

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

UNIVERSITE BADJI MOKHTAR
BADJI MOKHTAR UNIVERSITY



جامعة باجي مختار – عنابة –

2014

**Faculté des Sciences
Département de Physique**

THESE

**Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
DOCTORAT**

Thème :

**Etude numérique des propriétés
optiques et dynamique du réseau
des alliages semiconducteurs**

Option : Physique du solide

Présentée par

M^{lle} BACHA Salima

DIRECTEUR DE THESE : Dr. Abderrachid BECHIRI Prof. Université de Tébessa

Co-Encadreur : Dr. Safia ALLEG Prof. Université de Annaba

Devant le jury :

Président : Dr. Hafid BELKHIR Prof. Université de Annaba

Examineur : Dr. Hocine MERADJI Prof. Université de Annaba

Examineur : Dr. Badis BENNECER Prof. Université de Guelma

Examineur : Dr. Rahima BOULCHFER M.C.A. Université de Skikda

Remerciement

Je remercier notre dieu tous puissant pour m'avoir donné le courage et la volonté pour réaliser ce modeste travail

*Je tiens à exprimer ma plus profonde reconnaissance et gratitude à mon directeur de thèse **Dr. Aberrachid BECHIRI** professeur à l'université de Tébessa en premier lieu pour son encadrement durant la réalisation de se manuscrit et ma offert le maximum de son temps disponible pour faire avancer les problèmes qui se sont présentés pendant se travaille et ses précieux conseils, un grand merci.*

*Toute ma gratitude s'adresse au **Dr. Nadir BOUARISSA** professeur à l'université de M'sila qui a généreusement donné de son temps en collaborant activement à plusieurs étapes du projet.*

*Je tiens à exprimer toute ma sympathie et mon affection au **Dr. Fella BENMAKHLOUF** professeur à l'université de Tébessa qui a suivi de très près le déroulement de ce travail de thèse d'être investis dans la lecture de ce manuscrit et de l'avoir rapporté.*

*Mes remerciements vont également au **Dr. Safia ALLEG** professeur à l'université de Annaba pour avoir accepté de faire partie de se travaille ainsi que pour sa gentillesse et sa patience.*

*Je tiens à remercier chaleureusement l'ensemble des membres du jury. D'abord j'adresse ma gratitude au **Dr. Hafid BELKHIR** Professeur à l'université de Annaba pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de cette thèse. Ainsi je tien à exprimer ma reconnaissance au **Dr. Hocine MERADJI** Professeur à l'université de Annaba, **Dr. Badis BENNECER** Professeur à l'université Guelma et **Dr. Rahima BOULCHFER** M.C.A. à l'université de Skikda, de m'avoir honoré par l'acceptation d'examiner ce travaille.*

Un autre grand merci à tous les amis et collègues : Saïda CHETTOUH, Rebeh MOUICI, Hadjer SAHEB et Naima ABDI.

J'aimerais dédier ces derniers mots à la mémoire de mon père, ma très chère mère ; mes frères et sœurs ainsi que leurs familles en particulier à mon très chère Elhadi, mes neveux ainsi à mes nièces, à ma meilleure ami Leila BOURMATTE qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de ce cheminement, avec ses bonheurs et ses peines.

Merci

Abstract

In this work, we are interested in the study of optical properties, dielectric, elastic and dynamic quaternary system $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ adapted to different substrates. The method used for this work is the empirical pseudopotential method EPM associated with the virtual crystal approximation (VCA) with and without considering the effect of disorder, combined with the Harrison bond orbital model are used. These methods are simple and give quick and reasonably reliable results.

We have study the variation of: refractive index n , elastic parameter C_{11} , C_{12} and C_{44} , shear modulus, Young modulus, Bulk modulus, force constants α and β and also the phonon frequencies ω_{LO} and ω_{TO} in function of the variation concentration of Arsenic. The numerically calculated values show reasonable agreement with the experiment and values listed in literature.

Special attention has been devoted to the effects of compositional disorder and substrate upon the features of interest. It is found that the compositional disorder has an important effect on the studied properties and should be included in the calculations. The substrate effect is also found to change the properties of interest suggesting thus that more diverse opportunities regarding optical elastic and lattice vibration properties may be provided by a proper choice of the substrate and the composition y .

Résumé

Dans ce travail, on est intéressé par l'étude des propriétés optiques, diélectriques, élastiques et dynamiques du système quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différents substrats. La méthode utilisée pour ce travail est la méthode pseudopotentiel empirique (E.P.M) associée à l'approximation du cristal virtuel(VCA) avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel, combinée avec le modèle de liaison orbital de Harrison. Ces méthodes sont simples et donnent des résultats rapides et raisonnablement fiables.

On a étudié la variation : de l'indice de réfraction n , des paramètres élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , les modules de cisaillement, de Young Y , de Poisson, de compressibilité B et les constantes de forces α et β et les fréquences de phonon ω_{LO} et ω_{TO} en fonction de la concentration de l'Arsenic. Les valeurs calculées numériquement montrent un accord raisonnable avec l'expérience et celle disponible dans la littérature.

Une attention particulière a été consacrée aux effets de désordre compositionnel et du substrat sur les points d'intérêt. On constate que le désordre de la composition a un effet important sur les propriétés étudiées et devraient être inclus dans les calculs. Il se trouve également que l'effet du substrat modifier les propriétés d'intérêt, le système quaternaire en question pourrait fournir les plus diverses possibilités pour atteindre les propriétés optiques, élastique et de vibration souhaité des cristaux avec un bon choix de la concentration y et du substrat.

ملخص

في هذا العمل نحن مهتمون بدراسة الخواص الضوئية و العزل الكهربائية, و الخواص المرونية و الخواص الدينامكية للخليط الرباعي $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ باستخدام الطريقة التجريبية لشبه الكمون (E.P.M) بالاشتراك مع تقريب البلورة الافتراضية (V.C.A) مقرونة مع نموذج المدارات المرتبطة ل Harrison, بأخذ و بدون أخذ بعين الاعتبار تأثير العشوائية التركيبية، في هذه الطريقة الحسابات بسيطة، سريعة و موثوقة إلى حد معقول.

لقد قمنا بدراسة تغيرات كل من : قرينة الانكسار n ، ثابت العزل (ϵ_0 و ϵ_∞)، ثوابت المرونة C_{11} ، C_{12} و C_{44} ومعامل القص G ، معامل يونغ Y ، معامل Poisson ν ، معامل الانضغاط الحجمي B وثوابت القوة α و β و الفونونات الضوئية (ω_{LO} و ω_{TO}) اضافة إلى الشحنة الفعلية الدينامكية، بالنسبة لتغير تركيز الزرنيخ (As). حيث بدت النتائج جد متوافق مع النتائج التجريبية و النظرية المتوفرة.

وقد اعرنا اهتماما خاصا بدراسة تأثير العشوائية التركيبية التي أثبتت أن لها تأثير جد مهم على النتائج بحيث يجب أخذها بعين الاعتبار في الحسابات و عدم اهمالها. كما اهتمامنا بدراسة تأثير تغير المساند الذي ثبت أيضا أنه له تأثير ملحوظ في تغير خصائص مثيرة للاهتمام. مما يمكننا من القول أنه للحصول على خصائص ضوئية، مرونية ودينامكية يكفي اختيار المسند و تركيز الزرنيخ y المناسبين.

LISTE DES SYMBOLES

Liste des symboles

H	L'Hamiltonien du système.
r	Les positions des électrons.
R	Les positions des noyaux.
$\Psi_n(R)$	La fonction d'onde nucléaire.
$\Psi_e(R, r)$	La fonction d'onde électronique.
$V_N(r_i)$	Le potentiel nucléaire pour le $i^{\text{ème}}$ électron.
E_{HF}	Energie électronique totale Hartree-Fock.
$V_H(r)$	Le potentiel de Hartree.
ρ	La densité de charge électronique.
V_{ext}	Le potentiel extérieur.
V_c	Le potentiel attractif .
V_R	Potentiel répulsif.
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité.
LDA	Approximation de la densité locale
GGA	Approximation du gradient généralisé.
APW	Méthode des ondes planes augmentées.
OPW	Méthode des ondes planes orthogonalités.
E.P.M	La méthode empirique de pseudopotentiel.
Z	Le nombre d'électrons de valence.
r_c	Le rayon du cœur atomique.
$\epsilon\epsilon_0$	La permittivité électrique.
$\mu\mu_0$	La perméabilité magnétique.
ω	La fréquence.
k	Le vecteur d'onde.
E_g	L'énergie de gap.
ϵ_0	La constante diélectrique statique.

ϵ_{∞}	La constante diélectrique à haut fréquence.
α_p	La polarité.
V_S	Le facteur de forme symétrique.
V_A	Le facteur de forme antisymétrique.
C_{11} , C_{12} , et C_{44}	Les constantes élastiques.
α et β	Le paramètre de constante de forces d'élongation, et de recourbement respectivement.
Z^*	La charge effective.
e_T^*	La charge effective transversale.
Z	La valance.
ζ	Le paramètre Kleinman (Internal-strain parameters).
B	Le module de compressibilité.
C_s	Le module de cisaillement.
Y	Le module d'Young.
G_V	Le module de cisaillement de Voigt.
G_R	Le module de cisaillement de Reuss.
ν	Le coefficient de Poisson.
A	Le facteur d'isotropie.
M	La masse réduite.
ω_{LO}	La fréquence du mode longitudinal optique.
ω_{TO}	La fréquence du mode transversal optique.

LISTE DES TABLEAUX

Tableaux N°	Titre	Page
<i>Chapitre V</i>		
Tableau V-1	les facteurs de formes symétriques (Vs) et antisymétriques ajustés en (Ryd) des composants binaires et leurs paramètres de réseaux.	52
Tableau V-2	Les paramètres de courbures des alliages ternaires employer pour le calcul des valeurs des facteurs des formes.	52
Tableau V-3	l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / InP calculé par différente relations.	53
Tableau V-4	l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / GaAs calculé par différente relations.	54
Tableau V-5	l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / ZnSe calculé par différente relations.	54
Tableau V-6	La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ /InP pour des différentes compositions.	61
Tableau V-7	La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / GaAs pour des différentes compositions.	62
Tableau V-8	La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ calculé de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / ZnSe pour des différentes compositions.	62
Tableau V-9	constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ /InP.	69
Tableau V-10	constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ /GaAs.	69
Tableau V-11	constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur	70

	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	
Tableau V-12	Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	76
Tableau V-13	Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	77
Tableau V-14	Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	78
Tableau V.15	modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V et de Reuss en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	84
Tableau V-16	modules de Cisaillement, de cisaillement de Voigt G_V , et de Reuss en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	84
Tableau V-17	modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de Reuss en (10^{11} dynes.cm ⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	85
Tableau V-18	Modules de compressibilité (B_u), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en (10^{11} dynes.cm ⁻²) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	90
Tableau V-19	modules de compressibilité (B_u), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en (10^{11} dynes.cm ⁻²) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	90
Tableau V-20	modules de compressibilité (B_u), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en (10^{11} dynes.cm ⁻²) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	91
Tableau V-21	Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	96
Tableau V-22	Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	97
Tableau V-23	Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de	98

	Poisson σ de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	
Tableau V-24	Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	104
Tableau V-25	Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	104
Tableau V-26	Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	105
Tableau V-27	Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ pour des différentes compositions y.	109
Tableau V-28	Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ pour des différentes compositions y.	109
Tableau V-29	Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ pour des différentes compositions y.	110
Tableau V-30	La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ pour des différentes compositions.	114
Tableau V-31	La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ pour des différentes compositions.	114
Tableau V-32	La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ pour des différentes compositions.	115
Tableau V-33	La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ pour des différentes compositions.	121

Tableau V-34	La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ pour des différentes compositions.	121
Tableau V-35	La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ pour des différentes compositions.	122

LISTE DES FIGURES

Figures N°	Titre	Page
<i>Chapitre I</i>		
I-1	la structure blende de zinc	4
I-2	la première zone de Brillouin.	5
I-3	Structure de bande schématique d'un semiconducteur direct et indirect.	6
I-4	Paramètre du réseau cristallin en fonction de l'énergie de bande interdite des alliages de composé III-V.	7
<i>Chapitre II</i>		
II-1	Profils généraux du potentiel réel de la fonction d'onde réelle (tirés), du pseudopotentiel et de pseudo-fonction d'onde correspondants (lignes solides).	19
II-2	Tracer de la fonction de Heirne-Abarenkov.	22
II-3	Tracé de la fonction de Gauss.	23
II-4	Diagramme de la procédure de calcul par EPM.	25
<i>Chapitre III</i>		
III-1	Effet de déformation sur les coordonnées du système x, y, z : (a) sans contrainte (b) avec contrainte.	33
III-2	X_x est une force appliquée dans la direction x pour une unité de surface d'un plan dont la normale se situe dans la direction x ; X_y est appliquée dans la direction x pour une unité de surface d'un plan dont la normale se situe dans la direction y.	34
III-3	Représentations des composantes des contraintes dans un cube élémentaire.	35
<i>Chapitre IV</i>		

IV-1	Le potentielle d'énergie de deux atomes voisins dans un cristal en fonction de la distance interatomique.	42
IV-2	Vibration d'une chaîne linéaire monoatomique.	43
IV-3	Courbe de dispersion d'une chaîne linéaire monoatomique unidimensionnelle.	45
IV-4	Vibration de chaîne diatomique unidimensionnelle.	45
IV.5	Courbes de dispersion d'une chaîne linéaire diatomique unidimensionnel, en supposant $M_1 > M_2$.	47
IV.6	Ondes optique et acoustique transversale dans une chaîne linéaire diatomique.	48
<i>Chapitre V</i>		
V-1	La variation de l'indice de réfraction en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / InP, calculé par les différentes relations : sans désordre (---) et avec désordre (—).	57
V-2	La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / GaAs, calculé par les différentes relations : sans désordre (---) et avec désordre (—).	58
V-3	La variation de l'indice de réfraction en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / ZnSe, calculé par les différentes relations : sans désordre (---) et avec désordre (—).	59
V-4	La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur : InP , GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.	60
V-5	La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / InP, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (---).	65
V-6	La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / GaAs, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (---).	66

V-7	La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre(- - -).	67
V-8	La variation de la constante diélectrique à haute fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur : InP , GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.	68
V-9	La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).	72
V-10	La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).	73
V-11	La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la concentration y de l'Arsenic du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).	74
V-12	La variation de la constante diélectrique statique en fonction de la concentration y de l'Arsenic du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur : InP , GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.	75
V-13	La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.	80
V-14	La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.	81
V-15	La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.	82
V-16	La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs, ZnSe.	83
V-17	La variation des modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R en (10^{11} dynes.cm ⁻²) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.	86
V-18	La variation des modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R en (10^{11} dynes.cm ⁻²) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.	87

V-19	La variation des modules de Cisaillement G, de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R en (10^{11} dynes.cm ⁻²) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.	88
V- 20	La variation des modules de Cisaillement G, de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R en (10^{11} dynes.cm ⁻²) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	89
V- 21	La variation des modules de compressibilité (Bu), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.	92
V-22	La variation des modules de compressibilité (Bu), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.	93
V-23	La variation des modules de compressibilité (Bu), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.	94
V-24	La variation des modules de compressibilité (Bu), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	95
V-25	La variation du Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$	99
V- 26	La variation du Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.	100
V-27	La variation du Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.	101
V-28	La variation du Paramètre de Kleiman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	103
V-29	La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.	106
V-30	La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.	106

V- 31	La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.	107
V-32	La variation des constantes de force α et β en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	108
V- 33	La variation de la charge effective transversale e_T^* en fonction de la composition y de l'alliage semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$: sans désordre (—) et avec désordre (- - -)	111
V- 34	La variation de la charge effective transversale e_T^* en fonction de la composition y de l'alliage semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ajusté sur les substrats :InP, GaAs et ZnSe.	112
V- 35	Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	117
V-36	Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$	118
V- 37	Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	119
V-38	Variation des fréquences optiques transversale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	120
V-39	Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.	124
V-40	Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.	125
V-41	Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.	126
V-42	Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ajusté sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.	127

SOMMAIRE

Sommaire

<i>Liste des tableaux</i>	i
<i>Liste des figures</i>	v
<i>Introduction générale</i>	1
 Chapitre I : Méthodes de calcul des structures de bandes	
I.1. Introduction	4
I.2. Aperçus sur les semiconducteurs III-V	4
I.3. Structure de bande	8
I.3.1. Equation de schrodinger	8
I.3.2. Approximation de Born-Oppenheimer	8
I.3.3. Approximation de Hartree	9
I.3.4. Approximation de Hartree-Fock (HF)	10
I.3.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	12
I.3.5.1. Approximation de la densité locale (LDA)	12
I.3.5.2. Approximation du gradient généralisé (GGA)	13
I.3.6. Approximation des liaisons fortes	13
I.3.7. La méthode des ondes planes augmentées (APW)	14
I.3.8. Méthode des ondes planes orthogonalités (OPW)	14
I.3.9. Méthode pseudopotentiel	15
Références	16
 Chapitre II : Méthode pseudopotentiel	
II.1. Introduction	18
II.2. Concept de pseudopotentiel	18
II.3. Les modèles du pseudopotentiel	20
II.3.1. Le modèle local	20
II.3.1. Le modèle non-local	21
II.6. La méthode de calcul de la EPM	23

Références	26
------------	----

Chapitre III : Etude des propriétés optiques et élastiques des semiconducteurs

III.1. Propriétés optiques	27
III.1.1. Introduction	27
III.1.2. Equation de dispersion	28
III.1.3. Indice de réfraction et la dispersion	29
III.1.3.1. Equation de dispersion de Sellmeier	29
III.1.3.2. Equation de dispersion de Cauchy	30
III.1.4. Constantes optiques	30
III.1.4.1. Calcule de l'indice de réfraction	30
III.1.4.2. constante diélectrique	.31
Références	31
III.2. Propriétés élastique des semiconducteurs	32
III.2.1. contrainte élastiques	32
III.2.2. Les composantes de contrainte	34
III.2.3. Constante élastique	35
III.2.4. Calculs des constantes élastiques	.36
III.2.4.1. Module de compressibilité B et module de cisaillement	37
III.2.4.2. Module de Young et le coefficient de Poisson	38
Références	39

Chapitre IV : Dynamique du réseau

IV.1. Introduction	41
IV.2. Interaction des atomes dans les cristaux	41
IV.3. la chaine linéaire unidimensionnelle	43
VI.3.1. La chaine linéaire monoatomique	43
VI.3.2. La chaine linéaire diatomique	45

III.3.3. Branches optique et acoustique	47
Références	48

Chapitre V : Résultats et discussions

V.1. Introduction	50
V.2. Etude des propriétés optiques et diélectriques	52
V.2.1. L'indice de réfraction	52
V.2.1.1. Effet de désordre	55
V.2.1.2. Effet de substrat	59
V.2.2. Constante diélectrique à haute fréquence	60
V.2.2.1. Effet de désordre	63
V.2.2.2. Effet de substrat	67
V.2.3. Constante diélectrique statique	68
V.2.3.1. Effet de désordre	70
V.2.3.2. Effet de substrat	74
V. 3. Propriétés élastiques	75
V.3.1. Constantes élastiques	75
V.3.1.1. effet de désordre	78
V.3.1.2. Effet de substrat	82
V.3.2. Modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V de Reuss G_R	83
V.3.2.1. Effet de désordre	85
V.3.2.2. Effet de substrat	88
V.3.3. Modules de compressibilité (B_u), de Young (Y) et de cisaillement (C_s)	89
V.3.3.1. Effet de désordre	91
V.3.3.2. Effet de substrat	94
V.3.4. Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ	95
V.3.4.1. effet de désordre	98
V.3.4.2. Effet de substrat	101

IV.3.5. Les constantes de force α et β	103
V.3.5.1. Effet de désordre	105
V.3.5.2. Effet de substrat	107
V.4. Etude de dynamique de réseau	108
V.4.1. La charge effective transversale	108
V.4.1.1. Effet de désordre	110
V.4.1.2. Effet de substrat	112
V.4.2. Les fréquences des modes optiques	112
V.4.2.1. Les fréquences optiques longitudinale	113
V.4.2.1.1. Effet de désordre	115
V.4.2.1.2. Effet de substrat	119
V.4.2.2. Les fréquences optiques transversale	120
V.4.2.2.1. Effet de désordre	122
V.4.2.2.2. Effet de substrat	126
Références	128
<i>Conclusion générale</i>	130

Introduction générale

Introduction générale

Les semiconducteurs constituent la base de la plupart des appareils modernes de traitement de l'information et des dispositifs optoélectroniques [1]. Un majeur intérêt a été donné aux alliages ternaires et quaternaires due à la possibilité de varier systématiquement leur largeur de bande et la constante de réseau par un choix approprié de la composition de l'alliage [2]. L'alliage semiconducteur quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ présente une attention considérable au tant que matériau pour la fabrication des diodes électroluminescentes, des hétérojonctions de détecteurs infrarouges, et des lasers à semi-conducteurs, cet intérêt est dû au fait qu'il peut être facilement déposé sur des substrats de composés binaire tel que le InP ou GaAs.

Les alliages $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur un substrat InP sont des matériaux semiconducteurs avec des applications technologiques importantes pour les dispositifs optoélectroniques et électroniques qui seront utilisés dans les techniques de communications optiques et fabrications d'appareils reproductibles avec bonnes performances qui impliquent de grands efforts pour améliorer la qualité des couches déposées avec différentes techniques de dépôts par un bon contrôle de l'impureté de constitution et de composition. Ainsi, il est important d'identifier les impuretés superficielles et profondes (ou défauts intrinsèques) car ces défauts pourraient sérieusement affecter les performances des appareils. L'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur InP, est un système de matériau semiconducteur quaternaire extrêmement important est largement utilisé pour la fabrication de dispositifs optoélectroniques de télécommunication comme les diodes lasers à grande vitesse émettant à 1,3 et 1,55 μm de longueur d'onde [2,3], cet alliage a été l'objet de nombreux recherches[3, 4].

L'alliage ternaire $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ déposé sur le substrat InP a été utilisé en tant que couche active dans des lasers et des photodétecteurs. Il constitue un excellent détecteur de 1,55 μm dans des systèmes de communication optiques. En outre, il est un très bon candidat pour les transistors à haute vitesse en raison de sa grande mobilité de porteur. D'autre part, des couches GaInAs préparé sur des substrats de GaAs ont également été utilisés pour les transistors à électrons de haute mobilité (HEMT) avec des performances de structures nettement améliorées, pour les lasers à couches déformées, modulateurs et des détecteurs opérant dans la région du proche infrarouge. Pour ce matériau ternaire, cependant, seules les couches minces peuvent être réalisées en raison de l'inadéquation du réseau. En conséquence,

de nombreux problèmes ont été observés dans les lasers fabriqués sur de tels substrats, qui sont donc limités à la région de 0,8-1.1 μm [5].

L'utilisation actuelle limitée de InP n'est pas à cause des limitations de la technologie de l'appareil, mais plutôt le manque de disponibilité des substrats InP de grand diamètre, de haute qualité et sans défaut. Commercialement, des substrats de Si sans dislocation sont disponibles jusqu'à un diamètre de 300 mm, des substrats de GaAs sont disponibles jusqu'à 150 mm et InP jusqu'à 75 mm [3], mais les GaAs et InP souffrent d'une variété de défauts, les plus grave sont les défauts de linéaires ou des dislocations.

Dans la littérature, il ya eu quelques tentatives pour étudier les propriétés de réseau du système $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur InP [6-7]. La méthode utilisée dans ce travail de recherche, est la méthode du pseudopotentiel. Elle a les avantages d'être une représentation complète de l'espace k tout en étant défini avec seulement quelques paramètres ajustables. Cela permet son utilisation comme une méthode empirique, largement cité dans la littérature comme la méthode pseudopotentiel empirique en utilisant les données expérimentales connues comme paramètres d'ajustement, la méthode est donc simple à mettre en œuvre, et ne demandant pas trop sur les ressources informatiques.

