pour le composé CdSe; 9.39 et 13.70 pour le composé BeSe [37, 131-133]. On note que pour CdSe, l'accord entre nos résultats et les données disponibles est [99%-88.93%-74.45%], et dans l'intervalle [91.96%-74.5%] pour BeSe.

Les valeurs du Module de cisaillement G obtenues 1.86 pour CdSe; 3.71 pour BeSe. Les valeurs disponibles de G pour CdSe et BeSe sont 1.02 pour le composé CdSe; 3.12 et 3.99 pour le composé BeSe [37, 79, 133]. On note que pour CdSe, l'accord est 54.83%, et dans l'intervalle [84%-92.98%] pour BeSe.

Les calculs du coefficient de Poisson ν obtenues 0.3794 pour CdSe; 0.3749 pour BeSe. Les valeurs disponibles de ν pour CdSe et BeSe sont 0.35 pour le composé CdSe; 0.19 pour le composé BeSe [131, 133]. Noter que, l'accord est 92.25% pour CdSe, et pour BeSe est 51.11%.

Les résultats du facteur d'anisotropie A obtenues 0.61 pour CdSe; 0.62 pour BeSe. Les valeurs disponibles de A pour CdSe et BeSe sont 0.45 et 0.50 pour le composé CdSe; 0.61 et 0.50 pour le

composé BeSe [37, 79, 131, 133]. Où l'accord est dans l'intervalle [74.11%-81.9%] pour CdSe, et dans l'intervalle [99.14%-81.3%] pour BeSe.

Comme il est clair dans les figures V-26 et V-27, les modules de cisaillement G et de Young Y augmentent non linéairement en fonction de la concentration de Béryllium. L'effet du désordre compositionnel influe légèrement sur les deux modules.

Les expressions analytiques des courbes données comme suit:

$$G = 1.8752 + 1.0812x + 0.7488x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-41})$$

$$G = 1.8752 + 0.9434x + 0.8798x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-42})$$

$$Y = 5.1731 + 2.9715x + 2.0447x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-43})$$

$$Y = 5.1729 + 2.5925x + 2.4050x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-44})$$

D'après ces expressions, la valeur de bowing du module de Young avec et sans désordre pour l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ est supérieure à celle du module de cisaillement donc l'effet de la composition est important sur le module de Young que sur le module de cisaillement.

Tableau V-10: Modules de cisaillement (G), Young (Y) en (10^{11} dyne / cm^2) le coefficient de Poisson ν et le facteur d'isotropie (A) de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

Composés	G (10^{11} dyne/ cm^2)		Y (10^{11} dyne/ cm^2)		ν		A	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres	Cal.	Autres
CdSe	1.8675	1.02 ⁽⁷⁹⁾	5.1521	5.2 ⁽¹³¹⁾ , 4.58 ⁽¹³²⁾ , 3.68	0.3794	0.35 ⁽¹³¹⁾	0.6166	0.457 ⁽⁷⁹⁾ 0.505 ⁽¹³¹⁾
$\text{Be}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Se}$	1.9921* 1.9765**	-	5.4942* 5.4510**	-	0.3790* 0.3797**	-	0.6171* 0.6163**	-
$\text{Be}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Se}$	2.2731* 2.2458**	-	6.2652* 6.1898**	-	0.3781* 0.3792**	-	0.6180* 0.6168**	-
$\text{Be}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Se}$	2.6033* 2.5695**	-	7.1709* 7.0778**	-	0.3772* 0.3784**	-	0.6190* 0.6177**	-
$\text{Be}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Se}$	2.9927* 2.9584**	-	8.2381* 8.1436**	-	0.3763* 0.3774**	-	0.6199* 0.6187**	-
$\text{Be}_{0.9}\text{Cd}_{0.1}\text{Se}$	3.4529* 3.4295**	-	9.4984* 9.4339**	-	0.3754* 0.3761**	-	0.6208* 0.6201**	-
BeSe	3.7136	3.1277 ⁽³⁷⁾ 3.997389 (133)	10.212	9.3915 ⁽³⁷⁾ 13.706921 (133)	0.3749	0.19162 (133)	0.6213	0.616 ⁽³⁷⁾ 0.50508 (133)

*Nos calculs sans désordre.

**Nos calculs avec désordre.

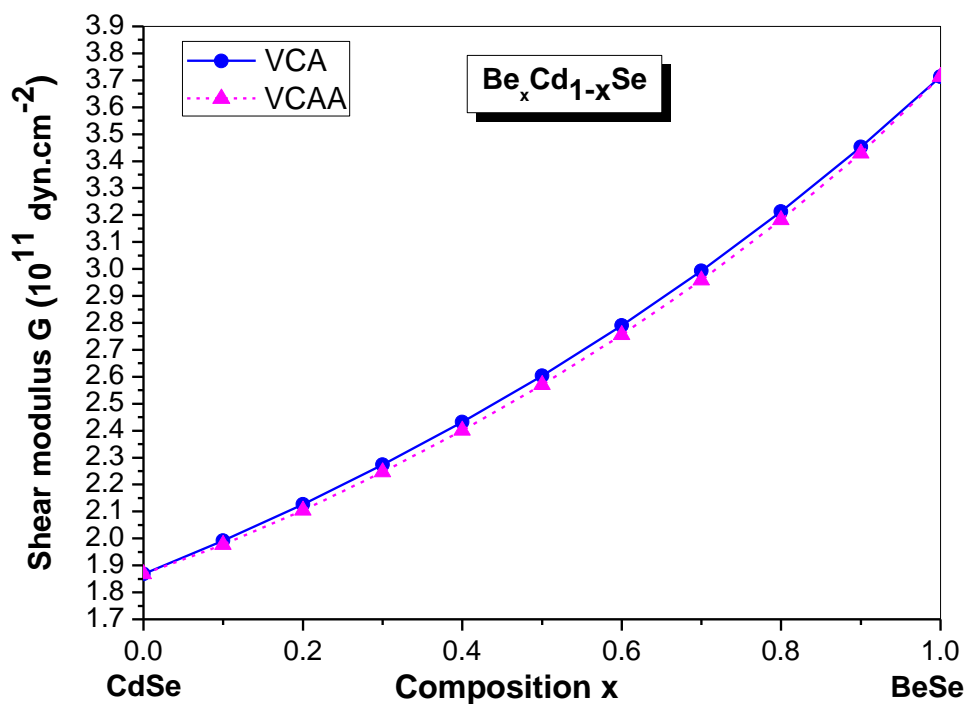


Figure V-26: La variation du module de cisaillement (G) en ($\text{dyne} / \text{cm}^2$), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.