Bechiri et al. [8] ont étudié les propriétés électroniques de l'alliage quaternaire déposé sur différents substrats binaires. Afin d'étendre l'étude à d'autres propriétés fondamentales, dans ce travail, nous étudions les propriétés optiques, élastiques et vibration du réseau de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposés sur des substrats binaires GaAs, InP et ZnSe en utilisant la méthode du pseudopotentiel couplée à l'approximation du Cristal Virtual (VCA) avec et sans inclure l'effet de désordre compositionnel et associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (Bond Orbital Model).

Le premier chapitre présente un aperçu général sur les semiconducteurs III-V avec la citation de quelques méthodes de calcul de la structure de bande.

Le deuxième chapitre est consacré à l'exposition du fondement de la méthode pseudopotentiel.

Dans le troisième chapitre une partie est consacrée à la présentation des propriétés optiques et diélectriques d'où on exposera l'outil mathématique de calcul de l'indice de réfraction et des constantes diélectriques. L'autre partie est un aperçu sur les propriétés élastique des semiconducteurs.

Dans le quatrième chapitre on donne un aperçu général sur la dynamique du réseau des semiconducteurs.

Le cinquième chapitre expose les résultats de calculs avec les discussions de l'effet compositionnel de la concentration de l'Arsenic ainsi de l'effet de substrats sur les résultats obtenues.

Enfin, la conclusion générale permettra de résumer les principaux résultats de ce travail.

Référence

- [1] E. F. Schubert, E. O. Gobel, Y. Horikoshi, K. Ploog, and H. J. Queisser, Physical Review B, 30 (1984) 813.
- [2] D. Byrappa, Dudley, Handbook of Crystal growth. Springer. Verlag Berlin Heidelberg (2010).
- [3] S. Kasap, P. Capper, Handbook of electronic and Photonic Materials. Springer (2006).
- [4] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Sol. **62** (2001) 1163.
- [5] G. Dhanaraj, K. Byrappa, V. Prasad, M. Dudley (Eds.), Springer Handbook of Crystal Growth, Springer, Berlin, (2010).
- [6] S. Adachi, Physical Properties of III–V Semiconductor Compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs and InGaAsP, Wiley, New York, (1992).
- [7] S. Adachi, J. Appl. Phys. 53 (1982) 8775.
- [8] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. 39 (2006) 478.

CHAPITRE I

MÉTHODE DE CALCUL DES STRUCTURES DE BANDES

Méthodes de calcul des structures de bandes

I.1. Introduction :

Les composants semiconducteurs III-V 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 [1].

I.2. Aperçus sur les semiconducteurs III-V :

Les matériaux semiconducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la 3^{ème} colonne et d'un élément du 5^{ème} colonne de la classification périodique. Les semiconducteurs III-V se cristallisent dans la structure zinc blende ou wurtzite. Dans notre étude, on s'intéresse à la structure zinc blende représentée sur la figure (I.1), cette structure consiste en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc) l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart d'une diagonale principale du cube élémentaire.

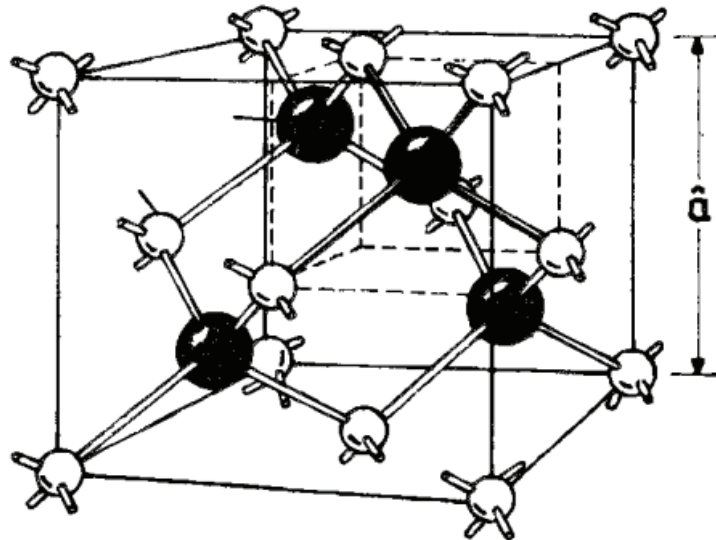


Figure I.1 : la structure zinc blende.

De nombreuses propriétés physiques, électroniques et optiques des semiconducteurs peuvent être étudiées en utilisant le concept du réseau réciproque et plus précisément dans la cellule unitaire du réseau réciproque nommé zone de Brillouin comme le montre la figure (I-2) [2,3], qui a la forme d'un octaèdre à faces tronquées dont les points de haute symétrie sont notés Γ , X et L.

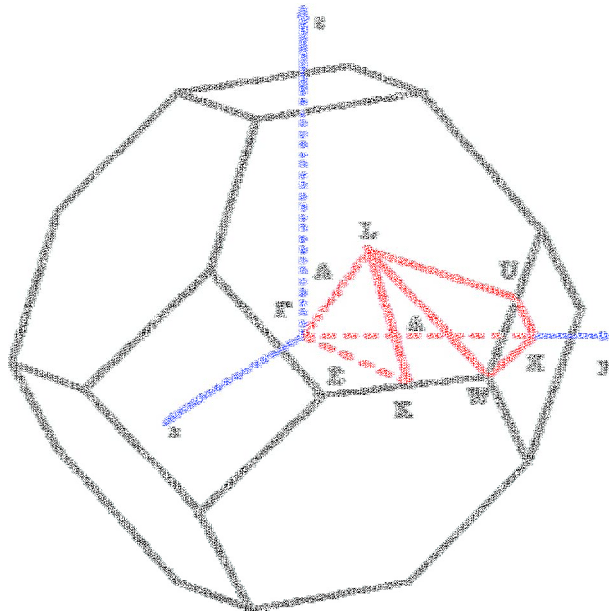


Figure I.2 : la première zone de Brillouin pour la maille cristalline *cfc*.

La famille des semiconducteurs III-V représente des composés avec une bande interdite directe comme : GaAs, GaSb et InP...ect et d'autres avec un gap indirect tel que le GaP, et afin de prédire la structure de bandes d'alliages de composés, il est nécessaire de connaître, non seulement l'énergie de la première bande de conduction (B.C), mais également les énergies de la dernière bande de valence (B.V) (figure I.3). Dans les matériaux en transition directe, comme il est représenté sur la Figure (I.3), les électrons peuvent être excités à partir de la bande de valence à la bande de conduction sans aucune génération de phonons. Dans les matériaux de transition indirects les électrons se recombinent par des trous avec des interactions de phonons.

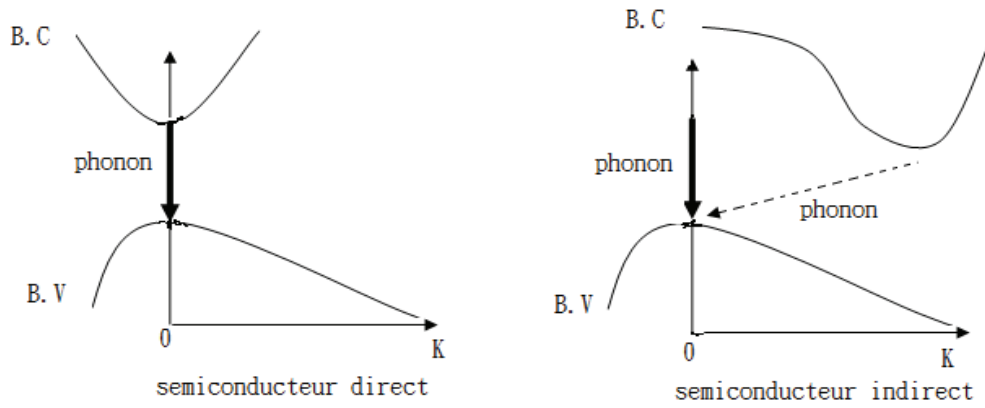


Figure I.3 : Structure de bande schématisée d'un semiconducteur direct et indirect.

L'intérêt pratique des semiconducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre de la même colonne. Cette substitution permet d'obtenir des alliages ternaires tel que $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ ou des quaternaire tel que $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ces derniers ont eu un intérêt considérable au cours de la dernière décennie, à cause de leur largeur de band (énergie de gap) est du paramètre de réseaux qui peuvent être varié systématiquement par un choix approprié de la composition molaire de l'alliage [4]. Le paramètre de réseau d'un quaternaire $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}_y\text{D}_{1-y}$ est lié au paramètre de réseau des éléments binaire déterminé par la loi de Vegard [5] :

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

Où a_{AC} , a_{AD} , a_{BC} et a_{BD} sont respectivement les paramètres de réseaux des éléments binaires AC, AD, BC et BD

Les alliages quaternaires avec leurs larges gaps offrent la possibilité de les déposer sur des substrats convenables, la figure (I-4) montre la variation du paramètre cristallin en fonction de l'énergie de la bande interdite, à partir de ce diagramme il est possible de déterminer toutes alliages susceptible d'être déposé en couche mince sur des substrats binaires telle que le : GaAs, AlAs, InP ou ZnSe.

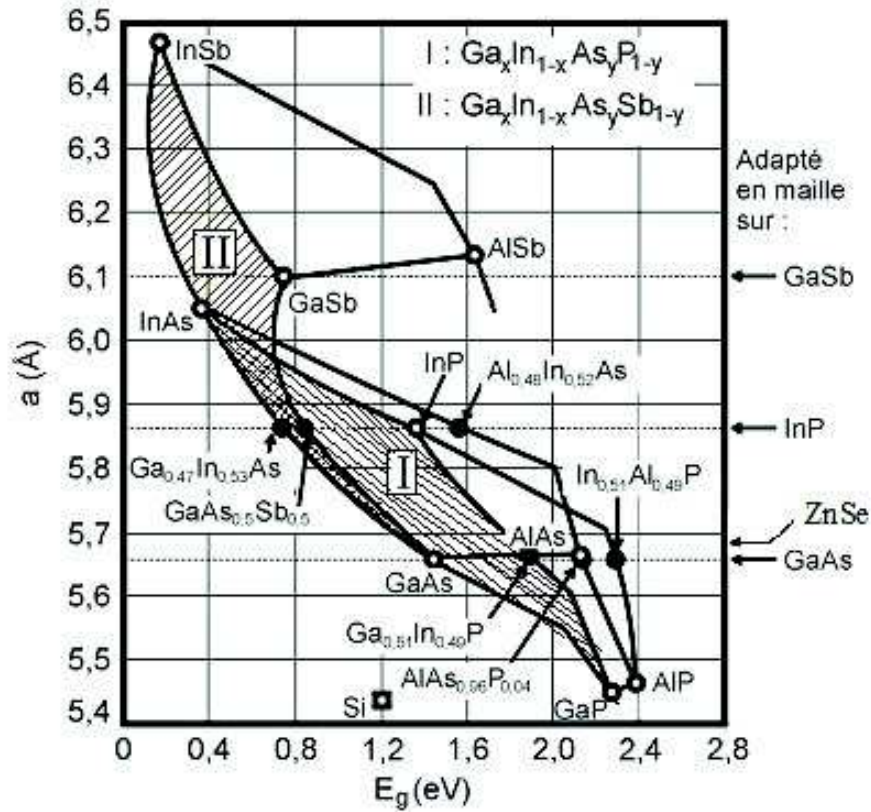


Figure I.4 : Paramètre du réseau cristallin en fonction de l'énergie de bande interdite des alliages de composé III-V [6].

Les conditions d'accord de maille entre les compositions x et y de l'alliage quaternaire $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}_y\text{D}_{1-y}$ peut être déterminé par l'utilisation d'un schéma d'interpolation :

$$P(x, y) = (1-x)yP(BC) + (1-x)(1-y)P(BD) + xyP(AC) + x(1-y)P(AD) \quad (\text{I.2})$$

Dans le cas de substrat binaire BD ($x=y=0$) la condition d'accord de maille est :

$$x = [a(BC) - a(BD)]y / ([a(BD) - a(AD)] - [a(BC) + a(AD) - a(BD) - a(AC)]y) \quad (\text{I.3})$$

Pour $y=1$ et $x=0$:

$$x/y = [a(BC) - a(BD)] / [a(BC) - a(AC)] \quad (\text{I.4})$$

L'alliage quaternaire GaInAsP est couramment utilisé pour des dispositifs optoélectroniques tels que les lasers à semiconducteurs et des photodiodes pour la 1,3 μm et 1,55 μm , pour une telle application, le matériau de choix est le substrat InP. Comme le montre la figure I.4 les alliages de ce système peuvent être ajustés sur un substrat InP (E_g : 0,73 ... 1,35 eV), GaAs (E_g : 1,42 ... 1,90 eV) et ZnSe (intervalle de E_g légèrement inférieure) [6].

I.3. Structure de bandes

I.3.1. Équation de Schrödinger :

Les propriétés des électrons dans des semiconducteurs sont décrites par la résolution de l'équation de Schrödinger approprié pour le cristal.

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit la fonction d'onde d'un système physique. L'équation de Schrödinger est exprimé par :

$$H\Psi(r, R) = E\Psi(r, R) \quad (I.5)$$

Où H est l'Hamiltonien du système, r et R étant respectivement les positions des électrons et des noyaux.

Le problème général peut être posé sous la forme d'une équation de mouvement de toutes les particules présentes dans le cristal. L'Hamiltonien exact du cristal (non relativiste) résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : Répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons).

$$H_e = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (I.6)$$

Où

Le 1^{ier} et le 2^{ième} terme de l'équation sont respectivement l'énergie cinétique des électrons et des noyaux.

Le troisième et les deux derniers termes sont les énergies d'interaction : électron-électron, électron-noyau et noyau-noyau respectivement

Toutes les propriétés observables du système électrons-noyaux sont contenues dans l'équation (I.5). Il suffit donc de la résoudre pour avoir accès aux états du système et à ses propriétés physiques et chimiques. Mais, la résolution de l'équation de Schrödinger à plusieurs particules est le problème le plus fondamental en physique à l'état solide, cette équation reste trop compliquée pour que des solutions analytiques soient données, c'est pourquoi des nombreuses approches visant à résoudre cette équation font appel à quelques approximations fondamentales que nous allons exposer.

I.3.2. Approximation de Born-Oppenheimer :

La première approximation proposé pour résoudre le problème de l'équation (I.5) est celle de Born-Oppenheimer (1927) nommée aussi adiabatique [7], cette approximation permet

de séparer le mouvement des électrons de celui des noyaux en se basant sur le fait que les électrons sont beaucoup plus légers et qu'ils bougent donc beaucoup plus rapidement que les noyaux, de telle sorte qu'à chaque instant les noyaux semblent figés pour les électrons. L'équation de Schrödinger à n électrons et à N noyaux peut ainsi être séparée en une partie nucléaire et une partie électronique, d'où la fonction d'onde de l'équation (I.5) dans l'approximation de Born-Oppenheimer, peut donc s'écrire sous la forme d'un produit de deux fonctions :

$$\Psi(r, R) = \Psi_e(r, R) \Psi_n(R) \quad (I.7)$$

$\Psi_n(R)$ est la fonction d'onde nucléaire et $\Psi_e(R, r)$ est la fonction d'onde électronique correspondant à une position R des noyaux figés.

Avec cette approximation le deuxième terme de l'équation (I.6), l'énergie cinétique des noyaux, peut être négligé, et le cinquième, la répulsion nucléaire, peut être considéré comme constant. Il reste donc que l'Hamiltonien électronique H_e :

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (I.8)$$

On peut donc écrire la fonction d'onde associée à H comme suit :

$$H_e \Psi_e = E \Psi_e \quad (I.9)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer permet de diminuer significativement le nombre de variables, mais elle nous laisse malgré tout face à un problème complexe (problème à N_e corps). Des approximations supplémentaires sont nécessaires pour résoudre le problème.

I.3.3. Approximation de Hartree :

La résolution de l'équation I.9 est toujours assez compliquée due aux interactions électron-électron, pour éviter ce problème Hartree a introduit en 1928 [8] une approximation qui consiste à réduire le problème de N_e corps à une seule particule en développant la fonction d'onde du système électronique à un produit direct des fonctions d'onde à une particule $\psi_i(r_i)$

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \dots \psi_n(r_n) = \prod_{i=1}^n \psi_i(r_i) \quad (I.10)$$

Où l'indice i désigne l'orbitale i ($i = 1, 2, 3, \dots n$).

L'approximation de Hartree considère les électrons comme indépendants, chacun d'eux se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et la densité électronique moyenne des autres électrons.

Où on peut définir l'Hamiltonien à un électron H_i comme suit :

$$H_i = \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_N(r_i) \quad (I.11)$$

$V_N(r_i)$ est le potentiel nucléaire pour le $i^{\text{ème}}$ électron, considéré comme

$$V_N(r_i) = -\sum_{n=1}^N \frac{Z_n e^2}{|R_n - r_i|} \quad (I.12)$$

Les équations de Hartree pour un système mono-électronique :

$$H_i \Psi_i(r) = \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_N(r) + \sum_{j=1, j \neq i}^M \int \frac{e^2 |\Psi_j(r')|^2}{|r - r'|} d^3 r' \right) \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (I.13)$$

L'approximation de Hartree est utile comme outil d'illustration, mais ce n'est pas une approximation très précise. Une lacune importante de la fonction d'onde Hartree est qu'il ne tient pas compte de la nature antisymétrique des électrons comme l'exige le principe de Pauli [9]. De plus, l'équation de Hartree est difficile à résoudre, cela signifie que si il y a N_e électrons, alors N Hamilton doit être considéré et l'équation I.13 doit être résolu pour chaque orbitale.

I.3.4.Approximation de Hartree-Fock (HF) :

Une solution auto-cohérente avec l'équation de Hartree est difficile surtout pour un nombre d'électrons élevés. Fock en 1930 [10] a montré que la solution de l'équation de Hartree violent le principe d'exclusion de Pauli puisque elles ne sont pas antisymétriques par rapport à l'échange de deux électrons. Dans l'approximation de Hartree-Fock le fait que les électrons sont des fermions et doivent avoir des fonctions d'onde antisymétriques est explicitement pris en compte. De façon générale le principe de Pauli exige que la fonction d'onde à plusieurs particules soit antisymétrique dans l'échangeur de toutes les coordonnées de deux électrons :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_{N_e}) = -\Psi(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_{N_e}) \quad (I.14)$$

Hartree et Fock ont généralisé ce concept en montrant que le principe d'exclusion de Pauli est respecté si l'on écrit la fonction d'onde sous la forme d'un déterminant construit à partir de n spin-orbitales ; on obtient alors ce qui est connu sous le nom de « déterminant de Slater ». C'est probablement la forme la plus simple qui intègre les propriétés requises de symétrie pour les fermions, ou des particules de spin non entiers :

$$\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_{N_e}\sigma_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \psi_1(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_1(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \\ \psi_2(r_1\sigma_1) & \psi_2(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_2(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{N_e}(r_1\sigma_1) & \psi_{N_e}(r_2\sigma_2) & \dots & \psi_{N_e}(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \end{vmatrix} \quad (I.15)$$

σ_i représente le spin.

L'équation précédente conduit aux équations de Hartree-Fock pour un système à une particule :

$$\begin{aligned} H_i \Psi_i(r) &= \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_N(r) + \sum_{j=1}^{N_e} \int \frac{e^2 |\psi_j(r')|^2}{|r-r'|} d^3 r' \right) \Psi_i(r) - \sum_{j=1}^{N_e} \int \frac{e^2}{|r-r'|} \psi_j^*(r') \psi_j(r) d^3 r' \delta_{\sigma_j \sigma_i} \Psi_i(r) \\ &= E_i \Psi_i(r) \end{aligned} \quad (I.16)$$

Une fois que les orbitales de Hartree-Fock ont été obtenus, l'énergie électronique totale Hartree-Fock du système, E_{HF} , peut être donnée à partir de l'équation suivante :

$$E_{HF} = \sum_i^{N_e} E_i - \frac{1}{2} \int \rho(r) V_H(r) d^3 r - \frac{1}{2} \sum_i^{N_e} \int \psi_i^*(r) \psi_i(r) V_X^i(r) d^3 r \quad (I.17)$$

Avec $V_H(r)$ est le potentiel de Hartree donné par la formule :

$$V_H(r) = \int \rho(r') \frac{e^2}{|r-r'|} d^3 r' \quad (I.18)$$

ρ est la densité de charge électronique, $\rho = \sum_{j=1}^{N_e} |\psi_j(r)|^2$.

En principe l'HF pose des problèmes [11] :

- caractère non local du potentiel d'échange.
- Ne tient pas compte des effets de corrélation entre électrons de spins antiparallèles.

- Ces équations sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

I.3.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a été établie par Hohenberg et Kohn (1964) [12]. L'idée de Hohenberg et Kohn fut d'étendre le principe du cas idéal d'un gaz homogène d'électrons à tout système électronique (en particulier les molécules et autres surfaces...). Cette théorie repose sur deux théorèmes fondamentaux

Le premier théorème peut être énoncé ainsi : le potentiel extérieur V_{ext} est uniquement une fonctionnelle de la densité. Comme V_{ext} détermine l'Hamiltonien du système, la densité est la seule fonction nécessaire pour définir l'état fondamental du système.

Le deuxième théorème, qui provient directement du premier théorème en appliquant le principe variationnel est : la fonctionnelle de l'énergie admet un minimum E_0 , l'énergie de l'état fondamental, pour la densité ρ_0 .

La méthode fonctionnelle de la densité a rencontré un succès considérable pour le calcul des énergies de liaison, les paramètres de maille. Elle a été appliquée à une variété d'autres systèmes, y compris des atomes, des molécules, des semiconducteurs, des isolants, la DFT a des difficultés à prédire les énergies d'excitation [12].

I.3.5.1. Approximation de la densité locale (LDA) :

Dans un certain nombre de documents classiques Hohenberg, Kohn et Sham ont établi un cadre théorique pour justifier le remplacement de la fonction d'onde à plusieurs corps par une fonction à un électron [12-13-14]. En particulier, ils ont proposé que la densité de charge joue un rôle essentiel dans la description de la structure électronique de la matière. Un aspect essentiel de leur travail est le rapprochement de la densité locale (LDA), elle est la plus répandue pour le calcul du terme d'échange-corrélation. Dans cette approximation, on peut exprimer l'énergie d'échange-corrélation comme suit [15] :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}[\rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad (\text{I.19})$$

Où $\varepsilon_{XC}(\rho)$ est l'énergie d'échange-corrélation par électron d'un gaz homogène d'électron de densité $\rho(r)$, cette approximation remplace donc le potentiel d'échange-corrélation en chaque point de l'espace par celui d'un gaz uniforme d'électron. Le gaz d'électron est pris de la même densité que la densité au point calculé. Cette approximation est raisonnable pour des systèmes faiblement inhomogènes.

I.3.5.2. Approximation du gradient généralisé (GGA)

La manière la plus naturelle d'améliorer la LDA est de tenir compte de l'inhomogénéité de la densité électronique en introduisant dans l'énergie d'échange-corrélation des termes dépendant du gradient de la densité. La GGA (generalized gradient approximation) [16] permet d'introduire une combinaison entre les termes locaux et des termes dépendant du gradient. La forme typique de la fonction GGA est [15]

$$E_{XC}^{GGA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}(\rho(r), \nabla \rho(r)) d\vec{r} \quad (I.20)$$

Elle donne de bons résultats et permet d'améliorer les énergies de cohésion et les paramètres de maille. Cependant, l'amélioration par rapport à la LDA n'est pas toujours systématique car la GGA sur corrige parfois la LDA.

I.3.6. Méthode des liaisons fortes :

Elle a été proposée par Bloch, et a été l'un des premiers types de calcul de structure de bande. L'approximation des liaisons fortes est valable pour les électrons internes ou fondamentaux de la plupart des solides [11]. La construction de fonctions d'onde d'électrons est obtenue en utilisant la méthode de LCAO, et les bandes d'énergie des électrons sont calculées pour que le potentiel de cristal périodique correspondant. Les orbitales atomiques sont centrés sur l'un des atomes constitutifs du cristal.

Les fonctions d'onde de l'orbite de cristal $\Psi_k(r)$ correspondant au vecteur d'onde k peuvent être représentés par une somme de Bloch, qui est

$$\Psi_k(r) = \sum_j C_j(k) \Psi_n(r - R_j) \quad (I.21)$$

$\Psi_n(r - R_i)$ représente les fonctions d'onde orbitales atomiques centrées sur le site du réseau R_j . Le coefficient $C_j(k)$, qui satisfait la condition Bloch, peut s'écrire sous la forme

$$C_j = e^{ik \cdot R_j} \quad (I.22)$$

On remplaçant l'équation I.19 dans l'équation I.20 on obtient

$$\Psi_k(r) = \sum_j e^{ik \cdot r} e^{-ik \cdot (r - R_j)} \Psi_n(r - R_j) = e^{ik \cdot r} U_{k,n}(r) \quad (I.23)$$

Si $\Psi_n(r - R_i)$ représente un ensemble de fonctions d'onde orbitales atomiques satisfaisant l'équation de Schrödinger d'atome libre, alors on peut écrire

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) \nabla^2 \Psi_n(r - R_j) + V_{n0}(r - R_j) \Psi_n(r - R_j) = E_{n0} \Psi_n(r - R_j) \quad (I.24)$$

Multipliant (I.22) par la fonction d'onde conjuguée $\Psi_n^*(r - R_i)$, et en intégrant

l'équation sur tout l'espace, on obtient l'énergie

$$E_k = \Psi_k^*(r) H \Psi_k(r) dr^3$$

$$= \left(\frac{1}{NV} \right) \left(\int \sum_{ij} e^{ik(R_j - R_i)} \Psi_n^*(r - R_i) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V_{n0}(r - R_j) \right] \Psi_n(r - R_j) dr^3 \right. \\ \left. + \int \sum_{ij} e^{ik(R_j - R_i)} \Psi_n^* V'(r - R_j) dr^3 \right) \quad (I.25)$$

I.3.7. Méthode des ondes planes augmentées (APW) :

La méthode de l'onde plane augmentée a été développée par J. C. Slater en 1937 [17]. L'hypothèse de base du procédé est que le potentiel dans une région sphérique près d'un atome est à symétrie sphérique, alors que le potentiel dans les régions à l'extérieur de l'atome est supposé constant. Ainsi, on obtient un "muffintin". La fonction d'onde du cristal est orientée sous la forme d'une combinaison d'ondes planes dans la région interstitielle et des fonctions d'ondes atomiques à l'intérieur de l'atome. L'équation d'onde du système est donnée par la relation suivante :

$$\Psi_k(r) = \Theta(r - r_i) e^{ik \cdot r} + \sum_{i=1}^N \Theta(r - r_i) \psi_i \quad (I.26)$$

Où : $\Theta(x)$: est une fonction unité en marche d'escalier introduisant soit une onde plane pour $r > r_i$, soit une fonction d'onde atomique pour $r < r_i$.

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{pour } x > 0 \\ 0 & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (I.27)$$

I.3.8. Méthode des ondes planes orthogonalités (OPW) :

La méthode des ondes planes orthogonales (OPW pour *orthogonalized planes waves*) a été introduite par Convers Herring dans les années 1940 [18]. La méthode permet de mieux comprendre la nature de la structure de bande des matériaux semiconducteurs tels que le silicium et le germanium et fut la première à expliquer de manière théorique que le silicium est un matériau à gap indirect [19]

De manière concrète, la méthode OPW est une approche générale qui vise à construire des fonctions de bases pour la description des états de valence, ces fonctions sont définies de la manière suivante :

$$\Phi_{kj}(r) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum e^{i(k \cdot n)} \Psi_j^a(r - R_j) \quad (I.28)$$

La fonction d'onde à construire est de la forme :

$$\Phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k \cdot R_j)} - \sum \chi_{kj} \Phi_{kj}(r) \quad (I.29)$$

Le développement de cette méthode est l'ancêtre direct de la notion de pseudopotentiel.

I.3.9. La méthode pseudopotentiel :

Le concept de pseudopotentiel a été introduit dans les années 1930 par Fermi [20]. Le pseudopotentiel est une technique puissante pour résoudre des structures de bande des semiconducteurs, elle est souvent utilisée comme un point de référence pour la comparaison des autres techniques. Comme la méthode de l'onde plane orthogonale, la méthode pseudopotentielle utilise l'information selon laquelle les bandes de valence et de conduction sont orthogonales aux états de base. Cependant, cette information n'est pas seulement utilisée dans la construction des états de Bloch, mais elle est incluse dans l'Hamiltonien lui-même.

Références

- [1] S. Kasap and P. Capper, Handbook of electronic and Photonic Materials. Springer (2006).
- [2] M. Razeghi. Fundamentals of Solid state Engineering, *Pd Edition* Springer (2006).
- [3] Sheng S. Li. Semiconductor Physical Electronics, second Ed, Springer (2006).
- [4] E. F. Schubert, E. O. Gobel, Y. Horikoshi, k. Ploog and H. J. Queisser, Phys. Rev. B, **30** (1984) 813.
- [5] L. Vegard, Z. Phys, **5** (1921) 17.
- [6] O. Madelung, Semiconductor Data Handbook (from CDROM) third Ed, Springer (2004).
- [7] M. Born and R. Oppenheimer, Ann. Phys. **74** (1927) 1.
- [8] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. **24** (1928) 89.
- [9] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, New York: Springer (1996).
- [10] V.A. Fock, Z. Phys., **15**, (1930) 126.
- [11] J. D. Patterson, B. C. Bailey, Solid-State Physics Introduction to the Theory, Springer (2007).
- [12] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev, B*, **136** (1964) 864.
- [13] S. Lundqvist and N. H. March (eds) *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, New York: Plenum (1983).
- [14] W. Kohn and L. Sham, *Phys. Rev, A*, **140** (1965) 1133.
- [15] W. Koch, M. C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, second Ed Wiley-VCH (2001).
- [16] U. Rossler and J. Treusch. *Rep. Prog. Phys.* **35** (1972) 883.
- [17] J. C. Slater Phys. Rev. **51**, (1937) 846.
- [18] C. Herring, Phys. Rev. **57**, (1940) 1169.
- [19] F. Bassani, Phys. Rev, **108**, (1957) 263.

[20] P. Y. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties, 4th ed, Springer (2010).

CHAPITRE II

MÉTHODE PSEUDOPOTENTIEL

Méthode pseudopotentiel

II.1. Introduction :

Les calculs numériques sur l'état fondamental électronique d'un système rencontrent des problèmes techniques supplémentaires. En effet, ils deviennent de plus en plus onéreux au fur et à mesure que le système à traiter contient un grand nombre d'électrons. Les méthodes pseudopotentielles ont été initialement introduites pour simplifier les calculs de structure électronique en éliminant la nécessité d'inclure les états de base atomiques et les forts potentiels responsables de leur liaison [1]. Des progrès considérables ont été accomplis dans la description de la structure de bande de semiconducteurs et les métaux simples avec l'utilisation de la méthode du pseudopotentiel empirique. Le concept de pseudopotentiels a été introduit par Fermi en 1940 [2], l'approximation de pseudopotentiel a été introduite par Philips [3] et par Philips et Kleinman [4].

L'idée fondamentale d'un "pseudopotentiel" est le remplacement d'un problème par un autre, l'application principale de la structure électronique est de remplacer le potentiel de Coulomb forte du noyau et les effets des électrons du cœur étroitement liées par un acteur potentiel ionique efficace sur les électrons de valence. Un pseudopotentiel peut être généré dans un calcul atomique et ensuite utilisé dans le calcul des propriétés des électrons de valence dans les molécules ou les solides, puisque les États de base restent pratiquement inchangés. En outre, le fait que des pseudos ne sont pas uniques permet la liberté de choisir les formes qui simplifient les calculs et l'interprétation de la structure électronique qui en résulte [5].

II.2. Concept de pseudopotentiel :

La méthode du pseudopotentiel est basée sur le concept de l'introduction d'un pseudopotentiel pour un cristal qui conduira aux mêmes niveaux d'énergie que le potentiel du cristal réel, mais n'ont pas les mêmes fonctions d'onde.

les électrons du cœur sont regroupés avec les noyaux, forme des ions rigides, On peut aller plus loin en remplaçant l'interaction des électrons de valence avec l'ensemble (noyau et électrons de cœur) par un potentiel effectif beaucoup moins attractif que le potentiel créé par le noyau avec tout les électrons, c'est ce potentiel effectif qu'on appelle un pseudopotentiel, voir la figure (II.1).

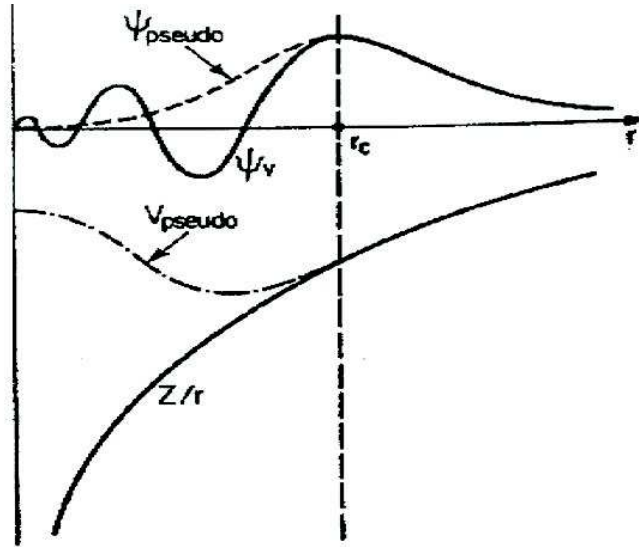


Figure II.1 : Profils généraux du potentiel réel de la fonction d'onde réelle (tirés), du pseudopotentiel et de pseudo-fonction d'onde correspondants (lignes solides).

Le formalisme le plus générale du pseudopotentiel à été donné par Cohen et Heine [6] et par Austin et al [7]. La méthode pseudopotentielle est largement utilisée dans le calcul de la structure de bandes de plusieurs matériaux en particulier les semiconducteurs [8-9-10], W. A. Harrison a relié la méthode au calcul des structures de bandes des métaux [11].

L'équation de Schrödinger pour les bandes de valence ou de conduction pour une particule est

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(r) \right] \Psi_v(k, r) = E_v \Psi_v(k, r) \quad (\text{I.1})$$

Dans la méthode de Phillips et Kleinman, la fonction d'onde de valence (à une particule) d'énergie est donnée par :

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (\text{II.2})$$

La fonction d'onde ψ doit être orthogonale aux états du cœur ϕ_c , ainsi que $\langle \phi_c | \psi \rangle = 0$ ce qui implique que :

$$\psi = \phi - \sum_c \langle \phi_c | \phi \rangle \phi_c \quad (\text{II.3})$$

En substituant l'expression de l'équation (II.3) dans l'équation (II.2) :

$$H\phi + \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle = E\phi \quad (\text{II.4})$$

Cette équation peut s'écrire sous la forme suivante :

$$(H + V_R) \phi = E \phi \quad (\text{II.5})$$

Où

$$V_R \phi = \sum_c (E - E_c) \phi_c \langle \phi_c | \phi \rangle \quad (\text{II.6})$$

V_R représente le potentiel répulsif.

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_c + V_R \right) \phi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_P \right) \phi = E \phi \quad (\text{II.7})$$

$V_P = V_c + V_R$: est le pseudopotentiel avec V_c et V_R sont le potentiel attractif et répulsif respectivement.

II.3. Les modèles du pseudopotentiel :

Il existe deux types de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local (EPM local) et le pseudopotentiel non local (EPM non local).

II.3.1. Le modèle local :

Le modèle local de la EPM est largement utilisé dans le calcul des structure de bandes des semiconducteurs, elle ne tient pas compte de la dépendance énergétique du pseudopotentiel avec les états du moment angulaire représentant les états du cœur [12]. Ce model se trouve sous plusieurs forme le premier est le plus simple où il consiste en un potentiel de Coulomb constant et à large distance dans la région du cœur exprimé par la relation suivante [13] :

$$V(r) = \begin{cases} -Z_e / r & r > r_c \\ -Z_e / r_c & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

Où Z et r_c sont respectivement le nombre d'électrons de valence et le rayon du cœur atomique.

La deuxième forme du model locale est celle de Heine et Abarenkov [14] ont introduisant plus de flexibilité par l'ajout d'un potentiel A considéré comme constant dans la région du cœur, le potentiel est :

$$V(r) = \begin{cases} -Z_e / r & r > r_c \\ A & r \leq r_c \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

L'autre forme du model locale est de Ashcroft [13] qui introduit un potentiel nulle qui représente le potentiel du cœur inoccupé :

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

II.3.1. Le modèle non-local :

Le modèle non local consiste à remplacer la constante A du modèle local par la fonction $A_l(E)$, de tel sorte que [15] :

$$V_P = V_{NL}(r, E) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (\text{II.12})$$

Où $A_l(E)$ est appelée énergie des états profonds, c'est la constante de la dépendance du potentiel en énergie des états du cœur.

P_l : est l'opérateur de projection de la l^{ieme} composante des moments angulaires.

$f_l(r)$: est la fonction qui représente l'effet de l'état du cœur, elle peut prendre plusieurs formes telle que la forme d'Ashcroft, de Heine-Abarenkov.

a. La fonction de Heirne-Abarenkov :

La fonction de Heine-Abarenkov [14] est simple et à une forme carrée, son expression est la suivante :

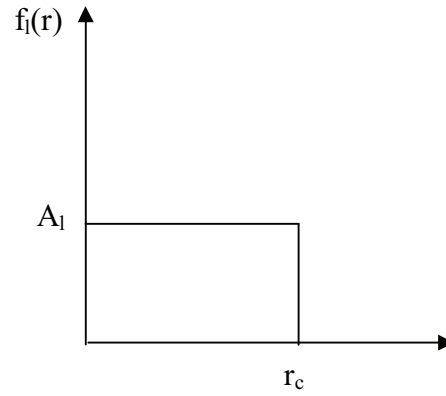


Figure II.2 : tracer de la fonction de Heirne-Abarenkov.

$$f_l(r) = \begin{cases} 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (\text{II.13})$$

b. La fonction de Gauss :

C'est une fonction de forme Gaussienne [16] comme le montre la figure II.3, elle est exprimée par la relation :

$$f_l(r) = \exp(-r^2 / r_c^2) \quad (\text{II.14})$$

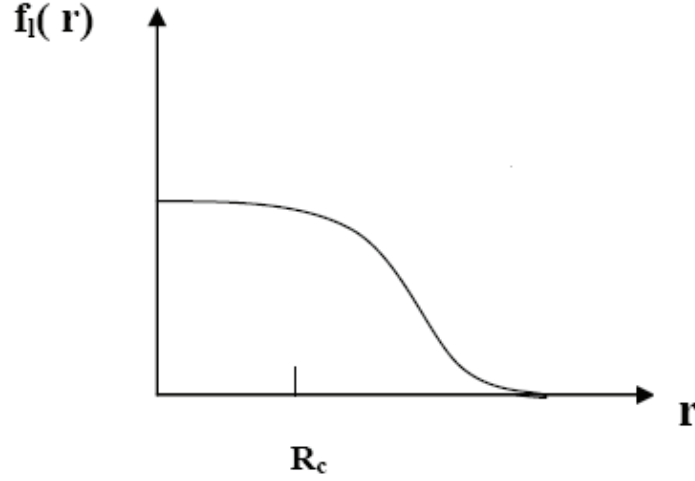


Figure II.3 : Tracé de la fonction de Gauss.

II.4. La méthode empirique de pseudopotentiel (E.P.M) :

La méthode du pseudopotentiel, est largement appliquée dans les semiconducteurs de structure diamant et zinc blende, les calculs pseudopotentiels sont effectués par l'emploi des facteurs de formes $V(G)$ obtenues par ajustements théoriques aux observations sur la réflexion et l'absorption des cristaux. L'E.P.M est employé essentiellement dans le calcul de structure de bandes électronique où le potentiel cristallin est représenté par la superposition de potentiels atomique qui sont modifié jusqu'à l'obtention d'un bon accord avec la bande d'énergie expérimentale à un point sélectionné dans la première zone de Brillouin [17,18].

$$V_p(r) = \sum_{R,\tau} V_a(r - R - \tau) \quad (\text{II.15})$$

R : est le vecteur du réseau direct.

τ : est le vecteur de translation du réseau direct.

Si on étend le potentiel $V_p(r)$ dans le réseau réciproque, il aura la forme suivante :

$$V_p(r) = \sum_G S(G) V(G) \exp(iGr) \quad (\text{II.16})$$

$S(G)$: est le facteur de structure donné par

$$S(G) = \frac{1}{N_a} \sum_r \exp(iGr) \quad (\text{II.17})$$

Dans la structure zinc blende les facteurs de forme symétriques et antisymétriques sont donnés par :

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) + V_B(G)] \quad (\text{II.17})$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_A(G) - V_B(G)] \quad (\text{II.18})$$

Avec V^S et V^A sont respectivement les facteurs de forme symétriques et antisymétriques.

$V_A(G)$ et $V_B(G)$ sont respectivement le facteur de forme de l'atome A et B.

La procédure de calcul de la méthode EPM est projetée dans l'organigramme présenté dans la figure II.4, qui se résume :

- 1- choisir les facteurs de forme $V(G)$.
- 2- Résolution de l'équation de Schrödinger pour les valeurs propres $E(k)$ d'énergie et les fonctions d'ondes $\psi(k)$.
- 3- Les valeurs calculées de l'énergie sont comparé avec l'expérience.

$V(G)$ est altéré si on n'obtient pas un bon accord entre l'expérience et la théorie .si non, le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'un bon accord entre l'expérience et les calculs.

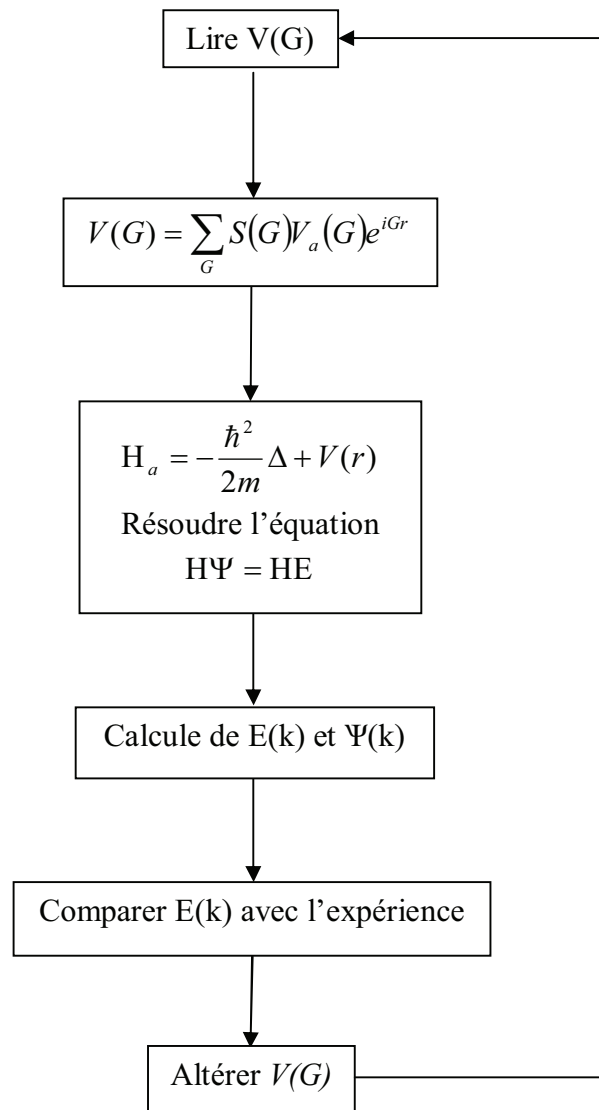


Figure II-4 : Diagramme de la procédure de calcul par EPM.

Références

- [1] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, New York: Springer (1996).
- [2] E. fermi, Article dans *Nuovo Cimento*, **11**, (1934) 157.
- [3] J. C. Phillips, Phys. Rev, **112**, (1958) 685.
- [4] J. C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. **116**, (1959) 287.
- [5] M. Razeghi. Fundamentals of Solid state Engineering, *Pd Edition* Springer (2006).
- [6] M. Cohen and V. Heine, *Phys Rev*, **122** (1961) 1821.
- [7] B. J. Austin et al, *Phys Rev*, **127** (1962) 276.
- [8] M. L. Cohen, *Physics Today*, **33** (1979) 40.
- [9] M. L Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 2nd edn. (1989).
- [10] Cohen ML and Heine V, *Solid State Physics, Advances in Research and Applications*, **24**, (1970) 37.
- [11] W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the theory of Metals*, W A Benjamin, Inc., New York (1966).
- [12] R. W. Shaw and W. A. Harrison, Phys. Rev. 163, (1967) 604.
- [13] N.Achcroft, Phys. Lett. 23, (1966) 48.
- [14] I.V.Abarenkov and V.Heine, Phil. Mag. 12 (1965) 529.
- [15] C.S.Wang,B.M.Klein,Phys.Rev.**B24** (1981) 3417.
- [16] W.B.Holzapfel, Rep.Prog, Phys. 59 (1996) 29.
- [17] N. Bouarissa and M. Boucenna, Phys. Scr. **79** (2009) 015701 (7pp).
- [18] Y. Al-Douri, N.M. Ahmed, N. Bouarissa, A. Bouhemadou, Materials and Design **32** (2011) 4088.

CHAPITRE III

***ETUDE DES PROPRIÉTÉS OPTIQUES ET
ÉLASTIQUES DES SEMICONDUCTEURS***

Etude des propriétés optiques et élastiques des semiconducteurs

III.1. Propriétés optiques

III.1.1. Introduction :

Les propriétés optiques d'un semiconducteur peuvent être définies à partir des interactions entre le rayonnement électromagnétique (la lumière) et le semiconducteur à étudier, y compris l'absorption, diffraction, polarisation, réflexion, réfraction, et des effets de diffusion. Le spectre électromagnétique est un véhicule important pour donner un aperçu des types de mesures et de procédés physiques caractéristiques des différentes régions d'intérêt entre les propriétés optiques des semiconducteurs [1]. L'interaction du rayonnement électromagnétique (EM) avec la matière a fourni au fil des ans un outil efficace et puissant pour comprendre et sonder les états électroniques et de vibration ainsi que l'étude des propriétés optiques. Les équations de Maxwell décrivent la propagation des ondes EM [2] :

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \mu \mu_0 \vec{H} \quad (\text{III.1})$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial}{\partial t} \epsilon \epsilon_0 \vec{E} \quad (\text{III.2})$$

Ainsi que les relations de divergence pour l'induction et le déplacement

$$\nabla \cdot \epsilon \epsilon_0 \vec{E} = 0 \quad (\text{III.3})$$

$$\nabla \cdot \mu \mu_0 \vec{H} = 0 \quad (\text{III.4})$$

Où : E et H sont les champs électrique et magnétique respectivement.

Avec $\epsilon \epsilon_0$ la permittivité électrique et $\mu \mu_0$ la perméabilité magnétique qui décrivent l'interaction de matière avec les champs électriques et magnétiques respectivement où ϵ_0 et μ_0 sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du vide.