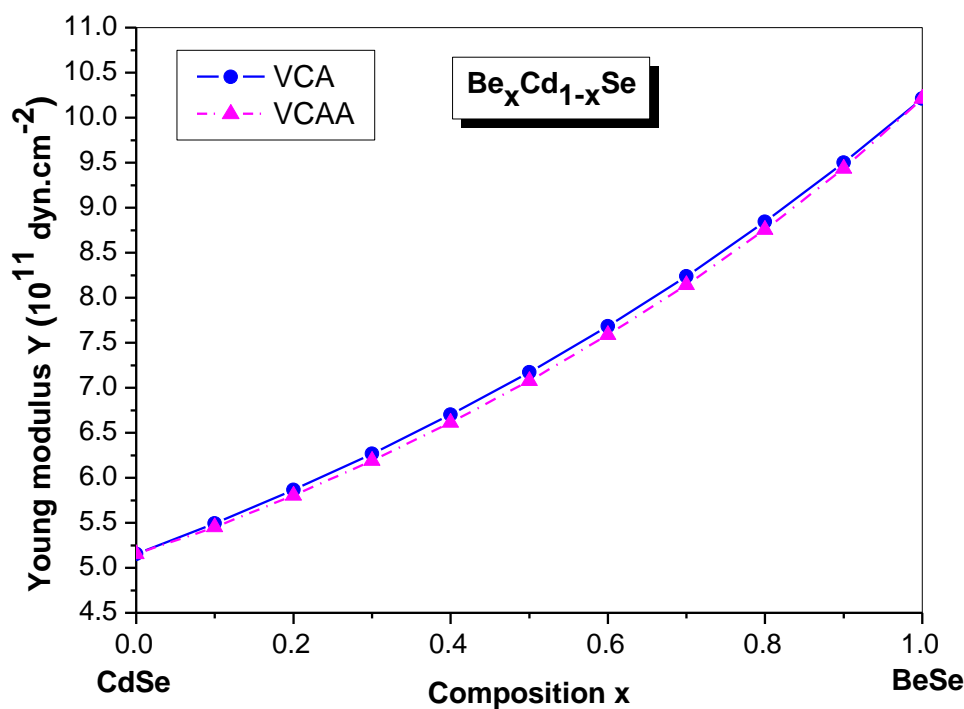


Figure V-27: La variation du module de Young (Y) en ($\text{dyne} / \text{cm}^2$), avec et sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ en fonction de la concentration x de Béryllium.

La figure V-28 illustre la variation de coefficient de Poisson ν en fonction de la concentration de Béryllium. La figure montre une diminution de ce paramètre avec l'augmentation de la concentration.

Par contre, le facteur d'anisotropie A augmente avec la croissance de la concentration (figure V-29). Le désordre compositionnel influe sur le coefficient de Poisson et le facteur d'anisotropie et on ne peut pas le négliger.

Les courbes des figures V-28 et V-29 sont exprimés par les relations suivantes:

$$\nu = 0.3794 - 0.0044x - 5.8275 \cdot 10^{-5} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-45})$$

$$\nu = 0.3795 + 2.669 \cdot 10^{-4} x - 0.0048x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-46})$$

$$A = 0.6166 + 0.0048x - 5.8275 \cdot 10^{-5} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-47})$$

$$A = 0.6164 + -2.352 \cdot 10^{-4} x + 0.005x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-48})$$

Ces équations prouvent un paramètre de courbure très faible du coefficient de Poisson ν et du facteur d'anisotropie A.

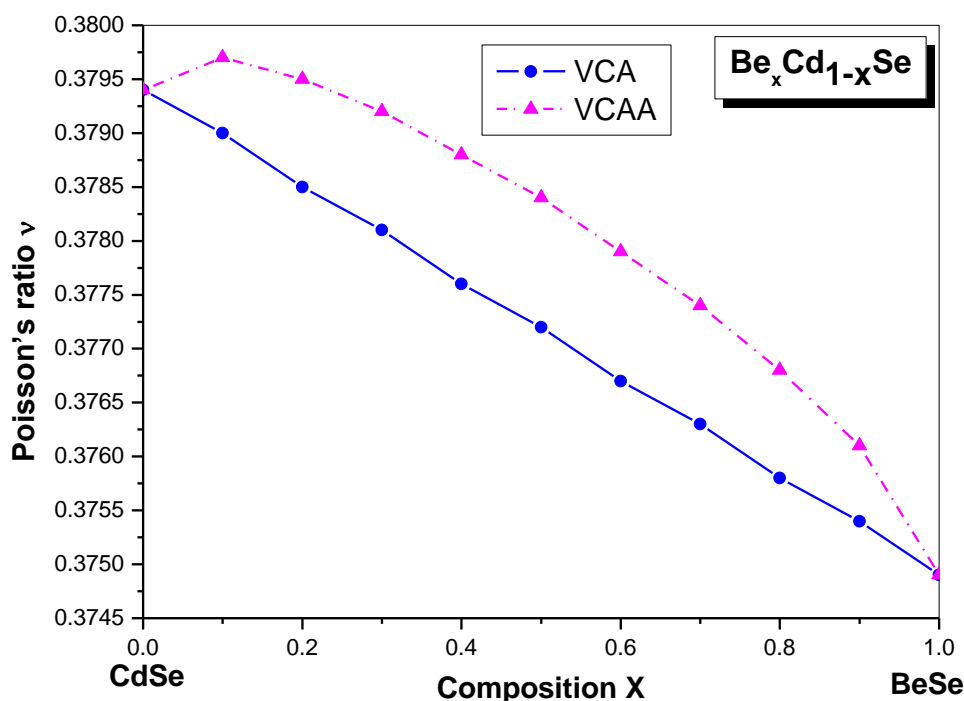


Figure V-28: La variation de coefficient de Poisson ν avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de la concentration x de Béryllium.