À partir des équations précédentes on peut déduire l'équation d'onde habituelle :

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (\text{III.5})$$

Où $c = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1/2}$ est la vitesse de la lumière dans le vide. La solution de l'équation d'onde plane incidente est

$$E(r) = E_0 \exp[i(k \cdot r - \omega t)] \quad (\text{III.6})$$

Où ω est la fréquence et k est le vecteur d'onde

$$k^2 = \mu_0 (\varepsilon \omega^2 + i \sigma \omega) \quad (\text{III.7})$$

$$\text{Où } c = 1/(\mu_0 \varepsilon_0)^{1/2}$$

L'interaction du vecteur champ magnétique H avec des semi-conducteurs est généralement faible, et il sera négligé par la suite ($\mu = 1$). Le champ électrique $\vec{E}$ interagit avec les charges libres et liés dans les semiconducteurs. Sous l'influence du champ électrique, les frais liés (électrons de valence et de noyaux d'atomes ioniques) sont légèrement séparés de leur position moyenne, créant ainsi une polarisation électrique interne.

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E} \quad (\text{III.8})$$

Avec χ est la susceptibilité électrique, ce paramètre est lié à la constante diélectrique par $\varepsilon = \chi + 1$.

P est une quantité macroscopique par conséquent les équations de Maxwell, y compris la polarisation P sont définis pour décrire l'électrodynamique macroscopique du milieu.

III.1.2. Equation de dispersion :

Les propriétés optiques macroscopiques des semiconducteurs peuvent être caractérisées par l'indice de réfraction complexe n^* où la partie réelle n représente l'indice de réfraction et la partie imaginaire k est connue comme l'indice d'extinction. Un certain nombre de relations intéressantes peuvent être dérivées qui relient les parties réelle ε_r et imaginaire ε_i de la fonction diélectrique, et les constantes optiques. Ces soi-disant les relations de dispersion optique et règles de somme ont été extrêmement précieux dans l'analyse et le test des données constantes optiques. La fonction diélectrique complexe est [3]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + i \varepsilon_i(\omega) \quad (\text{III.9})$$

Si l'on suppose que l'intensité du champ de rayonnement incident soit assez faible pour que la polarisation induite soit linéairement dépendante du champ électrique, à la fois $\chi(\omega)$ et $\varepsilon(\omega)$ décrivent les réponses linéaires d'un milieu à un champ extérieur [4], les équations les plus répondu sont celle de Kronig-Kramers.

$$\varepsilon_r(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P_i \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_i(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (\text{III.10a})$$

$$\varepsilon_i(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P_i \int_0^\infty \frac{\varepsilon_r(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (\text{III.10b})$$

Où P_i représente la valeur principale de l'intégral de Cauchy et ω' est la variable d'intégration.

L'indice de réfraction complexe peut être donné par

$$n^* = n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \sqrt{\varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega)} \quad (\text{III.11})$$

Les constantes optiques $n(\omega)$ et $k(\omega)$, sont des nombres réels et positifs, et peuvent être déterminées à partir de mesures optiques, de l'équation (III.11), n et k s'écrivent

$$\varepsilon_r(\omega) = n^2 - k^2 \quad (\text{III.12a})$$

$$\varepsilon_i(\omega) = 2nk \quad (\text{III.12b})$$

Les relations de Kramers-Kronig peuvent également lier $n(E)$ et $k(E)$ de la manière suivante :

$$n(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' k(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.13a})$$

$$k(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{n(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\text{III.13b})$$

III.1.3. Indice de réfraction et la dispersion:

La relation de dispersion la plus populaire dans les matériaux optiques est probablement celle de Sellmeier puisque l'on peut résumer un certain nombre de termes de type de résonance pour obtenir une gamme aussi large de la longueur d'onde que possible. Cependant, son principal inconvénient est qu'il ne représente pas exactement l'indice de réfraction quand il s'agit d'une contribution provenant de porteurs libres dans l'étroite bande interdite ou semi-conducteurs dopés.

III.1.3.1. Equation de dispersion de Sellmeier :

L'équation Sellmeier est une relation empirique entre l'indice de réfraction n d'une substance et de longueur d'onde λ de la lumière sous la forme d'une série de termes d'oscillateur à dipôle unique dont chacun est de forme $\lambda^2/(\lambda^2 - \lambda_i^2)$, la dépendance comme dans l'équation suivante :

$$n^2 = 1 + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_3^2} + \dots \quad (\text{III.14})$$

Où λ_i est une constante, et $A_1, A_2, A_3, \lambda_1, \lambda_2$ et λ_3 sont les coefficients de Sellmeier, qui sont déterminées en ajustant cette expression aux données expérimentales.

III.1.3.2. Equation de dispersion de Cauchy :

Dans l'équation de Cauchy, la relation de dispersion entre l'indice de réfraction (n) et la longueur d'onde λ de la lumière est généralement indiquée dans le formulaire ci-dessous :

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (\text{III.15})$$

Où A, B, et C sont des constantes spécifiques dépendantes des matériaux. L'équation (III.15) est connue comme la formule de Cauchy et elle est généralement utilisée dans la région visible du spectre pour les différents verres optiques et elle est applicable à dispersion normale, lorsque n diminue avec l'augmentation de λ [5, 6].

III.1.4. Constantes optiques :

L'indice de réfraction représente l'un des plus importantes constantes optiques qui dépend généralement de la longueur d'onde d'une onde électromagnétique.

III.1.4.1. Calcul de l'indice de réfraction :

La plupart des propriétés optiques des semi-conducteurs sont intégralement liées à la nature particulière de leurs structures de bandes électroniques qui sont à leur tour liées à la nature de la structure cristallographique, les atomes en particuliers et leur liaison. De nombreuses tentatives ont été faites pour évaluer l'indice de réfraction de divers matériaux en le mettant en relation avec l'énergie de gap E_g .

1- Moss a proposé une formule qui se base sur un modèle atomique [7] :

$$E_g n^4 = 108 \quad (\text{III-16})$$

2- une relation empirique pour $n(\omega)$ a été proposée par Herve et Vandamme [8] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (\text{III-17})$$

Où A et B sont respectivement des constantes de valeurs 13.6 eV et 3.4 eV, et ω_0 est la fréquence de résonance ultraviolet.

3- Une relation linéaire a été proposée par Ravendra et al [9] :

$$n = \alpha + \beta E_g \quad (\text{III-18})$$

Où $\alpha=4.048$ et $\beta=-0.62\text{eV}^{-1}$

4- Et Ghosh [10] a proposé la relation suivante :

$$n = \sqrt{1 + \frac{A_c}{(E_g + B)^2}} \quad (\text{III-19})$$

Où

$$A_c = 25E_g + 212 \quad \text{et} \quad B = 0.21E_g + 4.25$$

III.1.4.2. constante diélectrique :

À partir du calcul de l'indice de réfraction on peut déterminer la constante diélectrique à haute fréquence par la relation [11] :

$$\varepsilon_\infty = n^2 \quad (\text{III-20})$$

La constante diélectrique statique est obtenue à partir de la relation de Harrison [12] :

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_\infty - 1} = 1 + \nu \quad (\text{III-21})$$

Où ν est donné par [13] :

$$\nu = \frac{\alpha_p (1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (\text{III-22})$$

α_c : la covalence

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (\text{III-23})$$

α_p est la polarité du matériau sous investigation déterminé par la définition de Vogel [14],

$$\alpha_p = -\frac{V_A(3)}{V_S(3)} \quad (\text{III-24})$$

V_S , V_A sont respectivement, les facteurs de forme symétrique et antisymétrique.

III.2. Propriétés élastique des semiconducteurs :

III.2.1. contrainte élastiques :

Les propriétés élastiques d'un cristal considéré comme un milieu continu homogène plutôt que comme un réseau périodique d'atomes. L'approximation des milieux continus est généralement valable pour les ondes élastiques de longueurs d'onde λ plus de 10^{-6} cm, ce qui signifie, pour les fréquences inférieures à 10^{11} ou 10^{12} Hz. Une partie du matériel ci-dessous semble compliqué en raison de la multiplicité inévitable d'indices sur les symboles. Les idées physiques de base sont simples : nous utilisons la loi de Hooke et la deuxième loi de Newton. La loi de Hooke indique que, dans un solide élastique, la déformation est directement proportionnelle à la contrainte. La loi s'applique uniquement aux petites déformations (faibles contraintes). Nous disons que nous sommes dans la région non linéaire lorsque les pressions sont si importantes et que la loi de Hooke n'est plus remplie [15].

Supposons que trois vecteurs orthogonaux x, y, z de la longueur de l'unité sont intégrés dans le solide sans contrainte, comme le montre la figure (III.1). Après l'application d'une petite déformation uniforme sur le solide, les axes sont déformés en orientation et en longueur. Dans une déformation uniforme primitive chaque cellule du cristal se déforme de la même façon. Les nouveaux axes x', y' et z' peuvent être rédigée en termes des anciens axes [16] :

$$\begin{aligned} x' &= (1 + \varepsilon_{xx})\hat{x} + \varepsilon_{xy}\hat{y} + \varepsilon_{xz}\hat{z} \\ y' &= \varepsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{y} + \varepsilon_{yz}\hat{z} \\ z' &= \varepsilon_{zx}\hat{x} + \varepsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{z} \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

Les coefficients $\varepsilon_{\alpha\beta}$ définissent la déformation ; ils sont sans dimension et ont une valeur $\ll 1$ pour des faibles contraintes.

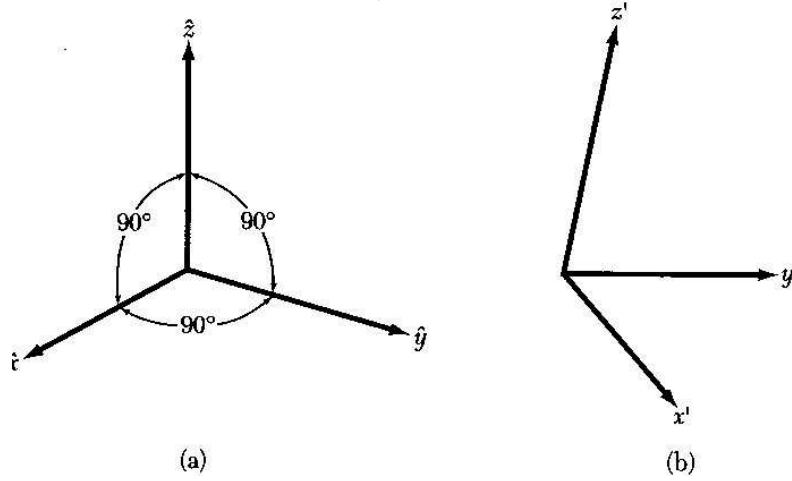


Figure.III.1 : Effet de déformation sur les coordonnées du système x, y, z : (a) sans contrainte
(b) avec contrainte.

Considérons l'effet de la déformation sur un point r qui, dans le cas sans contrainte, est donnée par

$$r = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (\text{III.26})$$

Après la déformation le nouveau vecteur est donné par

$$r' = xx' + yy' + zz' \quad (\text{III.27})$$

Le déplacement R de la déformation est :

$$R = r' - r = x(x' - \hat{x}) + y(y' - \hat{y}) + z(z' - \hat{z}) \quad (\text{III.28})$$

Ou bien

$$R = (x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{yx} + z\varepsilon_{zx})\hat{x} + (x\varepsilon_{xy} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{yz})\hat{y} + (x\varepsilon_{xz} + y\varepsilon_{yz} + z\varepsilon_{zz})\hat{z} \quad (\text{III.29})$$

Ou d'une manière générale par l'emploi des quantités u, v et w ; le déplacement est donné par

$$R = u(r)\hat{x} + v(r)\hat{y} + w(r)\hat{z} \quad (\text{III.30})$$

Pour une déformation non uniforme générale, il faut prendre l'origine de r près de la région d'intérêt et définir une contrainte dépendante de la position. Dans la limite de petite déformation :

$$x\varepsilon_{xx} = x \frac{\partial u}{\partial x} ; y\varepsilon_{yy} = y \frac{\partial v}{\partial y} ; z\varepsilon_{zz} = z \frac{\partial w}{\partial z}, \text{ etc.} \quad (\text{III.31})$$

Plutôt que d'utiliser les $\varepsilon_{\alpha\beta}$ pour décrire la déformation, nous allons utiliser les composants de contrainte suivantes :

$$e_{xx} = \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} ; e_{yy} = \varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} ; e_{zz} = \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (\text{III.32})$$

Les autres composants de contrainte sont définis en termes de changement d'angles entres les axes

III.2.2. Les composantes de contrainte :

Les forces agissent sur l'unité de surface dans un solide est définie comme contrainte. Il existe généralement neuf composantes de contraintes : $X_x, X_y, X_z, Y_x, Y_y, Y_z, Z_x, Z_y$ et Z_z . dans la figure III.2 la composante de contrainte X_x représente la force appliqué dans la direction x du plan normale lié à la direction x et la composante Y_x représente la force appliqué dans la direction x du plan normale lié à la direction y (figure III.2).

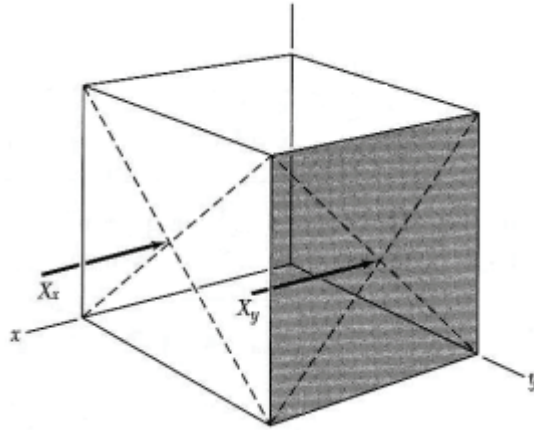


Figure III.2 : X_x est une force appliquée dans la direction x pour une unité de surface d'un plan dont la normale se situe dans la direction x ; X_y est appliquée dans la direction x pour une unité de surface d'un plan dont la normale se situe dans la direction y .

Les composantes de contrainte indépendantes sont réduites à six au lieu de neuf pour des contraintes appliqués à un cube élémentaire (figure III.3) la condition que l'accélération

angulaire s'annule, et donc le couple total doit être égal à zéro. De sorte que : $Y_z=Z_y$; $Z_x=X_z$; $X_y=Y_x$

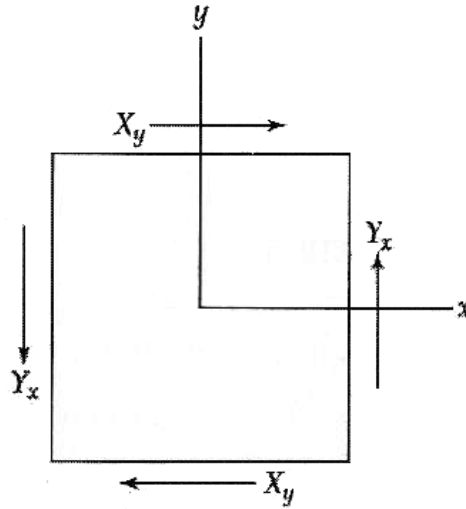


Figure III.3 : Représentations des composantes des contraintes dans un cube élémentaire.

III.2.3. constantes élastiques :

La théorie macroscopique des propriétés élastiques de la matière solide a été décrite en détail dans la notation tensorielle par Nye [17]. Les raideurs élastiques $[C]$ et tenseurs de conformité $[S]$ sont définis par la loi de Hooke généralisée

$$[X] = [C][e] \quad (III.33a)$$

$$[e] = [S][X] \quad (III.33b)$$

Où $[X]$ et $[e]$ sont, respectivement, les contraintes et les tenseurs de déformations élastiques ayant les six composantes. La rigidité et la conformité des tenseurs $[C]$ et $[S]$ sont le quatrième rang de second ordre ayant une symétrie de 6×6 composants.

Il est évident de l'équation précédente que le tenseur de rigidité $[C]$ peut être connecté mutuellement avec le tenseur de conformité $[S]$

$$[C] = [S]^{-1} \quad (III.34)$$

Dans les cristaux (cubiques) de blende de zinc, il y a seulement trois constantes indépendantes de rigidité : C_{11} , C_{12} , et C_{44} , d'où le tenseur de rigidité $[C]$ peut s'écrire sous la forme :

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{III.35})$$

III.2.4. Calculs des constantes élastiques :

L'effet de la pression sur les propriétés électroniques nécessite la connaissance des propriétés mécaniques du matériau, et plus particulièrement des constantes élastiques, qui décrivent la réponse à une contrainte macroscopique appliquée. Pour cela, la dépendance des constantes élastiques de la composition d'alliage x prend une importance particulière [18]

L'emploi de méthode pseudopotentiel pour la détermination des propriétés élastique nécessite l'ajustement des facteurs de formes par les relations de Baranowski [19]

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(5 + \lambda)(1 - \alpha_p^2) - 0.6075] \quad (\text{III.36})$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (1 - \alpha_p^2)^{\frac{1}{2}} [4.37(3 - \lambda)(1 - \alpha_p^2) + 0.6075] \quad (\text{III.37})$$

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{4d^5m} (\alpha + \beta) - 0.136SC_0 - C\xi^2 \quad (\text{III.38})$$

Où :

d est la distance entre les plus proches voisins (a la constante du réseau) et λ est une quantité sans dimension de valeur 0.738 [20].

α et β : sont le paramètre de constante de forces d'élongation, et de recourbement respectivement elles sont exprimées par les relations suivantes [21]

$$\alpha = \frac{d}{\sqrt{3}} (C_{11} + 3C_{12}) + \frac{d}{3\sqrt{3}} (1.473SC_0) \quad (\text{III.39})$$

$$\beta = \frac{d}{\sqrt{3}} [(C_{11} - C_{12}) - 0.053SC_0] \quad (\text{III.40})$$

Les quantités C_0 et S sont données par les expressions suivantes :

$$C_0 = \frac{e^2}{d^4} \quad (\text{III.41})$$

$$S = \frac{Z^{*2}}{\varepsilon_0} \quad (\text{III.42})$$

ε_0 est la constante diélectrique statique et Z^* est la charge effective donnée par [12-22]

$$Z^* = e_T^* - \frac{8}{3} \alpha_p (1 - \alpha_p^2) \quad (\text{III.43})$$

Où e_T^* est la charge effective transversale donnée par la relation [23] :

$$2e_T^* = -\Delta Z + \frac{8\alpha_p}{(1 + \alpha_p^2)} \quad (\text{III.44})$$

Le paramètre C cité dans la formule III.38 est déterminé par la relation :

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4d} (\alpha + \beta) - 0.266SC_0 \quad (\text{III.45})$$

ζ : est le paramètre Kleinman (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 fixés par symétrie. Le paramètre de déformation interne ζ est calculé en utilisant la relation suivante :

$$\xi = \frac{2C_{12} - 0.314SC_0}{C_{11} + C_{12} - 0.314SC_0} \quad (\text{III.46})$$

III.2.4.1. Module de compressibilité B et module de cisaillement :

Le module de compressibilité B de semiconducteurs est d'un intérêt physique et aussi une importance pratique dans l'interprétation des données expérimentales à haute pression.

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III.47})$$

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

$$C_s = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (\text{III.48})$$

III.2.4.2. Module de Young et le coefficient de Poisson :

Le module d'Young 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 [24].

$$Y = \frac{9BG}{3B + G} \quad (\text{III.49})$$

Où G est le module de cisaillement (ou de rigidité) défini par la relation suivante [25] :

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (\text{III.50})$$

Avec

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} : \text{est le module de cisaillement de Voigt.}$$

$$\frac{5}{G_R} = \frac{4}{C_{11} - C_{12}} + \frac{3}{C_{44}} : \text{est le module de cisaillement de Reuss.}$$

Le coefficient de Poisson permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué.

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{III.51})$$

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 :

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (\text{III.52})$$

Référence

- [1] E. D. Palik, Handbook of Optical constants of solids, Academic press (1998).
- [2] J. D. Patterson, B. C. Bailey, Solid-State Physics Introduction to the Theory, Springer (2007).
- [3] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors, John Wiley & Sons Ltd (2005).
- [4] P. Y. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties, 4th Ed, Springer (2010).
- [5] HT. Tran and JP. Perdew, *Am J Phys*, **71**, (2003) 1048.
- [6] M. B. Webb and M. G. Lagally, “Elastic Scattering of Low Energy Electrons from Surfaces,” *Solid State Physics, Advances in Research and Applications* **28**, (1973) 301.
- [7] V. P. Gupta, N.M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* **100** (1980) 715.
- [8] P. J. L. Herve, L. K. J. Vandamme. *J Appl Phys*, **77** (1995) 5476.
- [9] N. M. Ravindra, S. Auluck, V. K. Srivastava. *Phys Status Solidi B*, **93** (1979) K 155.
- [10] D. K. Ghosh, L. K Samanta and G. C. Bhar. *Phys Status Solidi B*; **93** (1979) K160.
- [11] G. A. Samara, *Phys. Rev. B* **27** (1983) 3494
- [12] W. A. Harrison, S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **10** (1974) 1516.
- [13] S. Yu. Davydov and S. K. Tikhonov, *Semiconductors*, **32** (1998) 947.
- [14] P. Vogl, Dynamical effective charges in semiconductors: a pseudopotential approach. *J. Phys C*, **11**(1978) 251.
- [15] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th Ed, John Wiley and Sons (2005).
- [16] J. D. Patterson, B. C. Bailey, Solid-State Physics Introduction to the Theory, Springer (2007).
- [17] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, Clarendon, Oxford, (1972).
- [18] N. Bouarissa and M. Boucenna . *Phys. Scr.* **79** (2009) 015701
- [19] J. M. Baranowski, *J. Phys. C* **17** (1984) 6287.
- [20] N. Bourissa, *Mater. Sci. Eng. B* **100** (2003) 280.
- [21] N. Bourissa, R. Bachiri, *Mater. Chem. Phys.* **78** (2002) 271
- [22] W. A. Harrison, Electronic Structure and the properties of Solids, Freeman, San Francisco, CA (1980).
- [23] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* **245** (1998) 285 et les references cité de dans.

- [24] M.W. Barsoum, T. El-Raghi, W.D. Porter, H. Wang, S. Chakraborty, J. Appl. Phys. **88** (2000) 6313.
- [25] Y. O. Ciftci, K. C. Olakoglu, E. Deligoz, H. Ozisik, Mater. Chem. Phys. **108** (2008) 120.

CHAPITRE IV

DYNAMIQUE DU RÉSEAU

Dynamique du réseau

IV.1. Introduction :

Dans le cristal les atomes oscillent autour de leur site cristallins, mais en réalité ils subissent des fluctuations continues dans le voisinage de leurs positions régulières dans le réseau. Ces vibrations, incohérentes, ont une grande importance pour l'étude des propriétés électriques des solides car elles modifient le potentiel cristallin dans lequel évoluent les électrons, ce qui perturbe leur mouvement. Chaque type de réseau possède ses propres modes caractéristiques ou des fréquences de vibration appelée modes normaux [1].

Des recherches sur la dynamique de réseau cristallin parfait ont suscité un intérêt considérable dans le composé ayant une structure de blende. Cette évolution est le résultat de nombreux travaux expérimentaux, en particulier les données neutrons diffusion inélastique pour les courbes de dispersion des phonons. Borchers et al [2] fait la mesure de diffusion thermique de neutrons sur InP. L'application d'un modèle de force de bande a été utilisée pour décrire correctement ce résultat expérimental [3,4]

IV.2. Interaction des atomes dans les cristaux (origine et formalisme) :

Nous supposons que les forces attractives et répulsives toujours annulées et que les masses étaient infinies. La courbe de potentiel $U(R)$ résultant de l'atome en fonction de sa distance R à partir d'un atome voisin est représentée dans la Figure IV.1. Cette figure montre un minimum d'énergie pour une séparation atomique spécifique [5,6].