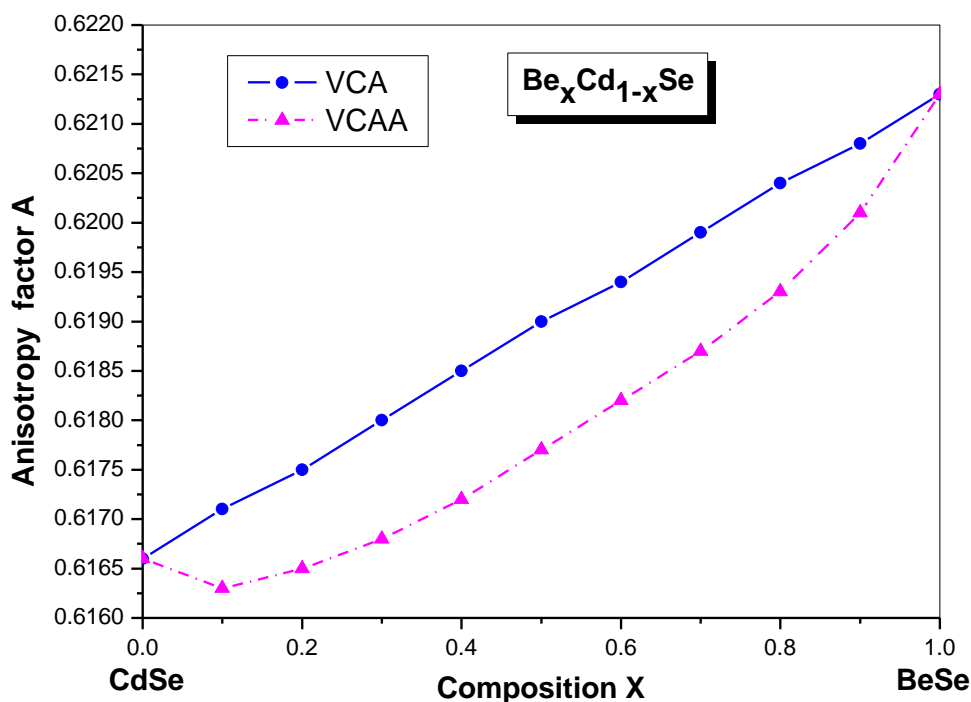


Figure V-29: La variation du facteur d'anisotropie A avec et sans désordre de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$, en fonction de la concentration x de Béryllium.

V.3.4. Facteur de l'ionicté et le paramètre de Kleinman:

Les résultats pour le facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ trouvés sont résumés dans le tableau V-11.

On observe qu'il y a une diminution du facteur de l'ionicté f_i et du paramètre de Kleinman ξ , en fonction de la concentration x de Béryllium en allant du composé CdSe au composé BeSe. On constate aussi que l'effet de désordre fait augmenter ces paramètres.

L'accord entre les résultats obtenus et les données disponibles est acceptable.

Les valeurs du facteur de l'ionicté f_i obtenues 0.63 pour CdSe; 0.61 pour BeSe. Les valeurs disponibles de f_i pour CdSe et BeSe sont 0.69 et 0.68 pour le composé CdSe; 0.26 et 0.66 pour le composé BeSe [37, 129]. On note que pour CdSe, l'accord entre nos résultats et les données disponibles est dans l'intervalle [91%-93.4%], et dans l'intervalle [42.67%-92.5%] pour BeSe.

Les valeurs du paramètre de Kleinman ξ obtenues sont 0.71 pour CdSe; 0.70 pour BeSe. Les valeurs disponibles de ξ pour CdSe et BeSe sont 0.85 pour le composé CdSe; 0.508, 0.43 et 0.505 pour le composé BeSe [55-58]. Où l'accord pour CdSe est 84.28%, et dans l'intervalle [73.8%-60.8%-71.4%] pour BeSe.

Les variations du facteur de l'ionicté f_i et du paramètre de Kleinman ξ en fonction de la concentration de Béryllium avec et sans désordre sont illustrées dans les figures V-30 et V-31 respectivement. Ces derniers prouvent une décroissance linéaire avec l'augmentation de la concentration si on ne prend pas en considération l'effet du désordre. Cette décroissance sera non linéaire si on tient compte de l'effet du désordre, donc les deux paramètres sont affectés par l'effet du désordre et on ne peut pas le négliger.

Les expressions analytiques des courbes du facteur de l'ionicté f_i et du paramètre de Kleinman ξ sont données comme suit:

$$f_i = 0.6361 - 0.0244x - 5.8275 \cdot 10^{-5} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-49})$$

$$f_i = 0.6369 + 0.0014x - 0.0259x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-50})$$

$$\xi = 0.7164 - 0.0092x - 1.9255 \cdot 10^{-16} x^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-51})$$

$$\xi = 0.7167 + 6.1608 \cdot 10^{-4} x - 0.0098x^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-52})$$

Ces équations prouvent un paramètre de courbure très faible pour les deux paramètres se qui est traduit par des courbes presque linéaires.

Tableau V-11: Facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

Composé	f_i		ξ	
	Cal.	Autres	Cal.	Autres
CdSe	0.6361	0.699 ⁽⁴¹⁾ 0.681 ⁽¹²⁹⁾	0.7164	0.85 ⁽¹³⁶⁾
Be _{0.1} Cd _{0.9} Se	0.6337* 0.6377**	-	0.7155* 0.7170**	-
Be _{0.3} Cd _{0.7} Se	0.6288* 0.6349**	-	0.7136* 0.7160**	-
Be _{0.5} Cd _{0.5} Se	0.6239* 0.6306**	-	0.7118* 0.7143**	-
Be _{0.7} Cd _{0.3} Se	0.6190* 0.6251**	-	0.7100* 0.7123**	-
Be _{0.9} Cd _{0.1} Se	0.6141* 0.6181**	-	0.7081* 0.7096**	-
BeSe	0.6116	0.261 ⁽⁴¹⁾ 0.661 ⁽¹²⁹⁾	0.7072	0.508 ⁽¹³⁴⁾ 0.43 ⁽¹³⁵⁾ 0.505 ⁽¹³³⁾

*Nos calculs sans désordre.

**Nos calculs avec désordre.

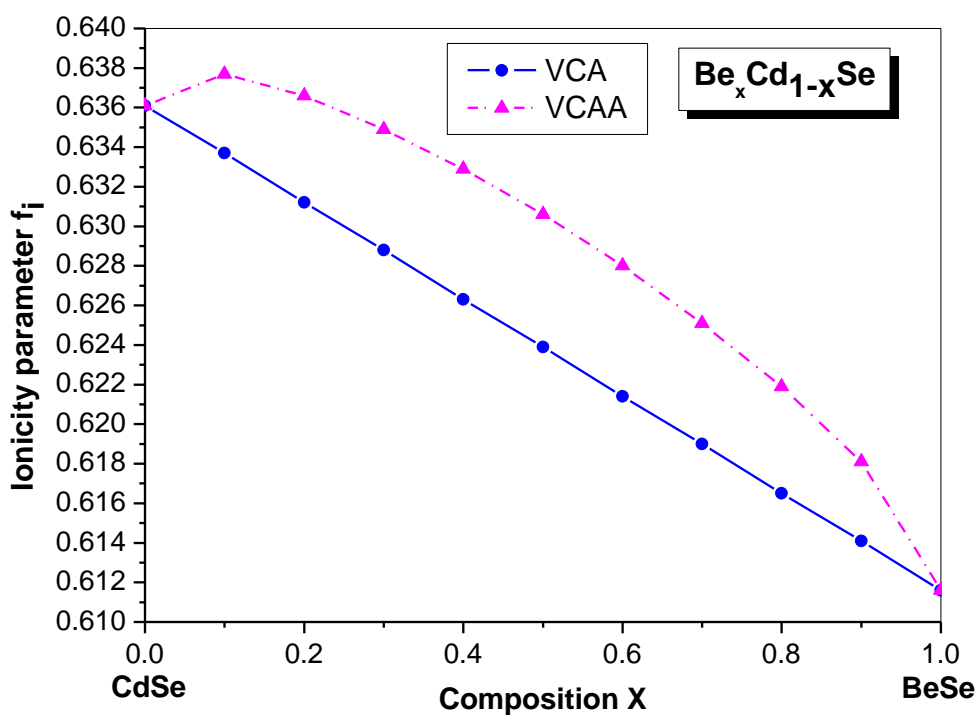


Figure V-30: La variation de facteur d'ionicté f_i de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de concentration x de Béryllium avec et sans désordre.

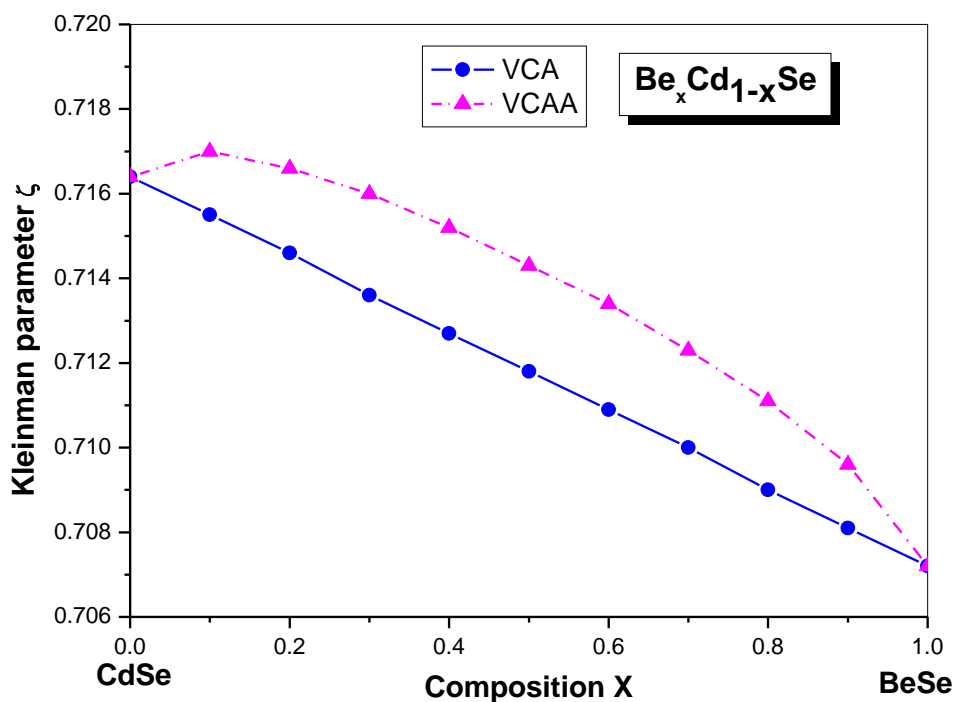


Figure V-31: La variation du facteur de Kleinman ξ de l'alliage ternaire $Be_xCd_{1-x}Se$ en fonction de concentration x de Béryllium avec et sans désordre.