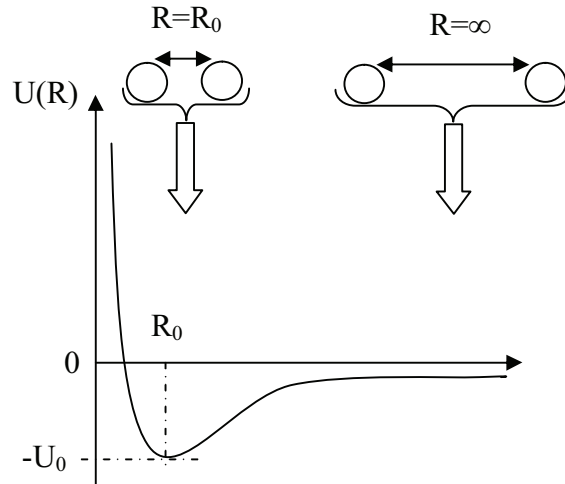


Figure IV.1 : L'énergie potentielle de deux atomes voisins dans un cristal en fonction de la distance interatomique.

L'énergie potentielle $U(R)$ dans la Figure IV.1 du deuxième atome peut être facilement exprimée par rapport aux valeurs d'équilibre R_0 à travers ce qu'on appelle le développement de Taylor

$$U(R) = U(R_0) + \left(\frac{dU}{dR} \right)_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0} (R - R_0)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{d^3U}{dR^3} \right)_{R_0} (R - R_0)^3 + \dots \quad (\text{IV.1})$$

Où $\left(\frac{dU}{dR} \right)_{R_0}$, $\left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0}$ et $\left(\frac{d^3U}{dR^3} \right)_{R_0}$ sont la première, la seconde et la troisième dérivée de $U(r)$ respectivement évalué à $r=R_0$ et le terme $(R-R_0)$ est le déplacement.

En notant $U_0 = U(R_0)$ et $x = R - R_0$ et $\left(\frac{dU}{dR} \right)_{R_0} = 0$, l'équation (IV.1) peut être réécrite:

$$U(x) + U_0 = \frac{1}{2} C_1 x^2 + C_2 x^3 + \dots \quad (\text{IV.2})$$

Où $C_1 = \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0}$ et $C_2 = \frac{1}{6} \left(\frac{d^3U}{dR^3} \right)_{R_0}$ sont les constantes du modèle déterminé par la nature de l'atome considéré, et le terme $\frac{1}{2} C_1 x^2$ est en effet le potentielle d'énergie associée à une force élastique $F = -C_1 x$.

On limite l'analyse au premier terme de l'expansion dans l'équation (IV.2) et notons $C = C_1$:

$$U(x) + U_0 \approx \frac{1}{2} C x^2 \quad (\text{IV.3})$$

Puisque les vibrations atomiques décrites par ce potentiel n'impliquent qu'un déplacement de second ordre, un tel solide est généralement désigné comme un cristal harmonique dans lequel les interactions entre les atomes peuvent être modélisées par un ressort.

IV.3. La chaîne linéaire unidimensionnelle :

VI.3.1. La chaîne linéaire monoatomique :

On considère un cristal à une dimension géométrique et ayant 2 atomes par maille élémentaire, tel que décrit sur la Figure (IV-2), les atomes dans un cristal unidimensionnel monoatomique où tous les atomes sont identiques, avec une masse M , et leurs positions d'équilibre sont également espacés (espacement a).

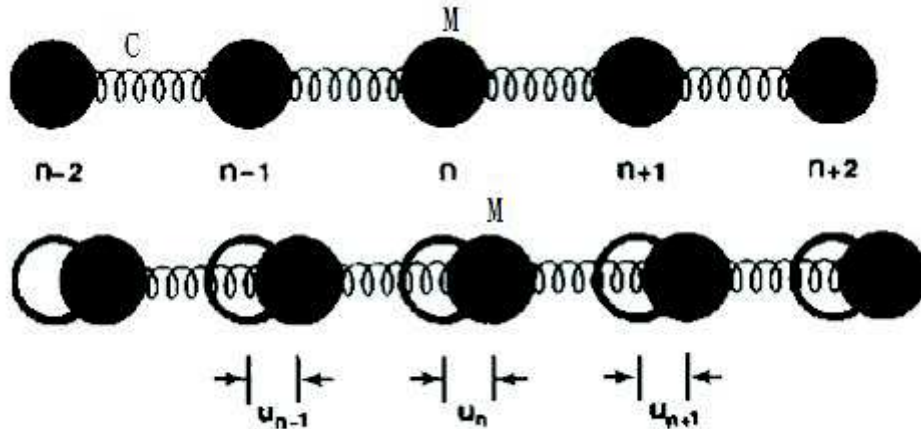


Figure IV-2 : *Vibration d'une chaîne linéaire monoatomique.*

Supposons que la réponse élastique du cristal est une fonction linéaire de force et que la force dans un plan n supposé causé par un déplacement $n+p$ du plan est proportionnel à la différence $u_{n+p} - u_n$ de leur déplacement. On prend en considération que les interactions des atomes voisins, la force totale dans le plan n est [7] :

$$F_n = C(u_{n-1} - u_n) + C(u_{n+1} - u_n) \quad (\text{IV.4})$$

L'expression de déplacement est linéaire et sous la forme de la loi de Hooke, avec C est la constante de force entre plans plus proches voisins. L'équation de mouvement d'un atome est donnée par

$$M\ddot{u}_n = C(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) \quad (\text{IV.5})$$

La solution de l'équation de mouvement est de la forme :

$$u_n = u \exp[i(kx_n - \omega t)] = u \exp[i(kna - \omega t)] \quad (\text{IV.6})$$

Où

$k = 2\pi/\lambda$: est le vecteur d'onde.

$\omega = 2\pi\nu$: est la pulsation.

Nous pouvons résoudre l'équation du mouvement en remplaçant l'équation. (IV.6) dans l'équation. (IV.5) :

$$-M\omega^2 A \exp[i(kan - \omega t)] = -C(2 - e^{-ika} - e^{ika}) A \exp[i(kan - \omega t)] \quad (\text{IV.7})$$

Après simplification l'équation IV.7 devient :

$$-M\omega^2 = -C(2 - e^{-ika} - e^{ika}) \quad (\text{IV.8})$$

D'où :

$$\omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos ka) = \frac{4C}{M} \sin^2 \frac{ka}{2} \quad (\text{IV.9})$$

Cette dernière expression peut également être réécrite comme suit :

$$\omega = \omega_{\max} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (\text{IV.10})$$

Où $\omega_{\max} = \sqrt{\frac{4C}{M}}$ cette expression est nommée la relation de dispersion de phonon, est représentée graphiquement sur la Figure IV.3

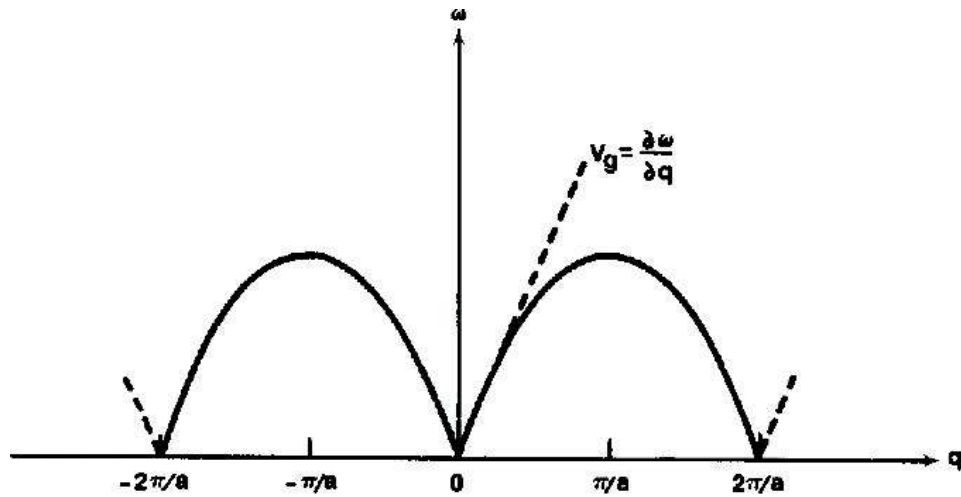


Figure IV.3 : Courbe de dispersion d'une chaîne linéaire monoatomique unidimensionnelle.

VI.3.2. La chaîne linéaire diatomique :

Dans cette partie on suppose un cristal harmonique diatomique unidimensionnel, ayant deux différents atomes par maille élémentaire. Les masses des deux atomes (marquées 1 et 2) dans une cellule unitaire sera noté M_1 et M_2 , respectivement, avec $M_1 > M_2$. La distance d'équilibre entre les deux atomes dans une cellule de l'unité est généralement arbitraire, mais pour simplifier nous allons la choisir pour qu'elle soit moitié de la longueur de la cellule primitive unitaire ($a/2$).

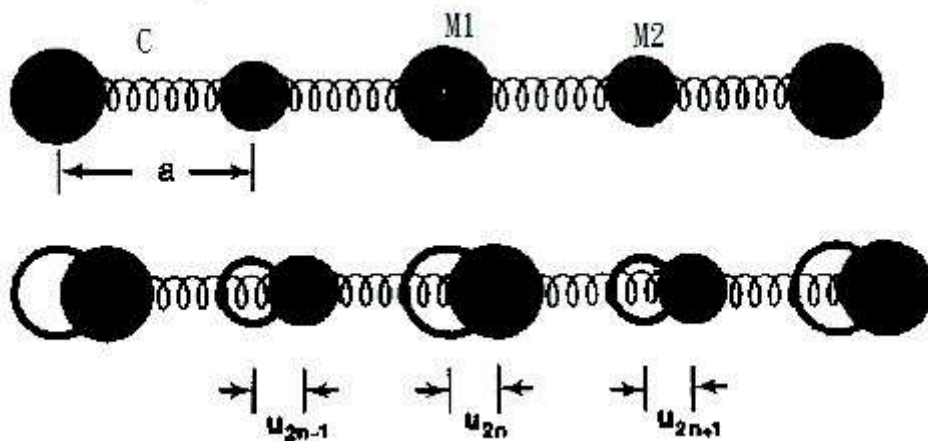


Figure IV.4 : Vibration de chaîne diatomique unidimensionnelle.

En utilisant la loi de Hooke, les équations du mouvement pour la $2n^{\text{ième}}$ et $(2n + 1)^{\text{ième}}$ atomes de la chaîne linéaire diatomique 1-D peuvent être écrites comme

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_{2n} &= C(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}) \\ M_1 \ddot{u}_{2n+1} &= C(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}) \end{aligned} \quad (\text{IV.11})$$

La solution de les équations IV.11 peuvent être exprimé, comme

$$\begin{aligned} u_{2n} &= u \exp i[(2kna - \omega t)] \\ u_{2n+1} &= u \exp i[(2n+1)ka - \omega t] \end{aligned} \quad (\text{IV.12})$$

Où u_{2n} et u_{2n+1} sont les déplacements pour le $2n^{\text{ième}}$ et $(2n+1)^{\text{ième}}$ atomes, respectivement.

Maintenant, en remplaçant (IV.11) dans (IV.12), on obtient

$$\begin{aligned} -M_1 \omega^2 u_a &= Cu_0(1 + e^{-ika}) - 2Cu_a \\ -M_2 \omega^2 u_0 &= Cu_a(1 + e^{ika}) - 2Cu_0 \end{aligned} \quad (\text{IV.13})$$

Les équations (IV.13) auront une solution non triviale si et seulement si le déterminant des coefficients de u_a et u_0 dans les deux équations est égal à zéro. Ainsi que, la fréquence ω doit satisfaire à l'équation séculaire donnée par

$$\begin{vmatrix} (2C - M_1 \omega^2) & -2C \cos(ka) \\ -2C \cos(ka) & (2C - M_2 \omega^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{IV.14})$$

La résolution de (IV.14) pour ω donne :

$$\omega_{\pm}^2 = C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm C \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ak)}{M_1 M_2}} \quad (\text{IV.15})$$

En utilisant le même argument que dans le cas d'une chaîne linéaire monoatomique, on constate que les valeurs permises de $|k|$ pour la chaîne linéaire diatomique sont donnés par

$$|k| = \frac{n\pi}{Na} \quad (\text{IV.16})$$

Où N est le nombre total de cellules unitaires dans la chaîne linéaire, et n est un nombre entier. Etant donné que la période d'une chaîne linéaire diatomique est égal à $2a$, la première zone de Brillouin est défini par $-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$.

Il ya donc deux relations de dispersion possibles, noté $\omega_+(k)$ et $\omega_-(k)$, concernant la fréquence angulaire de nombre d'onde. Les deux relations sont tracées dans la première zone

de Brillouin dans la Figure IV.5. Ces courbes représentent le spectre d'un cristal harmonique diatomique unidimensionnel phonon [8].

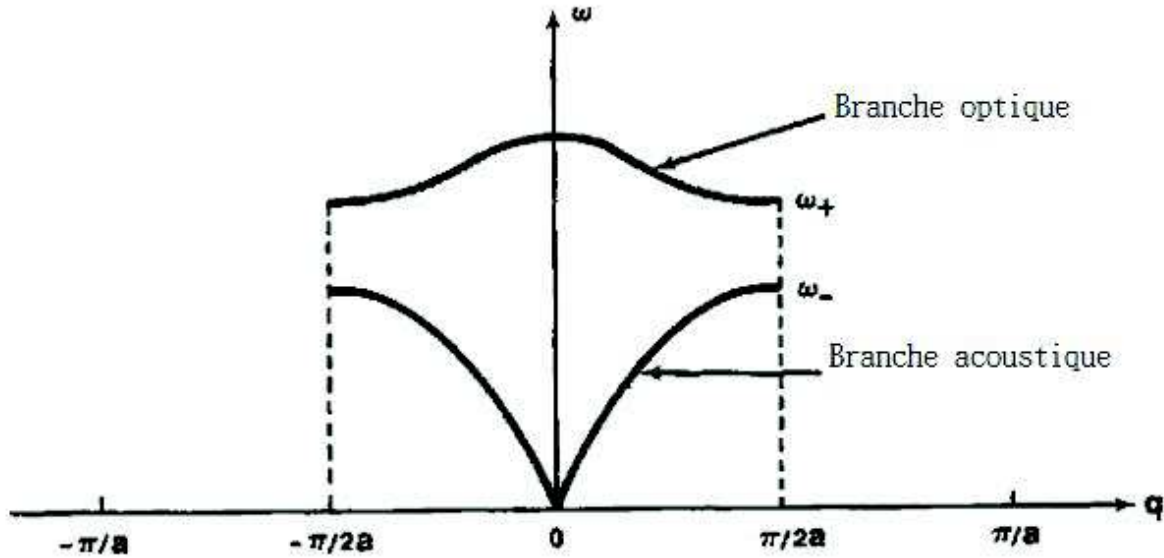


Figure IV.5 : Courbes de dispersion d'une chaîne linéaire diatomique unidimensionnelle, en supposant $M_1 > M_2$.

IV.3.3. Branches optique et acoustique :

Dans le réseau linéaire diatomique contenant deux atomes de masse différente. Il est caractéristique des cristaux avec deux atomes par cellule unitaire que deux types de mode se produisent. L'un de ces modes est appelé le mode acoustique. Dans un mode acoustique, l'atome adjacent vibrant presque en phase. L'autre mode est appelé mode optique. Dans un mode optique, l'atome adjacent vibre en opposition de phase (figure. IV.6).

a- Branche acoustique : Pour $ka \rightarrow 0$, en utilisant ω_- (IV.15) pour la branche acoustique, on obtient

$$\omega_-^2 \cong 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{IV.17})$$

L'équation (IV.17) montre que, dans la limite des grandes longueurs d'onde, ω est directement proportionnelle au vecteur d'onde k . Ce résultat est identique à la chaîne linéaire monoatomique. En outre, à partir de (IV.13) pour M_1 , et pour $q \rightarrow 0$, le rapport de l'amplitude de deux atomes différents de masse est donné par [7]

$$\frac{u_a}{u_0} = 1 \quad (\text{IV.18})$$

b- Branche optique : La branche optique pour la chaîne linéaire diatomique 1-D est représentée par la courbe supérieure de la figure IV.5. Dans la limite de longue longueur d'onde, quand ka se rapproche de zéro, on obtient

$$\omega_+^2 \cong \left(\frac{2C(M_1 + M_2)}{M_1 M_2} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.19})$$

La résolution de (IV.11) pour $qa \rightarrow 0$, le rapport de l'amplitude de deux atomes différents de masse est donnée par

$$\frac{u_a}{u_0} = -\frac{M_2}{M_1} \quad (\text{IV.20})$$

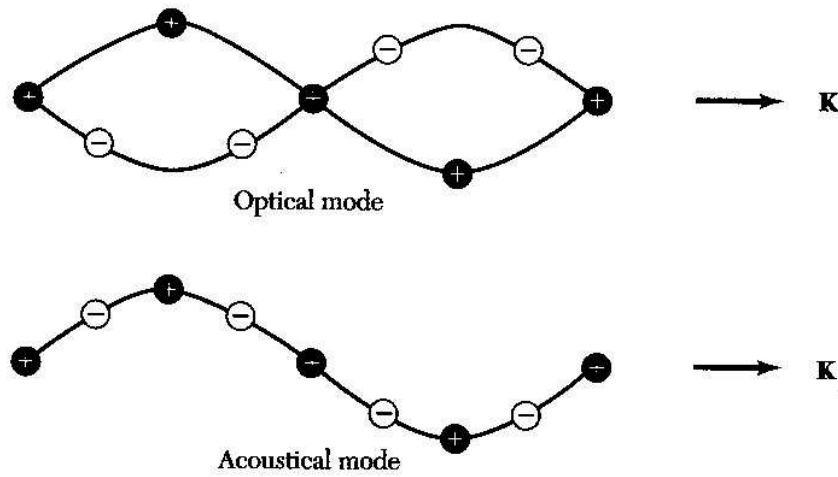


Figure IV.6 : Ondes optique et acoustique transversale dans une chaîne linéaire diatomique [8].

Références

- [1] J. D. Patterson, B. C. Bailey, Solid-State Physics Introduction to the Theory, Springer (2007).
- [2] P. H. Brocherds, G. F. Alfrey, D. H. Saunderson, and A. D. B. Woods, J. Phys Phys. C8, (1975) 2022.
- [3] S. Yip and Y. C. Chang, Phys. Rev. B 30 (1984) 7037
- [4] R. K. Ram, S. S. Kushawaha, and A. Shukla, Phys. Status Solidi, **B 154** (1989) 553
- [5] M. Razeghi, fundamentals of solid state engineering, 2nd ed, Springer (2006)
- [6] Sheng S. Li, Semiconductor Physical Electronics, 2nd ed, Springer (2006).
- [7] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th ed, John Wiley and Sons (2005).
- [8] J. Singh, Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures, Cambridge University Press (2003).

CHAPITRE V

RÉSULTATS ET DISCUSSION

Résultats et discussion

V.1. Introduction :

Au cours des dernières années des nombreux travaux expérimentales et théoriques ont été faites pour comprendre les propriétés optiques, électroniques, élastiques et thermiques des composés binaires et ces alliages [1.2].

Dans notre travail on est intéressé par l'étude des propriétés optiques et élastique et à la fréquence de phonon de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différents substrats de composé binaires (InP, GaAs et ZnSe). Dans la littérature il a eu quelque tentatives d'étude des propriétés électronique de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur InP [3,4]. Ces calculs sont réalisés par l'application de la méthode pseudopotentiel empirique couplé avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) en tenant compte du désordre compositionnel qui est introduit comme un potentiel effectif. Le potentiel du cristal est représenté par une superposition linéaire des potentiels atomiques, qui sont modifiés pour obtenir des bons ajustements aux gaps expérimentaux directs et indirects :

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

Où $V_L(r)$ et $V_{NL}(r)$: sont respectivement, la partie local et non local du pseudopotentiel.

Dans nos calculs la partie non locale est omise, l'équation (V.1) s'écrit sous la forme suivante :

$$V_p(r) = V_L(r) = \sum_G V(G) S(G) \exp(iGr) \quad (\text{V.2})$$

Où $V(G)$ et $S(G)$ sont les facteurs de forme et de structure respectivement, et G et le vecteur du réseau réciproque.

Les paramètres du pseudopotentiel sont déterminés à partir de la méthode du moindre carré non linéaire, dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère qui consiste à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie qui est définit par

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

δ : doit être minimal.

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 observées expérimentalement et calculées entre le $i^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde $k = k_i$ et le $j^{\text{ème}}$ état au vecteur d'onde $k = k_j$ dans les m paires choisis (i, j), N étant le nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.

Dans le cas des alliages quaternaires les facteurs de formes symétrique et antisymétrique sont donnés par :

$$V_{VCA}^{S,A}(G) = xyV_{GaAs}^{S,A} + x(1-y)V_{GaP}^{S,A} + y(1-x)V_{InAs}^{S,A} + (1-x)(1-y)V_{InP}^{S,A} \quad (\text{V.5})$$

$$V_{VCAA}^{S,A}(G) = V_{VCA}^{S,A} - x(1-x)[yC_{GaInAs} + (1-y)C_{GaInP}] - y(1-y)[xC_{GaAsP} + (1-x)C_{InAsP}] \quad (\text{V.6})$$

Avec $V_{VCA}^{S,A}$ et $V_{VCAA}^{S,A}$ sont les facteurs de formes symétrique et antisymétrique avec et sans désordre respectivement. Les paramètres $V_{GaAs}^{S,A}$, $V_{GaP}^{S,A}$, $V_{InAs}^{S,A}$ et $V_{InP}^{S,A}$ sont respectivement les facteurs de formes des composés binaires GaAs, GaP, InAs and InP présenté dans le tableau V.1 et le tableau V.2 regroupe les paramètres de courbures (bowings) C_{GaInAs} , C_{GaInP} , C_{GaAsP} et C_{InAsP} des alliages ternaires GaInAs, GaInP, GaAsP et InAsP.

Les relations d'accord de maille entre les compositions x et y dans le cas des alliages quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposés sur les substrats InP, GaAs et ZnSe peuvent être exprimées comme suit :

Pour le cas de substrat InP :

$$x = \frac{0.1896y}{0.4182 - 0.0132y} \quad ; 0 \leq y \leq 1 \quad (\text{V.7})$$

Pour le cas d'un substrat GaAs :

$$x = \frac{0.2154 + 0.1896y}{0.4182 - 0.0132y} \quad ; 0 \leq y \leq 1 \quad (\text{V.8})$$

Pour un substrat ZnSe :

$$x = \frac{0.2007 + 0.1896y}{0.4182 - 0.0132y} \quad ; 0 \leq y \leq 1 \quad (\text{V.9})$$

Le paramètre de réseaux de ZnSe est pris comme 5.6679Å°

Tableau V.1 : les facteurs de formes symétriques (V_s) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des composants binaires et leurs paramètres de réseaux.

composants	Facteur de formes (Ryd)						Paramètres de réseaux ($\text{\AA}$)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
GaAs	- 0.235393	0.0126	0.057018	0.073883	0.05	0.01	5.6533
InAs	- 0.214015	0.00	0.046505	0.045385	0.045	0.01	6.0583
GaP	- 0.225284	0.00	0.109755	0.084005	0.06	0.03	5.4505
InP	- 0.200313	0.00	0.068396	0.106112	0.06	0.03	5.8687

Tableau V. 2. Les paramètres de courbures des alliages ternaires employer pour le calcul des valeurs des facteurs des formes.

Composants ternaires	(Ga, In) As		(Ga, In) P		Ga (As, P)		In (As, P)	
	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp	Cal	Exp
Bowing (eV)	0.55506	0.555 ^a	0.7855	0.786 ^a	0.14581	0.146	0.09105	0.091

^a référence [5]

V.2. Etude des propriétés optiques et diélectriques :

V.2.1. L'indice de réfraction :

Au cours des dernières décennies, un nombre considérable de travaux expérimentaux et théoriques ont été effectuées pour la détermination de l'indice de réfraction des semiconducteurs [6], l'intérêt donné à l'indice de réfraction des matériaux semiconducteurs est due à son importance dans la conception des dispositifs optoélectronique. Le calcul de l'indice de réfraction de l'alliage sous investigation déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe nécessite une bonne connaissance de son gap d'énergie, dans se but on a employé pour les calculs quatre model d'équation : celle de Moss, de Ravendra, Ghosh et finalement celle de Herve Vendamme. Les calculs sont effectués par l'emploi de la méthode pseudopotentiel couplée avec l'approximation du cristal virtuel qui tient compte de l'effet de désordre compositionnel.

Les tableaux (V.3, V.4, V.5) présentes les valeurs calculés de l'indice de réfraction pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement avec quelques

valeurs expérimentales et théoriques pour comparaison. Les valeurs calculés de n représente un accord de l'ordre de :

Pour InP est de (1.10%, 5.94%, 0.28% et -7.36) pour les relations de Ghosh, Moss, Herve et Ravendra respectivement, avec la valeur expérimental de la référence [10].

Pour le GaAs (9.13%, 13.25%, 7.89%, 1.43%) pour les relations de Ghosh, Moss, Herve et Ravendra respectivement, avec la valeur expérimentale de la référence [12].

D'ici on peut conclure que le model de Herve et de Ravendra sont les plus adapté pour le calcul de l'indice de réfraction n dans le cas des substrat InP et GaAs.

Tableau V.3 : l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ / InP calculé par différentes relations.

composants	E_g		Indice de réfraction n				
	cal	Autres	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	1.3399	1.35 ^a	2.9964	2.8498	3.0385	3.2532	3.1 ^e , 3.03 ^f 3.327 ^g
GaAs	1.41998	1.42 ^a	2.9531	2.8193	2.9936	3.2036	3.25 ^h , 3.40 ^g
InAs	0.3499	0.36 ^a	4.1915	3.3328	3.7621	3.8671	3.42 ^h , 4.1 ⁱ
GaP	2.7799	2.74 ^a	2.6292	2.5503	2.6026	2.6828	2.52 ^h , 3.35 ⁱ
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	0.8640 [*] 0.7069 ^{**}	0.74 ^b , 0.721 ^c , 0.75 ^d	3.3437 [*] 3.5157 ^{**}	3.0546 [*] 3.1324 ^{**}	3.3426 [*] 3.4592 ^{**}	3.5483 [*] 3.6458 ^{**}	-
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.7}P_{0.3}$	1.0963 [*] 0.8674 ^{**}	-	3.1504 [*] 3.3404 ^{**}	2.9493 [*] 3.053 ^{**}	3.1857 [*] 3.3402 ^{**}	3.4043 [*] 3.5462 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	0.9502 [*] 0.7562 ^{**}	-	3.2651 [*] 3.4570 ^{**}	3.0142 [*] 3.1074 ^{**}	3.2823 [*] 3.4216 ^{**}	3.4949 [*] 3.6152 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a référence [5], ^b Référence [7], ^c Référence [8], ^d Référence [9], ^e Référence [10], ^f Référence [10], ^g Référence [12],

^h Référence [13], ⁱ Référence [14]

Tableau V. 4 : l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ par différentes relations.

composants	E _g (Ev)		Indice de réfraction n				
	cal	Autres	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	1.3399	1.35 ^a	2.9963	2.8498	3.0385	3.2532	3.1 ^b , 3.03 ^c 3.327 ^d
GaAs	1.41998	1.42 ^a	2.9531	2.8193	2.9936	3.2036	3.25 ^e , 3.40 ^f
InAs	0.3499	0.36 ^a	4.1915	3.3328	3.7621	3.8671	3.42 ^e , 3.52 ^f
GaP	2.7799	2.74 ^a	2.6292	2.5503	3.7621	2.6828	2.52 ^e , 2.90 ^f
Ga _{0.52} In _{0.48} P	2.0563 [*] 1.8828 ^{**}	-	2.6920 [*] 2.7520 ^{**}	2.608 [*] 2.6606 ^{**}	2.6856 [*] 2.7618 ^{**}	2.8091 [*] 2.9167 ^{**}	-
Ga _{0.75} In _{0.25} As _{0.5} P _{0.5}	1.8482 [*] 1.6383 ^{**}	-	2.8075 [*] 2.8494 ^{**}	2.6715 [*] 2.7409 ^{**}	2.7776 ^{**} 2.8786 ^{**}	2.9381 [*] 3.0683 ^{**}	-
Ga _{0.95} In _{0.05} As _{0.9} P _{0.1}	1.5209 [*] 1.4569 ^{**}	-	2.9029 [*] 2.9342 ^{**}	2.7822 [*] 2.8055 ^{**}	2.9391 [*] 2.9733 ^{**}	3.1410 [*] 3.1807 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a référence [5], ^b Référence [10], ^c Référence [11], ^d Référence [12], ^e Référence [13], ^f Référence [14]

Tableau V.5 : l'indice de réfraction de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$ par différentes relations.

composant	E _g		Indice de réfraction n				
	cal	Autres	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	1.3399	1.35 ^a	2.9963	2.8498	3.0385	3.2532	3.1 ^b , 3.03 ^c 3.327 ^d
GaAs	1.4199	1.42 ^a	2.9531	2.8193	2.9936	3.2036	3.25 ^e , 3.40 ^d
InAs	0.3499	0.36 ^a	4.1915	3.3328	3.7621	3.8671	3.42 ^e , 3.52 ^f
GaP	2.7799	2.74 ^a	2.6292	2.5503	3.7621	2.6828	2.52 ^e , 2.90 ^f
Ga _{0.48} In _{0.52} P	2.0040 [*] 1.8325 ^{**}		2.7094 [*] 2.7707 ^{**}	2.6235 [*] 2.6765 ^{**}	3.0385 [*] 2.7848 ^{**}	2.8415 [*] 2.9478 ^{**}	-
Ga _{0.96} In _{0.04} As	1.3830 [*] 1.3612 ^{**}		2.9727 [*] 2.9845 ^{**}	2.8333 [*] 2.8416 ^{**}	3.3426 [*] 3.0263 ^{**}	3.2265 [*] 3.2400 ^{**}	-
Ga _{0.23} In _{0.77} As _{0.5} P _{0.5}	1.8044 [*] 1.5832 ^{**}		2.7814 [*] 2.8738 ^{**}	2.6855 [*] 2.7600 ^{**}	3.1165 [*] 2.9065 ^{**}	2.9652 [*] 3.1023 ^{**}	-
Ga _{0.91} In _{0.09} As _{0.9} P _{0.1}	1.4828 [*] 1.3990 ^{**}		2.9213 [*] 2.9641 ^{**}	2.7960 [*] 2.8271 ^{**}	3.2823 [*] 3.0051 ^{**}	3.1646 ^{**} 3.2165 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a référence [5], ^b Référence [10], ^c Référence [11], ^d Référence [12], ^e Référence [13], ^f Référence [14]

V.2.1.1. Effet de désordre :

Les figures (V.1, V.2 et V.3) sont les tracés des valeurs de l'indice de réfraction calculé avec les différentes relations en fonction de la concentration y de l'Arsenic avec et sans tenir compte du désordre compositionnel. Ces figures représentent une interpolation quadratique qui sont exprimés par les expressions suivantes pour les :

Substrat InP:

$$n = 2.8514 + 0.0031y + 0.1982y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.7a})$$

$$n = 2.8478 + 0.3013y - 0.01467y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.7b})$$

$$n = 3.0025 - 0.0457y + 0.3785y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.8a})$$

$$n = 2.9941 + 0.4175y + 0.10679y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.8b})$$

$$n = 3.0410 + 0.0026y + 0.296y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.9a})$$

$$n = 3.0354 + 0.4446y - 0.0178y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.9b})$$

$$n = 3.2554 + 0.0325y + 0.2615y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.10a})$$

$$n = 3.2507 + 0.4725y - 0.07534y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.7a})$$

Substrat GaAs :

$$n = 2.6089 + 0.04102y + 0.1685y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.11a})$$

$$n = 2.6590 + 0.1657y - 0.00369y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.11b})$$

$$n = 2.6947 + 0.0242y + 0.2312y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.12a})$$

$$n = 2.7501 + 0.1926y + 0.01262y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.12b})$$

$$n = 2.6872 + 0.0569y + 0.2480y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.13a})$$

$$n = 2.7595 + 0.2404y - 0.0038y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.13b})$$

$$n = 2.8085 + 0.1232y + 0.2731y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.14a})$$

$$n = 2.9138 + 0.3252y - 0.03254y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.14b})$$

Substrat ZnSe :

$$n = 2.6243 + 0.03674y + 0.17133y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.15a})$$

$$n = 2.6749 + 0.1722y - 0.00384y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.15b})$$

$$n = 2.7121 + 0.01899y + 0.019y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.16a})$$

$$n = 2.7688 + 0.20303y + 0.0149y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.16b})$$

$$n = 3.0410 + 0.0026y + 0.296y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.17a})$$

$$n = 2.7825 + 0.2503y - 0.0039y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.17b})$$

$$n = 2.8407 + 0.112y + 0.275y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.18a})$$

$$n = 2.945 + 0.3317y - 0.03391y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.18b})$$

On note que la variation de n en fonction de la fraction molaire de l'Arsenic est identique pour les différentes relations utilisée. La variation de l'indice de réfraction marque une croissance non linéaire en fonction de la concentration y sans et avec la présence de l'effet de désordre ainsi on remarque que les valeurs de n avec désordre sont plus importantes. Ces observations sont confirmés par les valeurs de paramètres de courbures qui présentes des valeurs moins importantes dans le cas où l'effet de désordre compositionnel est pris en considération d'où on peut conclure que l'effet de désordre est important est ne peut être négligé. On peut généraliser sur tous les résultats obtenus pour les trois substrats proposés.

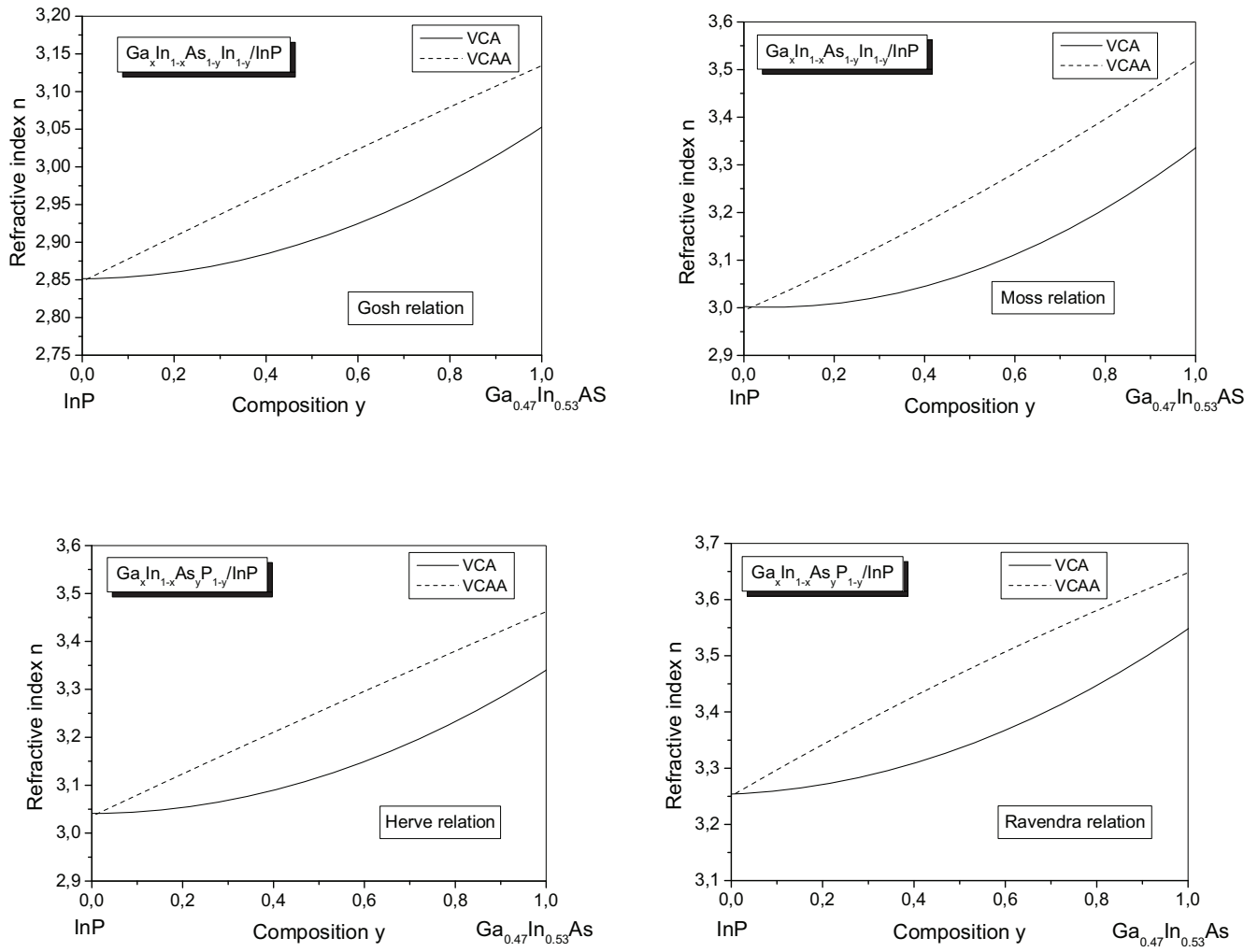


Figure V-1 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

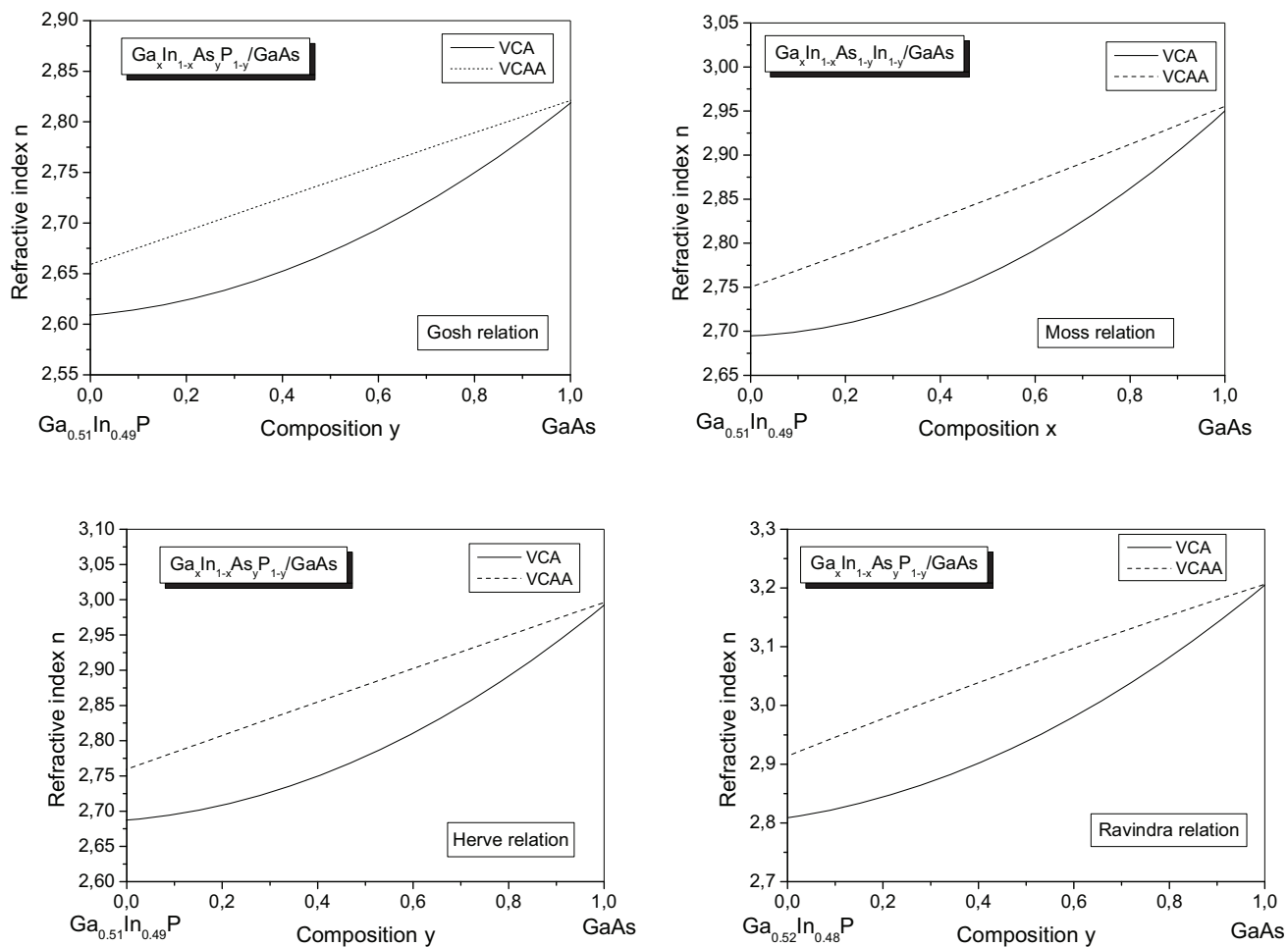


Figure V-2 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

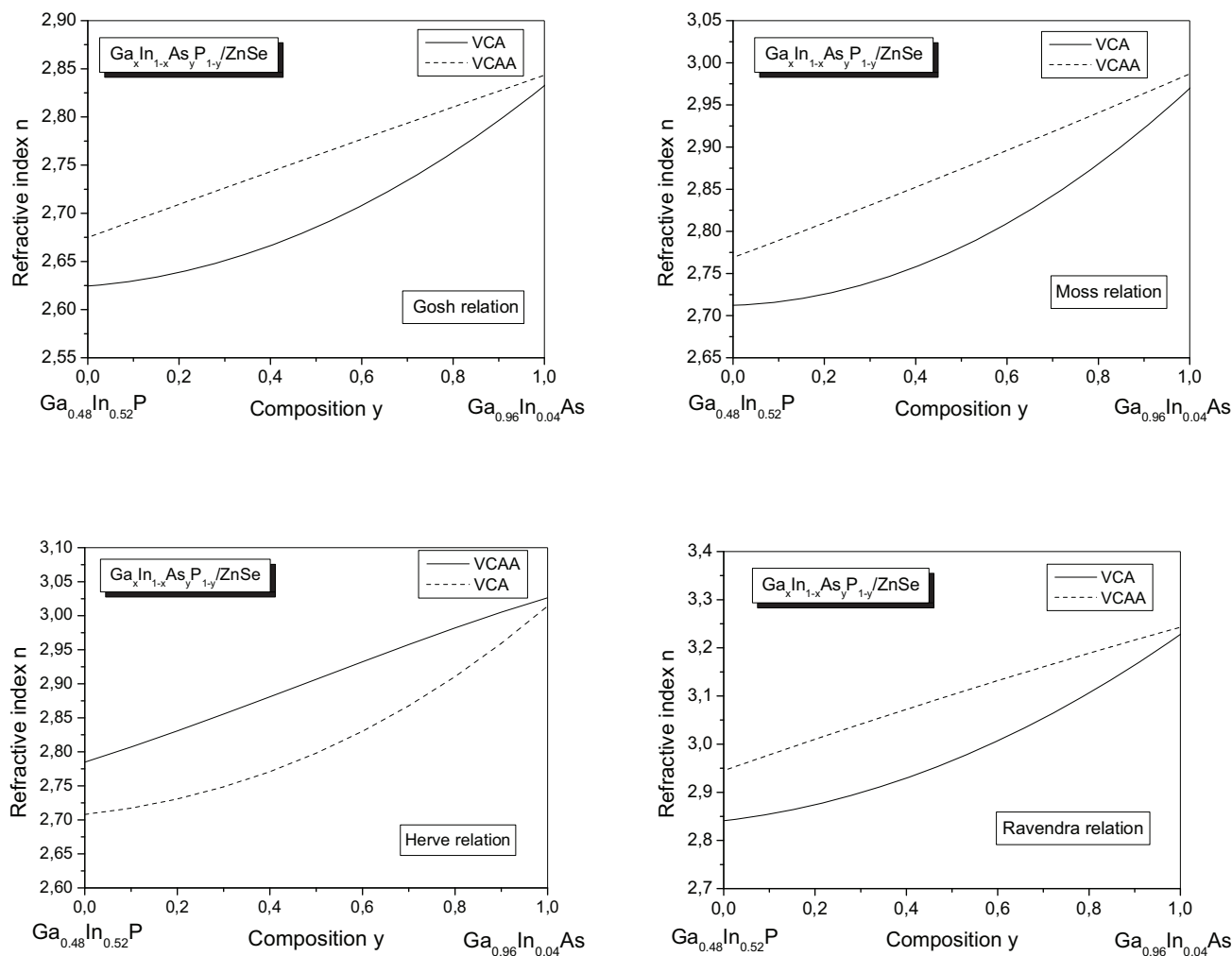


Figure V-3 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

V.2.1.2. Effet de substrat :

La figure (V-4) montre la variation de l'indice de réfraction calculé pour le quaternaire d'intérêt déposé sur différents substrats en fonction de la concentration y de l'Arsenic avec la considération de l'effet de désordre compositionnel. La variation de n en fonction de y est non-linéaire quelque soit le substrat ou la relation utilisé pour le calcule. comme on peut noter que les valeurs de n pour le quaternaire déposé sur le substrat InP sont plus importantes par rapport à celle calculé pour les substrats GaAs et ZnSe qui montre a leur tour des valeurs très rapprocher.