Références:

- [1] B. G. Yacobi, *Semiconductor Materials: An Introduction to Basic Principles*, Ed. Kluwer Academic, New York (2003).
- [2] O. Lupan, T. Pauport, T. L. Bahers, B. Viana, et I. Cioni, *Adv. Func. Mat.* 21 (2011) 3564.
- [3] H. Saheb and A. Bechiri, *Sol. Stat. Phenom.*, 297 (2019) 131.
- [4] A.S. Dissanayake, S.X. Huang, H.X. Jiang et J. Y. Lin, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 13343.
- [5] H.X. Jiang, G. Brown et J. Y. Lin, *J. Appl. Phys.* 69 (1991) 6701.
- [6] M. Ameri, M. Fodil, F. Z. A. Benkabou, Z. Mahdjoub, F. Boufadi et A. Bentouaf, *Mater. Sci. Appli.* 3 (2012) 768.
- [7] R. Pandey et S. Sivaraman, *J. Phys. Chem. Sol.* 52 (1991) 211.
- [8] Y. Nakanishi, T. Ito, Y. Hatanaka et G. Shimaoka, *Appl. Surf. Sci.* 66 (1992) 515.
- [9] H. E. E. Ponce, J. H. Borja, A. R. Rojas, M. C. Sanchez, Y. V. Vorbier, R. R. Bon, J. F. P. Robles et J. G. Hernandez, *Mater. Chem. Phys.* 113 (2009) 824.
- [10] K. S. Ramaiah, Y. K. Su, S. J. Chang, F. S. Juang, K. Ohdaira, Y. Shiraki, H.P. Liu, I. J. Chen et A. K. Bhatnagar, *J. Cryst. Growth* 224 (2001) 74.
- [11] D. Wang, H.P. Jakobson, R. Kou, J. Tang, R.Z. Fineman, D. Yu et Y. Lu, *Chem. Mater.* 18 (2006) 4231.
- [12] R. Mariappan, V. Ponnuswamy et M. Ragavendar, *Optik* 123 (2012) 1196.
- [13] C. I. Wang, Z. Yang, A. P. Periasamy et H.T. Chang, *J. Mater.* 2013 (2013) 1.
- [14] R. Kniproth, J.P. Rabe, J.T. McLesky Jr., D.Y. Wang et S. Kirstein, *Thi. Sol. Fil.* 518 (2009) 295.
- [15] I. Gur, N.A. Fromer et A. P. Alivisatos, *Phys. Chem. B* 110 (2006) 25543.
- [16] S. R. Deo, A. K. Singh, L. P. Deshmukh, L.J. Paliwal, R.S. Singh et R. Adhikari, *J. Chem. Soc.* 18 (2014) 327.
- [17] O. Maksimov, S. P. Guo, et M. C. Tamargo, *Phys. Stat. Sol. B* 229 (2002) 1005.
- [18] D. Bensaid, M. Ameri, N. Benseddik, A. Mir, N. Bouzouira, et F. Benzoudji, *Inter. J. Met.* 2014 (2014) 1.
- [19] N. Salmi & W. Torchane, mémoire de master, université de Tébessa (Algérie) 2019.
- [20] P. J. L. Hervé et L. K. J. Vendamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [21] S. Kasap and P. Capper, *Handbook of electronic and photonic material*, Ed. Springer Science (2017).
- [22] S. Li. Sheng, *Semiconductor physical electronics*, 2nd Ed. Springer (2006).
- [23] I. H. Calderón, *II-VI Semiconductor Materials and their Applications*, Ed. Maria C. Tamargo, Taylor and Francis, New York (2002).

- [24] N. Lebga, thèse doctorat, Algerie (2011).
- [25] M.T. Hussein, B. A. Hassan T. K.A. Raheem and H. B. Jasim, *Inter. J. Appli. Innov. Engin. Manag. (IJAIEM)*, 2 (2013) 70.
- [26] R. Inakpenu, C. Bamba, I. H. Nwigboji, L. Franklin, Y. Malozovsky, G.L. Zhao and D. Bagayoko, *J. Mod. Phys.* 8 (2017) 552.
- [27] K. Hacini, Z. Chouahda, A. Djedid, H. Meradji, S. Ghemid, F. E. Hassan and R. Khenata, *Mater. Sci. Sc. Proc.* 26 (2014) 642.
- [28] J. M. Drolot, J. P. Bailon et J. Masounave, *Des matériaux*, Ed. L'école polytechnique de Montréal (1991).
- [29] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Ed. Dunod, Paris (1983).
- [30] P. Riblet, thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg (1995).
- [31] B. Martinez, thèse de doctorat, INSP, Paris (2019).
- [32] T. B. Massalski, H. Okamoto, P. R. Subramanian, and L. Kacprzak, *Cd-Se (Cadmium-Selenium), Binary Alloy Phase Diagrams*, 2nd Ed., ASM International, Materials Park, OH (1990).
- [33] R. C. Sharma and Y.A. Chang, *J. Phas. Equili.* 2 (1996) 140.
- [34] Y. Liu, Z. Kang, G. Sheng, L. Zhang, J. Wang and Z. Long, *J. Electron. Mater.* 7 (2012) 1915.
- [35] H. Okamoto, *J. Phas. Equili. Diff.* 34 (2013) 430.
- [36] I. H. Calderón, *Sc, Mater. App.* 12 (2002) 113.
- [37] J. Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices - Introduction to Physics and Simulation*, Ed. Academic Press, USA (2003).
- [38] D. P. Rai, M.P. Ghimire and R. K. Thapa, *Sc. Phys. Techn.* 48 (2014) 1447.
- [39] O.B. D. Fahlman, *Materials Chemistry*, Ed. Springer (2007).
- [40] F. Benkabou, *Mod. Phys. Lett. B* 19 (2005) 849.
- [41] S. Adachi, *Properties of semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons (2009).
- [42] J. Wang, M. Isshiki, *Handbook of Electronic and Photonic Materials - Wide-Bandgap II-V semiconductor: Growth and properties*. Ed. Springer (2007).
- [43] H. Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, 4 Ed. Masson (1998).
- [44] J. W. Edmund, E. M. Dale, R. N. Donald, B. E. Arthur, F. G. John and T. F. Kucch, *J. Cryst. Grow.* 148 (1995) 63.