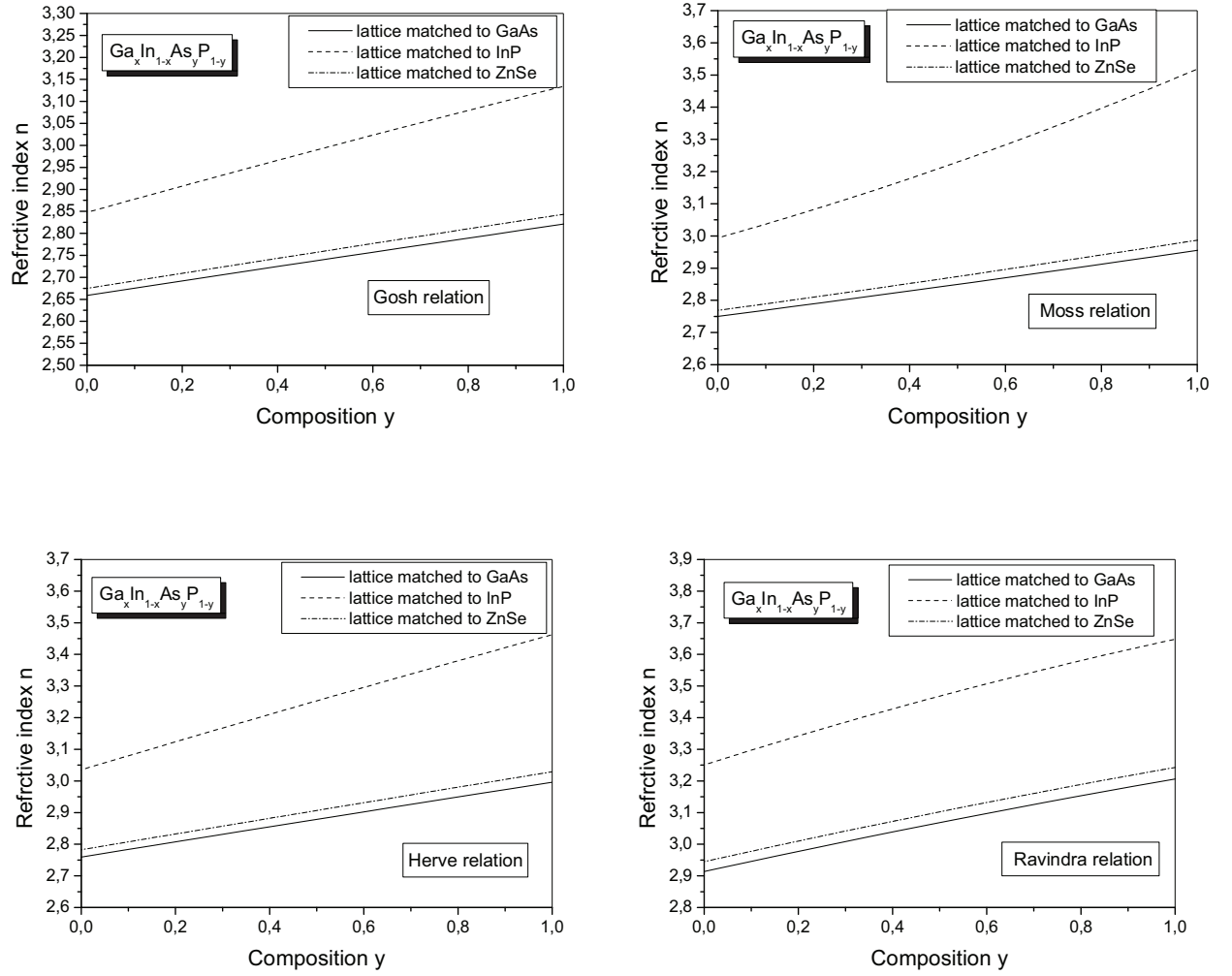


Figure V-4 : La variation de l'indice de réfraction en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur : InP, GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.

V.2.2. Constante diélectrique à haute fréquence :

À partir des valeurs de l'indice de réfraction calculée on peut déterminer la constante diélectrique à haute fréquence par l'usage de la relation (III-16) cité au chapitre III pour les différentes relations (Ghosh, Moss, Herve et Ravendra).

Les tableaux (V-6, V-7 et V-8) présentes les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence ϵ_∞ avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel calculé pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur : InP, GaAs et ZnSe respectivement. Les valeurs de ϵ_∞ représente un décalage de l'accord entre nos résultats et les données connue comme suite : pour InP

l'accord entre nos résultats et les données tirées des références [5], [3] et [15] sont meilleures de [6.48%, 17.63%, 9.31%], [15.4%, 25.49%, 17.96%], [3.82%, 15.29, 6.74%] et [-10.24%, 2.9%, -6.9%] en employant les relations de Moss, Ghosh, Herve et Ravindra respectivement. Pour GaAs l'accord entre nos résultats et les données des références [11] et [15] sont conformes de [19.69%, 37.25%], [30.95%, 42.81%], [17.48%, 35.52%] et [5.49%, 26.16%] en employant les relations précédentes respectivement. À partir de ces comparaisons on peut dire que l'accord entre nos résultats et les données connues sont meilleurs avec l'emploi des relations de Herve et Ravindra. Tandis que pour le cas des binaire InAs et GaP on peut voir que la différence est plus large. Généralement on peut conclure que le modèle le plus performant pour nos calculs est celui de Ravindra.

Tableau V-6 : La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculée de l'alliage quaternaire

$Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ pour des différentes compositions.

composant	Constante diélectrique à haute fréquence				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	8.9777	8.1215	9.2325	10.5835	9.6 ^f , 10.9 ^{d,e} 9.9 ^g
GaAs	8.7211	7.9485	8.9614	10.2631	10.86 ^g , 13.9 ^e
InAs	17.5687	11.1073	14.1534	14.9542	11.6 ^h , 12.3 ⁱ
GaP	6.9128	6.5038	6.7736	7.1974	9.8 ^h , 8.5 ⁱ
Ga _{0.47} In _{0.53} As	11.1803 [*] 12.3608 ^{**}	9.3304 [*] 9.8118 ^{**}	11.1728 [*] 11.9663 ^{**}	12.5905 [*] 13.2915 ^{**}	11.61 ^f
Ga _{0.33} In _{0.67} As _{0.5} P _{0.5}	9.4575 [*] 10.4286 ^{**}	8.4255 [*] 8.9686 ^{**}	9.7128 [*] 10.5840 ^{**}	11.1248 [*] 12.0292 ^{**}	-
Ga _{0.42} In _{0.58} As _{0.9} P _{0.1}	10.6611 [*] 11.9510 ^{**}	9.0855 [*] 9.6556 ^{**}	10.7736 [*] 11.7076 ^{**}	12.2141 [*] 13.0695 ^{**}	-

* Nos calculs sans désordre, ** Calculs avec désordre.

^e Référence [6], ^d Référence [7], ^e Référence [11], ^h Référence [12]

^f Référence [3], ^g Référence [15], ⁱ Référence [16],

Tableau V-7 : La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculé de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ GaAs$ pour des différentes compositions.

composant	Constante diélectrique à haute fréquence				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	8.9777	8.1215	9.2325	10.5835	9.6 ^f , 10.9 ^{d,e} 9.9 ^g
GaAs	8.7211	7.9485	8.9614	10.2631	10.86 ^g , 13.9 ^e
InAs	17.5687	11.1073	14.1534	14.9542	11.6 ^h , 12.3 ⁱ
GaP	6.9128	6.5038	6.7736	7.1974	9.8 ^h , 8.5 ⁱ
Ga _{0.52} In _{0.48} P	7.2471 [*] 7.5737 ^{**}	6.8016 [*] 7.0790 ^{**}	7.2126 [*] 7.6275 ^{**}	7.8908 [*] 8.5069 ^{**}	
Ga _{0.75} In _{0.25} As _{0.5} P _{0.5}	7.64429 [*] 8.1193 ^{**}	7.1372 [*] 7.5125 ^{**}	7.7152 [*] 8.2864 ^{**}	8.6325 [*] 9.4143 ^{**}	
Ga _{0.95} In _{0.05} As _{0.9} P _{0.1}	8.4267 [*] 8.6097 ^{**}	7.7406 [*] 7.8710 ^{**}	8.6381 [*] 8.8405 ^{**}	9.8661 [*] 10.1167 ^{**}	

* Nos calcule sans désordre, ** Calcule avec désordre

^c Reference [6] , ^d Reference[7] , ^e Reference[11], ^h Reference [12] , ^f Reference [3] , ^g Reference [15], ⁱ Reference [16].**Tableau V-8 :** La constante diélectrique à haute fréquence ϵ_{∞} calculé de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ ZnSe$ pour des différentes compositions.

composant	Constante diélectrique à haute fréquence				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	8.9777	8.1215	9.2325	10.5835	9.6 ^f , 10.9 ^{d,e} 9.9 ^g
GaAs	8.7211	7.9485	8.9614	10.2631	10.86 ^g , 13.9 ^e
InAs	17.5687	11.1073	14.1534	14.9542	11.6 ^h , 12.3 ⁱ
GaP	6.9128	6.5038	6.7736	7.1974	9.8 ^h , 8.5 ⁱ
Ga _{0.48} In _{0.52} P	7.3409 [*] 7.6768 ^{**}	6.8826 [*] 7.1637 ^{**}	9.2324 [*] 7.7553 ^{**}	8.0739 [*] 8.6895 ^{**}	
Ga _{0.96} In _{0.04} As	8.8368 [*] 8.9073 ^{**}	8.0275 [*] 8.0748 ^{**}	11.1728 [*] 9.15901 ^{**}	10.4105 [*] 10.4978 ^{**}	
Ga _{0.23} In _{0.77} As _{0.5} P _{0.5}	7.7365 [*] 8.2592 ^{**}	7.2122 [*] 7.6177 ^{**}	9.7128 [*] 8.4482 ^{**}	8.7928 [*] 9.6248 ^{**}	
Ga _{0.91} In _{0.09} As _{0.9} P _{0.1}	8.5343 [*] 8.7861 ^{**}	7.8177 [*] 7.9931 ^{**}	10.7736 [*] 9.0309 ^{**}	10.0149 [*] 10.3464 ^{**}	

* Nos calcule sans désordre, ** Calcule avec désordre.

^c Référence [6], ^d Référence [7], ^e Référence [13], ^h Référence [14]^f Référence [3], ^g Référence [15], ⁱ Référence [16].

I.2.2.1. Effet de désordre :

Les résultats de ε_∞ obtenues pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe sont respectivement schématisées sur les figures (V-5, V-6 et V-7) qui montrent une interpolation quadratiques correspond à nos résultats donnant les expressions suivantes pour les :

Substrat InP :

$$\varepsilon_\infty = 8.1335 - 0.01949y + 1.20202y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.19a})$$

$$\varepsilon_\infty = 8.10902 + 1.72295y - 0.00797y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.19b})$$

$$\varepsilon_\infty = 9.024 - 0.3922y + 2.4842y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.20a})$$

$$\varepsilon_\infty = 8.9678 + 2.4434y + 0.96255y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.20b})$$

$$\varepsilon_\infty = 9.2538 - 0.06653y + 1.9593y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.21a})$$

$$\varepsilon_\infty = 9.2122 + 2.7129y + 0.0613y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.21b})$$

$$\varepsilon_\infty = 10.5922 + 0.1402y + 1.8489y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.22a})$$

$$\varepsilon_\infty = 10.56406 + 3.1132y - 0.36702y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.22b})$$

Substrat GaAs :

$$\varepsilon_\infty = 6.80899 + 0.18008y + 0.9520y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.23a})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.07025 + 0.8828y + 0.00494y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.23b})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.2656 + 0.07357y + 1.3596y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.24a})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.5632 + 1.05782y + 0.11242y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.24b})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.2261 + 0.2331y + 1.4886y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.25a})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.61415 + 1.3299y + 0.03199y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.25b})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.8949 + 0.5881y + 1.7790y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.26a})$$

$$\varepsilon_\infty = 8.48897 + 1.90957y - 0.11706y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.26b})$$

Substrat ZnSe :

$$\varepsilon_\infty = 6.8896 + 0.15871y + 0.9716y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.27a})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.15495 - 0.92328y + 0.00605y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.27b})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.3596 - 0.04415y + 1.40967y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.28a})$$

$$\varepsilon_\infty = 7.66614 + 1.1224y + 0.13132y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.28b})$$

$$\varepsilon_\infty = 9.2538 - 0.06653y + 1.9593y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.29a})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 7.7418 + 1.39633y + 0.03566y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.29b})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 8.0766 + 0.5349y + 1.79794y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.30a})$$

$$\varepsilon_{\infty} = 0.67177 + 1.9688y - 0.1247y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.30b})$$

Comme il est clair dans les figures (V.5, V.6, V.7) la variation de ε_{∞} en fonction de la concentration y croît non linéairement ces observations sont confirmées par les valeurs de bowing des équations citées ci-dessus. On note que la tendance est qualitativement semblable à celle de l'indice de réfraction avec la concentration y , ce n'est pas surprenant puisque ε_{∞} est une valeur quadratique de n , et il est à noter que l'effet de désordre est important et doit être pris en considération dans les calculs du ε_{∞} de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe.

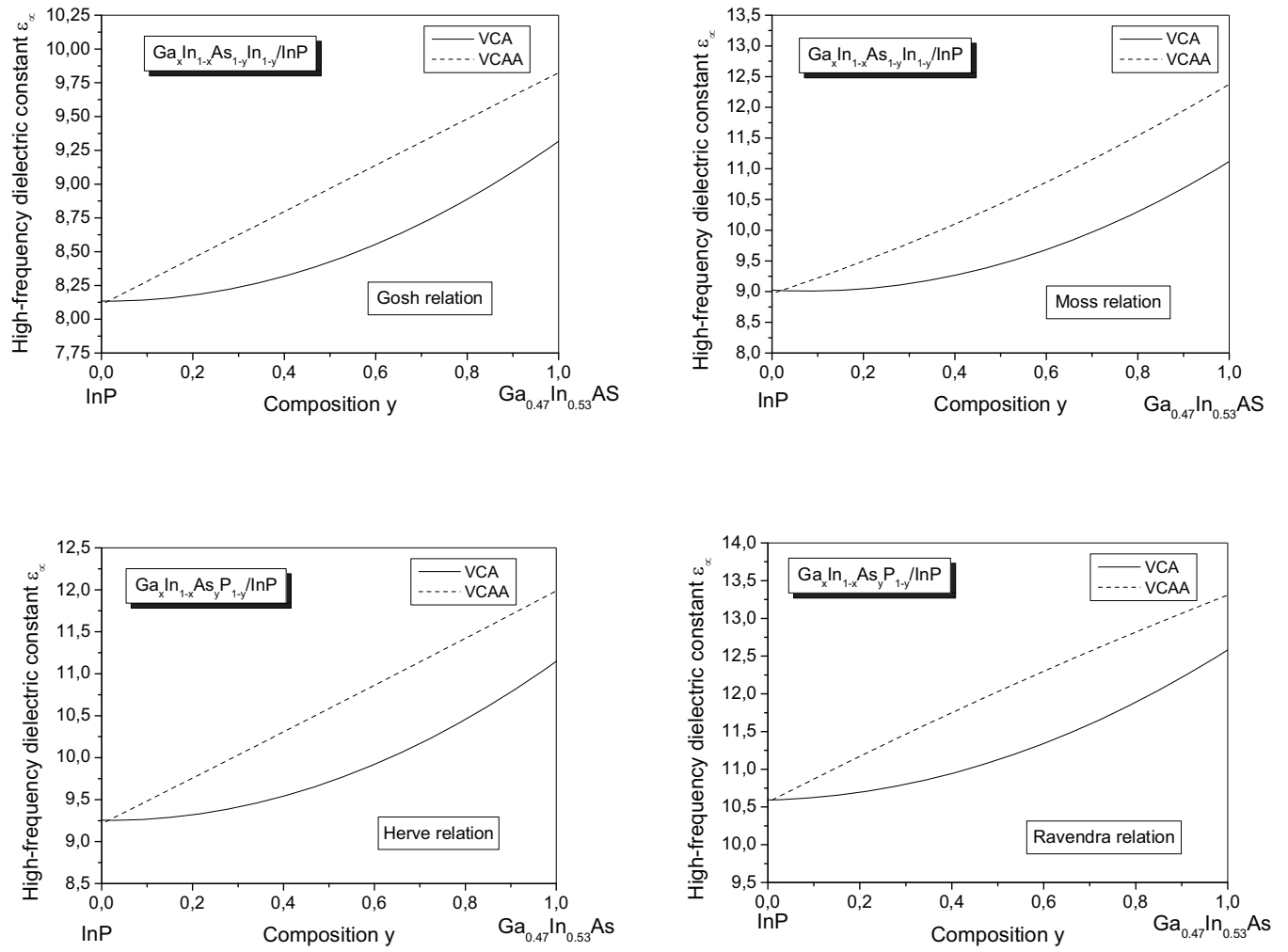


Figure V-5 : La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

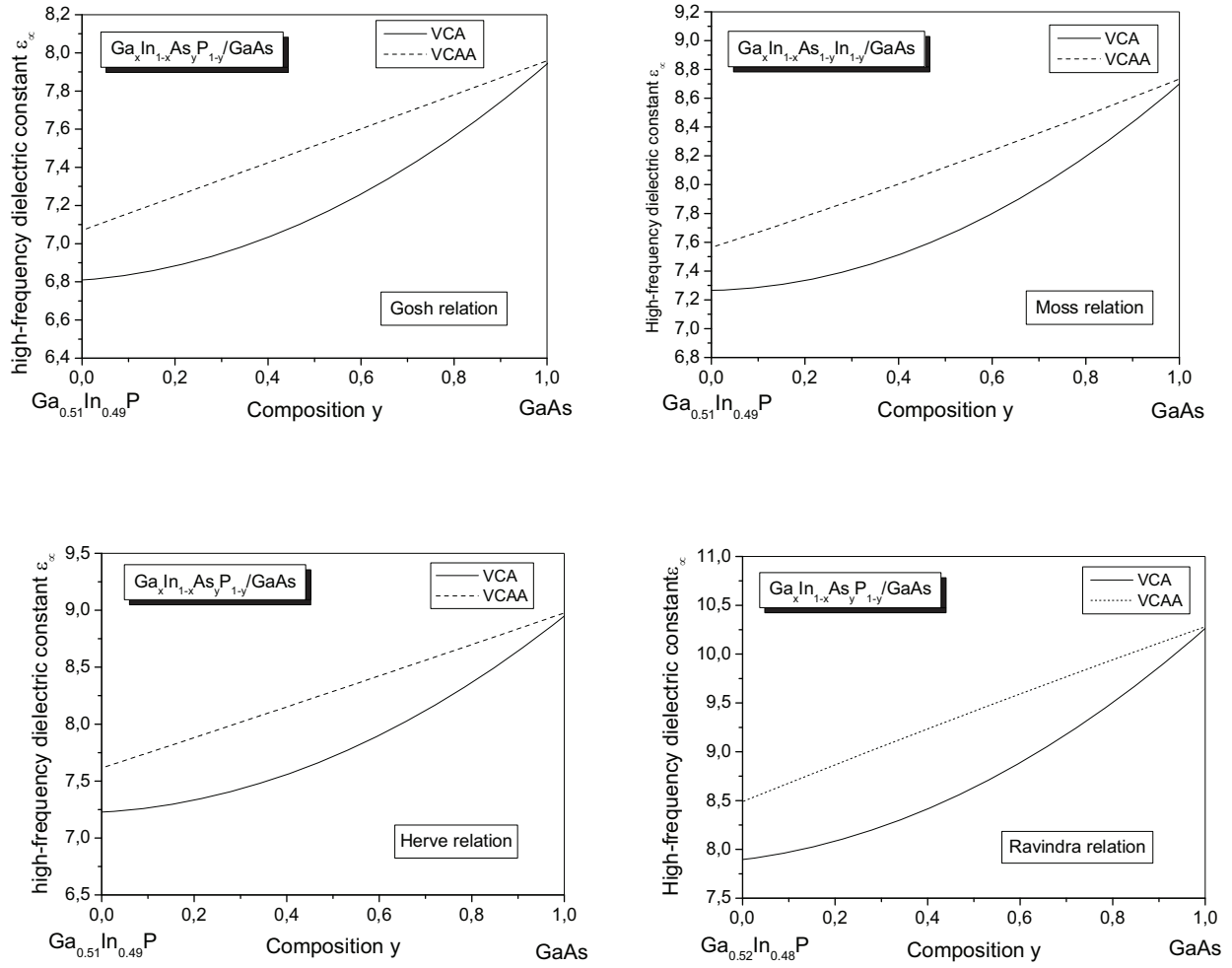


Figure V-6 : La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

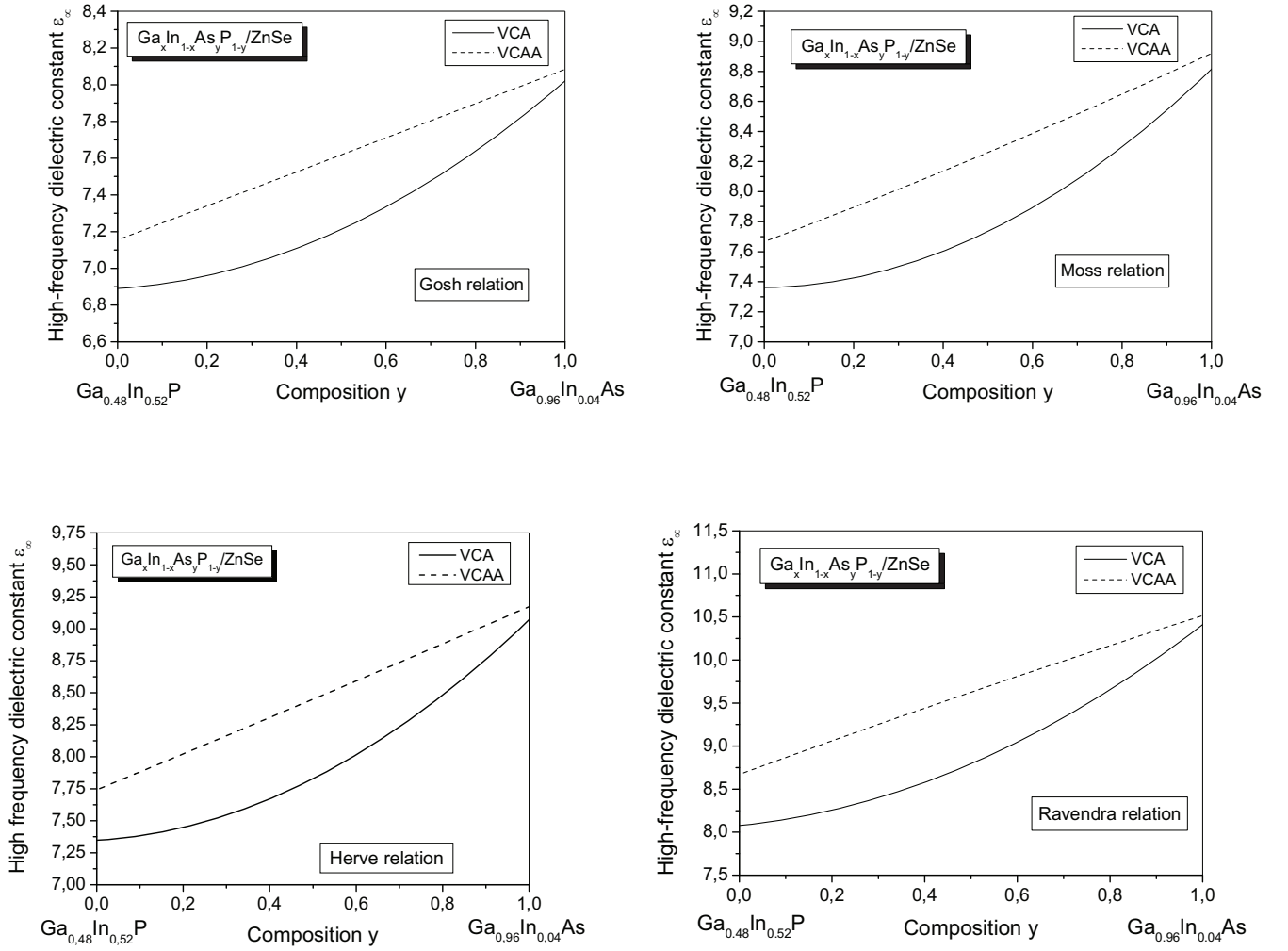


Figure V-7 : La variation de la constante diélectrique à haut fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

I.2.2.2. Effet de substrat :

On tenant compte de l'effet du désordre compositionnel, la figure (V-8) représente la variation de ϵ_∞ calculé par les relations précédentes en fonction de la fraction molaire y de l'Arsenic pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur différents substrats. On remarque que la variation de ϵ_∞ est non-linéaire en fonction de y quelque soit le substrat adapté et la relation employée pour les calculs, ainsi que la dépendance de ϵ_∞ en substrat est significative. Les valeurs de la constante diélectrique à haute fréquence calculées pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ sont plus grandes lorsque le système quaternaire d'intérêt est déposé sur InP plutôt que sur GaAs ou ZnSe.