- [45] P. P. Hankare, V. M. Bhuse, K. M. Garadkar, S. D. Delekar and P. R. Bhagat, *Sc. Sci. Tech.* 19 (2004) 277.
- [46] G. P. Banfi, V. Degiorgio and H. M. Tan, *J. Opt. Soc. Am. B* 12 (1995) 621.
- [47] A. Van Calster, A. Vervaet, I. De Rycke, J. De Baets and J. Vanfleteren, *J. Cryst. Grow.* 86 (1989) 924.
- [48] T. Gruszecki and B. Holmstrom, *Sol. Ener. Mater. Sol. Cells*, 31 (1993) 227.
- [49] L. P. Deshmukh, C.B. Rotti and K. M. Garadkar, *Mater. Chem. Phys.* 50 (1997) 45.
- [50] A. Waag, F. Fischer, H. J. Lugauer, T. Litz, J. Laubender, U. Lunz and U. Zehnder, *J. Appl. Phys.* 80 (1996) 792.
- [51] M. A. Mohammadi and A. Mokhtari, *Appli. Mech. Mater.* 116 (2011) 1264.
- [52] A. A. Wronkowski, F. Firszt, S. Łęgowski, H. Męczyńska, A. Marasek and W. Paszkowicz, *Phys. Stat. Sol.* 4 (2004) 641.
- [53] S. M. Sze, *Semiconductor devices – Physics and technology*, 2nd Ed. John Wiley & Sons (2001).
- [54] www.Research Gate.Net.
- [55] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors*, Springer Series in Solide-State Sciences, Ed. Springer, New York (1989).
- [56] <https://fr.m.wikipedia.org>.
- [57] H. Aourag, *Pseudo-potential Method theory and practice*, Winter College on Computational condensed matter physics, University of Sidi- Bel-Abes (1995).
- [58] J. E. Bernard and A. Zunger, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 3199.
- [59] K. Kassali and N. Bouarissa, *Soli. Stat. Elec.* 44 (2000) 501.
- [60] I. Vurgaftman and J. R. Mey, *J. appli. Phys.* 89 (2001) 11.
- [61] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 4869.
- [62] S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm and C.K. Kim, *J. Phys. Cond. Matt.* 2 (1990) 3253.
- [63] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285.
- [64] N. Bouarissa, *Phyl. Mag. B* 80 (2000) 1743.
- [65] N. Bouarissa, *J.Phys. Chem.Soli.* 62 (2001)1163.
- [66] N. Bouarissa, *Mater. Sci. Eng. B* 86 (2001) 53.
- [67] N. Bouarissa, *Sup. latti. Mic. struc.* 26 (1999). 280.
- [68] N. Bouarissa et K. Kassali, *Phys. Stat. Sol. B* 228 (2001) 665.
- [69] B. Chalmers, *Structure et Propriétés des Solides*, Ed Masson, Paris, New York, (1987).
- [70] N. Nowak, *Thèse de doctorat*, Université de Bordeaux I, France (2010).
- [71] E. Hecht, *Optics*, Addis Wesl. Pub. Comp. 13 (1997) 978.

- [72] www.Sbarbati.Wordpress.com.
- [73] www.Gutenberg1point5.Canalblog.com.
- [74] C. Nego et H. Nego, physique des semi-conducteurs, 3^{ième} Ed. Dunod (2007).
- [75] Y. Yao, T. Kuroda, D. N. Dirin, A. A. Irkhina, R. B. Vasiliev and K. Sakoda, *Exci. Stat. of II-VI tetra. shap. nanocr*, 3 (2013) 977.
- [76] V. Magnin, Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille, France (1998).
- [77] P. J. L. Herve and L. K. J. Vandamme, *Infra. Phys. Techno.* 35 (1994) 609.
- [78] D. Sénéchal, *Physique subatomique*, Ed. Université de Sherbrooke (2010).
- [79] S. Adachi, *Physical properties of III-V semiconductors compounds*, Ed. A Wiley-InterScience Publication, Japan, (1992).
- [80] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Ed. John Wiley & Sons (2005).
- [81] G. A. Samara, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 3494.
- [82] S. Y. Davydov and S. K. Tikhonov, *semicond.* 32 (1998) 947.
- [83] Y. Quere, *Physique des Matériaux*, Ed. Ellipses (1988).
- [84] M. F. Ashby et D.R.H. Jones, *Matériaux: propriétés et applications*; Ed. Dunod (1991).
- [85] F. Sidoroff, *Mécanique et thermodynamique des milieux continus*, Cours du OEA de mécanique de L'école Centrale de Lyon (1993).
- [86] J. Perez, *Physique et mécanique des polymères amorphes*; Ed. La Voisier TEC DOC (1992).
- [87] W. S. Stupnicka, *Kluwer. Acad. Publi.* 1 (1991).
- [88] S. G. Shen, *J. Phys. Condens. Matter.* 6 (1994) 8733.
- [89] A. S. Verma, B. K. Sarkar and V. K. Jindal, *Phys. B* 405 (2010) 1737.
- [90] A. S. Verma, *Phys. Lett. A* 372 (2008) 7196.
- [91] M.W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. Porter, H. Wang and S. Chakraborty, *J. Appl. Phys.* 88 (2000) 6313.
- [92] T. Kobayasi and H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci, Tokyo University.* 2 (1993) 7.
- [93] N. Bouarissa, T. kobayasi, and H. Nara. *Sol. Stat. Com.* 96 (1995) 689.
- [94] A. Mujica, A. Munoz, S. Radescu and R.J. Needs, *Phys. Stat. Sol. B* 211 (1999) 345.
- [95] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* 17 (1984) 6287.
- [96] N. Bouarissa and M. Boucenna, *Phys. Scr.* 79 (2009) 15701.
- [97] J. R. Chelikowsky, T. J. Wagner A. Tin and J. H. Weaver, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 9644.
- [98] N. Bouarissa, R. N. West and H. Aourag, *Phys. Stat. Sol. b* 188 (1995) 723.

- [99] N. E. Christensen, S. Satpathy and Z. Pawlowska, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 1032.
- [100] L. W. Wang and A. Zunger, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 17398.
- [101] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet, W. Richter, M. Cardona, V. Wagener, H. Lugauer, F. Fischer, T. Gerhard and M. Keim, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 10071.
- [102] K. Ichino, Y.-H. Wu, Y. Kawakami and S. Fujita, *J. Cryst. Grow.* 117 (1992) 527.
- [103] D. Singh and Y.P. Varshni, *Solid. Stat. Com.* 55(1985) 6.
- [104] N. Bouarissa, A. Tanto, H. Aourag and T. B. Meziane, *Compu. Mater. Sci.* 3 (1995) 430.
- [105] F. Benmakhlouf, A. Bechiri and N. Bouarissa, *Sol. Sta. Elec.* 47 (2003) 1335.
- [106] N. Bouarissa, N. Amrane and H. Aourag, *Infra. Phys. Techn.* 36 (1995) 755.
- [107] N. Bouarissa, and H. Aourag, *Phys. Stat. Sol. b* 190 (1995) 227.
- [108] H. Aourag, F. Sellal and B. Khelifa, *Mater. Chem. Phys.* 30 (1992) 229.
- [109] L. Hannachi and N. Bouarissa, *Supe.latt. Mic.stru.* 44 (2008) 794.
- [110] L. Hannachi and N. Bouarissa, *Phys. B* 404 (2009) 3650.
- [111] J. Singh, *Physics of semiconductors and their heterostructures*, Ed. Mc. Graw - Hill (1993).
- [112] N. A. Hamizi and M. R. Johan, *Inter. J. Elec. chem. Sci.* 7 (2012) 8458.
- [113] S. Ouendadji, S. Ghemid, H. Meradji and F. E. H. Hassan, *Comp. Mater. Sci.* 48 (2010) 206.
- [114] W. M. Haynes, David R. Lide and Thomas J. Bruno, *Handbook of Chemistry and Physics*, 97th Ed. CRC Press, Taylor & Francis Group, New York (2017).
- [115] S. Adachi, *Handbook on physical properties of semiconductors*, Vol. 3, Ed. Kluwer Academic Publishers, New York (2004).
- [116] R. Khenata, *Sol. St. Elec.* 50 (2006) 1382.
- [117] C. Becker, *Proc. 23rd international conference on Physics of Semiconductor*, Ed. World Scientific, Berlin–Singapore (1996).
- [118] J. Geurts, *Proc. 24th international conference on Physics of Semiconductor*, Ed. World Scientific, Singapore–Jerusalem (1998).
- [119] S. Laref and A. Laref, *J. Phys. Chem. C* 115 (2011) 12604.
- [120] E. Deligoz, K. Colakoglu and Y. Ciftci, *Phys. B* 373 (2006) 124.
- [121] F.E.H. Hassan and H. Akbarzadeh. *Comput. Mater. Sci.* 35 (2006) 423.
- [122] M. G. Díaz, P. R. Hernández, and A. Muñoz, *Phys. Rev. B* 55 (1997) 14043.
- [123] S. D. Lang, O. Pages, L. Lang and J. Hugel, *Phys. Stat. Sol. B* 229 (2002) 563.
- [124] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Ed. Springer, Berlin, Germany (2001).

- [125] Y. H. Chang, C. H. Park, K. Sato, H. K. Yoshida and J. Kore. Phys. Soc. 49 (2006) 203.
- [126] H. Luo, K. Ghandehari, R. G. Greene, A. L. Ruoff, S. S. Trail, and F. J. DiSalvo, Phys. Rev. B 52 (1995) 7058.
- [127] A. V. Postnikov, O. Pagès and J. Hugel, Phys. Rev. 71 (2005) 1152.
- [128] R. R. Reddy, Y. N. Ahamed, P. Abdul Azeem, K. R. Gopal, B. Sasikala Devi, T. V. R. Rao and S. H. Bcher, Indi. J. Phys. A 77 (2003) 237.
- [129] V. Kumar, J. Phys. Chem. Sol. 61(2000) 91.
- [130] H. Neumann, Cryst. Res. Technol. 24 (1989) 619.
- [131] M. Shakili, M. Zafar, S. Ahmed, M. R. R. Hashmi, M. A. Choudhary and T. Iqbal, Chin. Phys. B 25 (2016) 761.
- [132] S. Sharma, A. S. Verma, B. K. Sarkar, R. Bhandari and V. K. Jindal, AIP Confer. Proce, 229 (2011) 1393.
- [133] F. Kong and G. Jiang, Phys. B 404 (2009) 3935.
- [134] C. M. I. Okoye. Eur. Phys. J. B 39 (2004) 5.
- [135] M. G. Diaz, P.R. Hernandez and A. Munoz. Phys. Rev. B 55 (1997) 14043.
- [136] P. K. Saini, D. Singh and D.S. Ahlawat, International Journal Of Engineering Research and Technology (IJERT), Ed. AMRP - Conference Proceedings (2013).



Conclusion générale

Conclusion générale

Le présent travail porte sur l'étude des propriétés électroniques, optiques, diélectriques et mécaniques de l'alliage ternaire semi-conducteur $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$. La méthode utilisée est celle du pseudo-potentiel empirique local (EPM), couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) qui inclut l'effet du désordre par l'introduction d'un potentiel effectif du désordre. Cette méthode est associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM) et le modèle de Verma.

Nous avons calculés : les gaps d'énergies, les structures de bandes électroniques, les densités de charges électroniques, l'indice de réfraction, les constantes diélectriques, les constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}), le module de compressibilité B , le module de cisaillement G , le module de Young Y , le coefficient de poisson ν , le facteur d'anisotropie A , l'ionicité f_i , le paramètre de Kleinman ξ et les constantes de force α et β des les composés binaires CdSe , BeSe et leurs alliages ternaires $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$. Nous avons étudiés la variation de ces propriétés en fonction de la concentration de Béryllium. Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre sur ces propriétés.

Les principaux résultats obtenus d'après cette étude sont:

Les gaps d'énergie E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^{X} et E_{Γ}^{L} augmentent non linéairement en fonction de la composition x de Béryllium, avec une valeur considérable du paramètre de courbure, cela est dû à l'effet du désordre compositionnel dans l'alliage.

Le matériau $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ est un semi-conducteur à gap direct dans l'intervalle x de Béryllium $[0, 0.57]$, et il devient un semi-conducteur à gap indirect dans l'intervalle $[0.57, 1]$. Le point de transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_{Γ}^{X} est à $x=0.57$ de Béryllium sans l'effet de désordre. Ce point augmente à 0.76, lorsqu'on tient compte de l'effet du désordre. Notre étude montre que le composé CdSe est plus ionique que le composé BeSe .

La variation de l'indice de réfraction n et les constantes diélectriques en fonction de la concentration x de Béryllium a un comportement non linéaire, avec un paramètre de courbure important, cela est dû à l'effet du désordre compositionnel dans l'alliage.

Les calculs des constantes diélectriques à haute fréquence ϵ_{∞} et statiques ϵ_0 ont montrés un comportement non linéaire avec la variation du gap d'énergie E_g . Ceci n'est pas conforme à la

variation linéaire estimée à partir des relations proposées par Adachi.

Les paramètres mécaniques calculées: les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , le module de compressibilité B , le module de Young Y , les constantes de force α et β , le module de cisaillement G et le facteur d'anisotropie A , augmentent d'une façon non linéaire avec l'augmentation de la concentration x . Par contre le coefficient de Poisson ν , le facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ diminuent avec l'augmentation de la concentration de Béryllium. L'effet de désordre fait diminué les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , le module de compressibilité B , le module de Young Y , les constantes de force α et β , le module de cisaillement G et le facteur d'anisotropie A . En revanche cet effet fait augmenté le coefficient de Poisson ν , le facteur de l'ionicté f_i et le paramètre de Kleinman ξ .

D'après cette investigation l'effet de désordre sur les propriétés électroniques, optiques, diélectriques et mécaniques de l'alliage ternaire semiconducteur $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ est important et on ne peut pas le négligé.

En général, nos calculs sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et les autres travaux disponibles.



Abstract

Abstract

In this work, we studied the optoelectronic, dielectric and mechanic properties of the binary compounds CdSe, BeSe and their ternary alloys $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ with and without taken the compositional disorder effect.

The method used is that of the empirical pseudopotential (EPM) with the virtual crystal approximation and combined with the bound orbitals model of Harrison (BOM) and Verma's model. The composition dependences of the selected features of zinc-blende $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ alloys system, such as band gap energy, band structure, electronic charge density, refractive index, dielectric constants and mechanic parameters have been studied over the composition range 0-1. Our results were compared with experiment and theoretical data available, and showed generally satisfactory agreement. All studied band parameters are found to vary monotonically with the composition x of the Beryllium Be, a direct to indirect band gap crossover is found to occur at x 0.57. This point changes to 0.76 if we take in consideration the compositional disorder effect.

Particular attention has been accentuated to the compositional disorder effect on the band structure, energy gaps E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^{X} and E_{Γ}^{L} , and electronic charge density, refractive index, dielectric constants and mechanical parameters of the $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ alloy. This effect is very important and we cannot neglect it.

ملخص

ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص الإلكترونية، الضوئية، خواص العزل الكهربائي و الخواص الميكانيكية للمركبات الثنائية CdSe و BeSe و سبائكما الثلاثية $Be_xCd_{1-x}Se$ بأخذ و بدون أخذ بعين الإعتبار لتأثير العشوائية التركيبية.

في هذه الدراسة استعملت الطريقة التجريبية لشبه الكمون (EPM) مقرونة بتقريب البلورة الافتراضية (VCA) و بإشراك نموذج المدارات المرتبطة (BOM) لـ Harrison و نموذج Verma. التغيرات التركيبية للمقادير المعرفة لنظام السبيكة زنك-بلاند $Be_xCd_{1-x}Se$ ، كالفاصل الطاقوي، بنية عصابة الطاقة، كثافة الشحنة الإلكترونية، قرينة الإنكسار، الثوابت العزلية و المقادير الميكانيكية تمت دراستها في المجال التركيبي 0-1. النتائج المتحصل عليها تمت مقارنتها بالمعطيات النظرية و التجريبية المتوفرة، و لقد بينت أن هناك توافق مقبول عموماً. كل مقادير عصابات الطاقة المدروسة تتغير على وتيرة واحدة مع تغير تركيب x للبيريليوم Be ، هنالك مرور من عصابة الطاقة المباشرة إلى عصابة الطاقة غير المباشرة يقع عند التركيز $x = 0.57$ من البيريليوم. هذا التركيز يصبح 0.76 عند الأخذ بعين الإعتبار تأثير العشوائية التركيبية.

هناك اهتمام خاص تم تركيزه على تأثير العشوائية التركيبية على عصابات الطاقة، الفواصل الطاقية E_F^F ، E_F^X و E_F^F ، كثافة الشحنة الإلكترونية، قرينة الإنكسار، الثوابت العزلية و المقادير الميكانيكية لسبيكة $Be_xCd_{1-x}Se$. هذا تأثير أظهر أنه ذو أهمية و لا يمكن إهماله.

A blue graphic element resembling a scroll, with a white outline and a slight shadow. It has a rolled-up top edge and a small circular detail on the left side. The word "Résumé" is centered within the scroll in a white, italicized serif font.

Résumé

Résumé:

Dans ce travail, nous avons étudié quelques propriétés optoélectroniques, diélectriques et mécaniques avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel des composés binaires BeSe, CdSe et ses alliages ternaires $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$.

La méthode utilisée est celle du pseudopotentiel empirique local (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) et associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (BOM) et le modèle de Verma. Les dépendances de la composition des caractéristiques sélectionnées du système d'alliage de zinc-blende $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$, telles que l'énergie de la bande interdite, la structure de bande, la densité de charge électronique, l'indice de réfraction, les constantes diélectriques et les paramètres mécaniques ont été étudiées sur la plage de la composition 0-1. Nos résultats ont été comparés aux données expérimentales et théoriques disponibles, et ont montré un accord généralement satisfaisant. Tous les paramètres de bande étudiés varient de façon monotone avec la composition x de béryllium Be, un passage de la bande interdite directe à la bande interdite indirecte se produit à x 0,57. Ce point passe à 0,76 si l'on prend en considération l'effet du désordre compositionnel.

Une attention particulière a été accentuée sur l'effet du désordre compositionnel sur la structure de bandes, les gaps d'énergies E_F^{Γ} , E_F^X et E_F^L , la densité de charge électronique, l'indice de réfraction, les constantes diélectriques et les paramètres mécaniques de l'alliage $\text{Be}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$. Cet effet s'avère très important et nous ne pouvons pas le négliger.