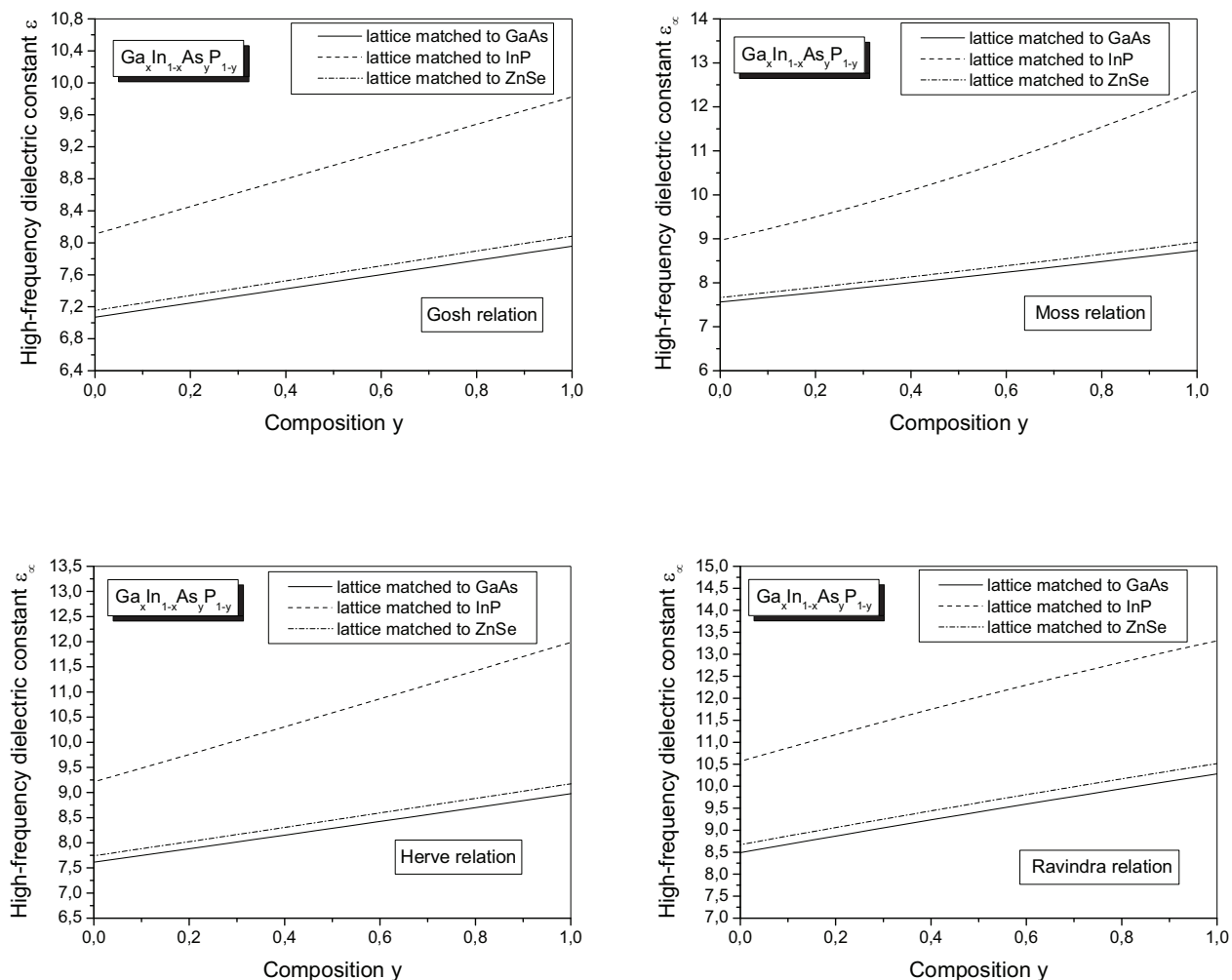


Figure V-8 : La variation de la constante diélectrique à haute fréquence en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur : InP , GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.

V.2.3. Constante diélectrique statique :

Dans ce travail on a aussi calculé la constante diélectrique statique par l'application de la relation de Harisson (équation III-21 cité dans le troisième chapitre), les résultats obtenus pour différentes relations de calculs sont illustrés dans les tableaux (V-9, V-10 et V-11) pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement.

À partir de la comparaison des valeurs de ϵ_0 calculés avec celle connue dans la littérature on peut déduire que généralement les relations utilisées donnent un accord assez raisonnable avec nos

calculs, a ce qui concerne les valeurs de ϵ_0 dans l'intervalle de $0 < x < 1$ peuvent être prise comme référence.

Tableau V-9 : constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

Composants	Constante diélectrique statique				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	14.2525	12.8302	12.6977	14.6174	12.56 ^{a,b} , 12.90 ^c 12.5 ^f
GaAs	10.0328	9.1289	10.3139	11.6319	12.80 ^c , 11.7 ^b
InAs	18.7539	11.8324	15.0971	15.9553	15.15 ^c , 14.55 ^e
GaP	8.4223	7.9088	8.2475	8.7795	11.11 ^d , 10.7 ^e
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	12.3348 [*] 13.1381 ^{**}	10.2752 [*] 10.2752 ^{**}	12.2214 [*] 12.6737 ^{**}	13.7853 [*] 14.0844	13.94 ^f
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	11.9428 [*] 11.8202 ^{**}	10.1653 [*] 10.1447 ^{**}	11.4059 [*] 11.8356 ^{**}	13.0922 [*] 13.4695 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	11.8928 [*] 12.7641 ^{**}	10.1165 [*] 10.2983 ^{**}	11.8937 [*] 12.4536 ^{**}	13.4992 [*] 13.9104 ^{**}	-

* Nos calcul sans désordre, ** Calcul avec désordre.

^a Référence [18], ^b Référence [12], ^c Référence [11], ^d Référence [19], ^e Référence [13], ^f Référence [3].

Tableau V-10 : constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.

Composants	Constante diélectrique statique				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	14.2525	12.8302	12.6977	14.6174	12.56 ^{a,b} , 12.90 ^c 12.5 ^f
GaAs	10.0328	9.1289	10.3139	11.6319	12.80 ^c , 11.7 ^b
InAs	18.7539	11.8324	15.0971	15.9553	15.15 ^c , 14.55 ^e
GaP	8.4223	7.9088	8.2475	8.7795	11.11 ^d , 10.7 ^e
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	9.7416 [*] 9.0420 ^{**}	9.1182 [*] 8.4367 ^{**}	9.6934 [*] 9.1078 ^{**}	9.9317 [*] 9.9085 ^{**}	-
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	9.0800 [*] 9.0671 ^{**}	8.4633 [*] 8.3795 ^{**}	9.1662 [*] 9.2564 ^{**}	10.0185 [*] 10.4167 ^{**}	-
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	9.7083 [*] 9.7714 ^{**}	8.9038 [*] 8.9200 ^{**}	9.9562 [*] 10.0375 ^{**}	11.1941 [*] 11.3434 ^{**}	-

* Nos calcule sans désordre, **Nos calcule avec désordre.

^a Référence [18], ^b Référence [12], ^c Référence [11], ^d Référence [19], ^e Référence [13], ^f Référence [3].

Tableau V.11 : constante diélectrique statique de l'alliage semiconducteur $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

Composants	Constante diélectrique statique				
	Moss	Ghosh	Herve	Ravindra	Autres
InP	14.2525	12.8302	12.6977	14.6174	12.56 ^{a,b} , 12.90 ^e 12.5 ^f
GaAs	10.0328	9.1289	10.3139	11.6319	12.80 ^c , 11.7 ^b
InAs	18.7539	11.8324	15.0971	15.9553	15.15 ^c , 14.55 ^e
GaP	8.4223	7.9088	8.2475	8.7795	11.11 ^d , 10.7 ^e
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	9.9582 [*] 9.2177 ^{**}	9.3108 [*] 8.5862 ^{**}	12.6977 [*] 9.3144 ^{**}	10.2213 [*] 10.1650 ^{**}	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	10.1358 [*] 10.1428 ^{**}	9.1922 [*] 9.1802 ^{**}	12.2215 [*] 10.4339 ^{**}	11.7714 [*] 11.8022 ^{**}	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	9.1999 [*] 9.1968 ^{**}	8.5617 [*] 8.4725 ^{**}	11.4059 [*] 9.4102 ^{**}	10.2142 [*] 10.6248 ^{**}	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	9.8102 [*] 9.8888 ^{**}	8.9724 [*] 8.9834 ^{**}	11.8937 [*] 10.1683 ^{**}	11.3435 [*] 11.5231 ^{**}	-

* Nos calculs sans désordre, ** Calculs avec désordre.

^a Référence [18], ^b Référence [12], ^c Référence [11], ^d Référence [19], ^e Référence [13], ^f Référence [3].

V.2.3.1. Effet de désordre :

Les figures (V-9), (V-10) et (V-11) représentent la variation de la constante diélectrique statique calculé avec différentes relations de l'alliage quaternaire déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe en fonction de la concentration y de l'Arsenic ces figures sont des interpolations quadratiques, traduites par les relations suivantes :

Pour substrat InP

$$\varepsilon_0 = 12.6667 - 7.8275y + 5.5429y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.31a})$$

$$\varepsilon_0 = 12.4795 - 7.7287y + 5.8824y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.31b})$$

$$\varepsilon_0 = 14.10386 - 9.1090y + 7.4085y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.32a})$$

$$\varepsilon_0 = 13.8740 - 7.9686y + 7.4692y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.32b})$$

$$\varepsilon_0 = 12.6745 - 4.6573y + 4.21448y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.33a})$$

$$\varepsilon_0 = 12.5806 - 3.21216y + 3.3987y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.33b})$$

$$\varepsilon_0 = 14.5733 - 5.18993y + 4.4362y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.34a})$$

$$\varepsilon_0 = 14.4864 - 3.82344y + 3.52368y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.34b})$$

Pour substrat GaAs :

$$\varepsilon_0 = 9.0875 - 2.58076y + 2.64106y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.35a})$$

$$\varepsilon_0 = 8.41174 - 0.883429y + 1.61229y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.35b})$$

$$\varepsilon_0 = 9.72087 - 2.91304y + 3.22854y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.36a})$$

$$\varepsilon_0 = 9.0151 - 0.8491y + 1.8801y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.36b})$$

$$\varepsilon_0 = 9.6675 - 2.69146y + 3.3499y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.37a})$$

$$\varepsilon_0 = 9.07920 - 0.56721y + 1.81629y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.37b})$$

$$\varepsilon_0 = 9.92199 - 1.33673y + 3.05479y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.38a})$$

$$\varepsilon_0 = 9.88526 + 0.3478y + 1.4138y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.38b})$$

Pour substrat ZnSe :

$$\varepsilon_0 = 9.27449 - 2.81819y + 2.75820y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (\text{V.39a})$$

$$\varepsilon_0 = 8.55519 - 0.99985y + 51.64176y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (\text{V.39b})$$

$$\varepsilon_0 = 9.93202 - 3.17721y + 3.38728y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (\text{V.40a})$$

$$\varepsilon_0 = 9.18428 - 0.95498y + 1.9324y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (\text{V.40b})$$

$$\varepsilon_0 = 12.6745 - 4.6573y + 1.85398y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (\text{V.41a})$$

$$\varepsilon_0 = 9.27906 - 0.67903y + 1.85398y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (\text{V.41b})$$

$$\varepsilon_0 = 10.20751 - 1.55467y + 3.12865y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (\text{V.42a})$$

$$\varepsilon_0 = 10.13825 + 0.24711y + 1.4347y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (\text{V.42b})$$

De même que n et ε_∞ , on note que ε_0 prouve une croissance non linéaire en fonction de la fraction molaire y de l'Arsenic. Comme il est clair l'allure de variation de ε_0 en fonction de y dans le cas où nos calculs sont effectués par les relations de Moss, Ghosh se diffèrent à celle de Herve est Ravindra.

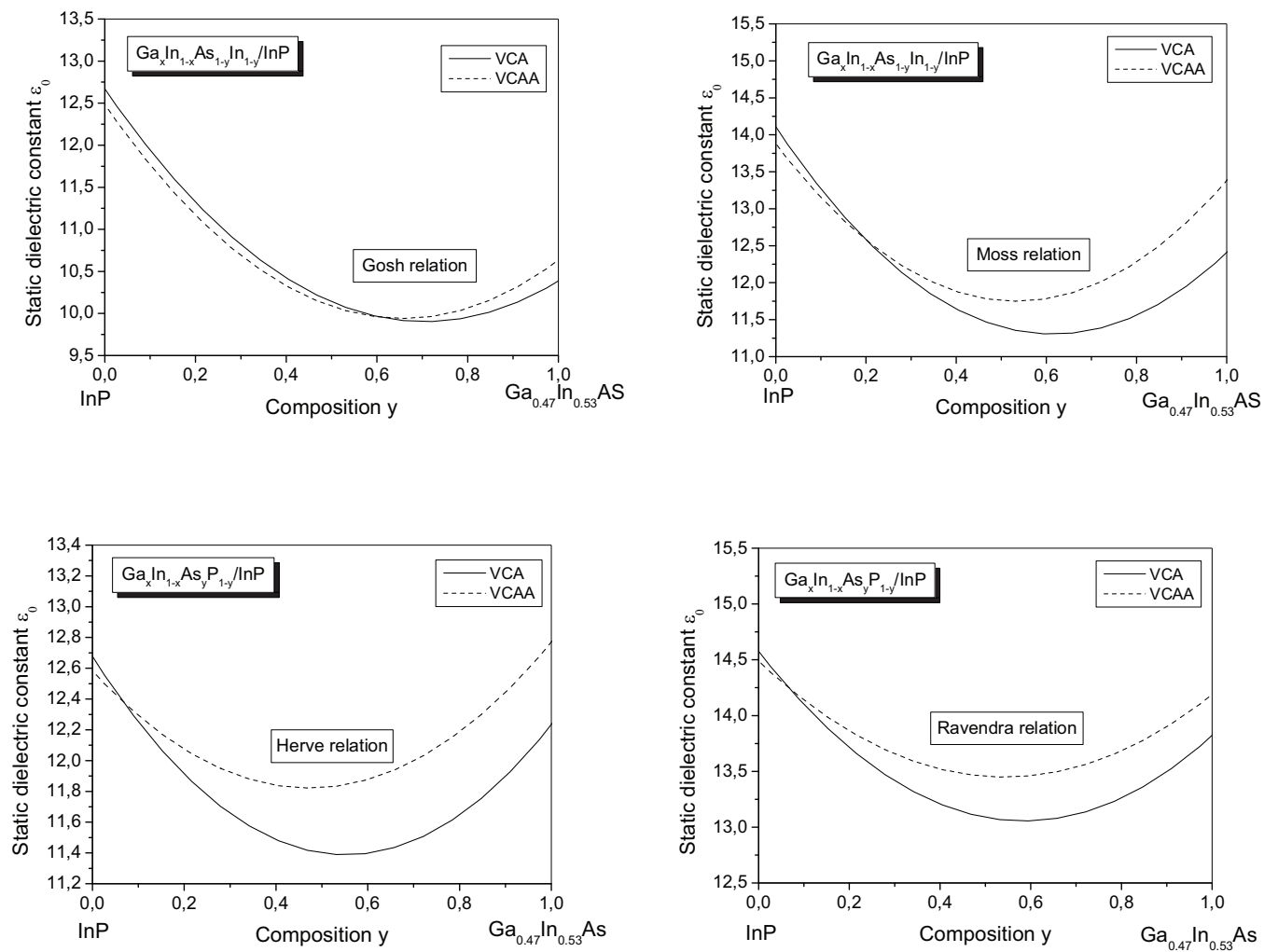


Figure V-9 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic du quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

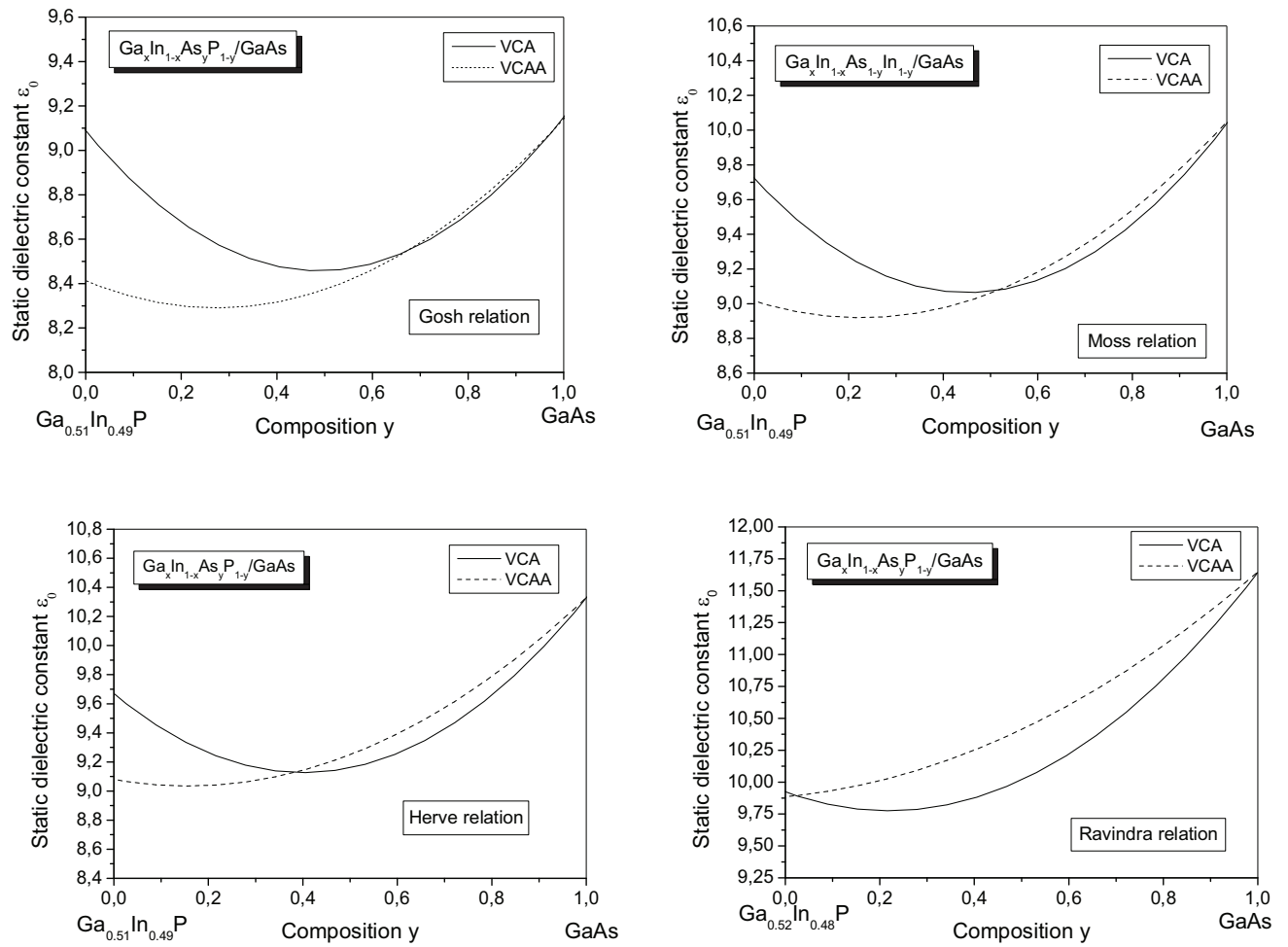


Figure V-10 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

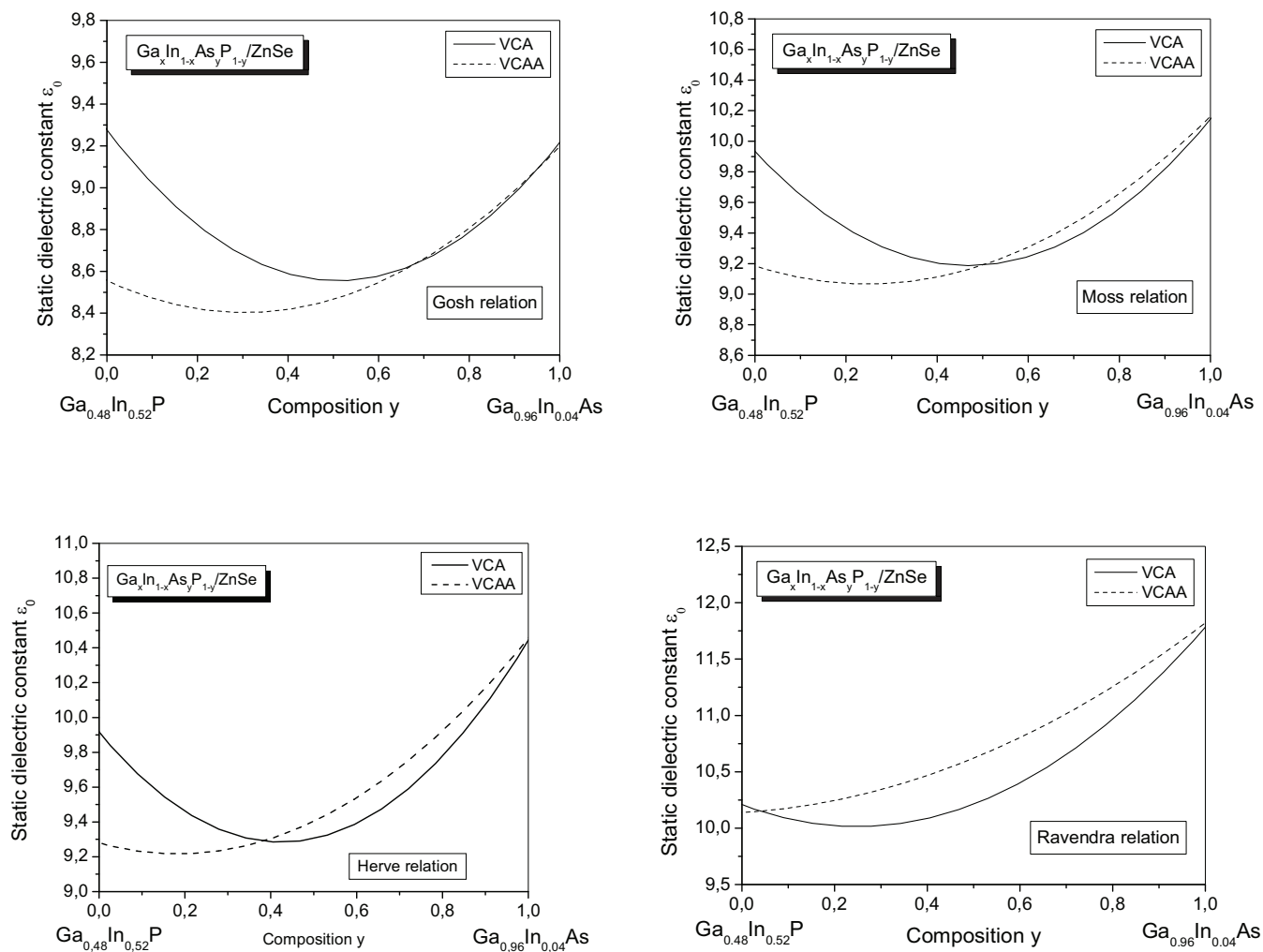


Figure V-11 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$, calculé par les différentes relations : sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

V.2.3.2. Effet de substrat :

La variation de ϵ_0 obtenue par l'application des relations précédente en fonction de la concentration y de l'alliage quaternaire déposé sur différent substrat avec la considération de l'effet de désordre compositionnel sont schématisé dans la figure (V-12), on remarque que ϵ_0 marque une variation non linéaire en fonction de la fraction molaire y pour toutes les relations utilisés dans nos calculs ainsi que pour chaque substrats choisis. D'où on peut dire que les substrats choisis ont un effet similaire sur les constantes optiques et diélectrique.

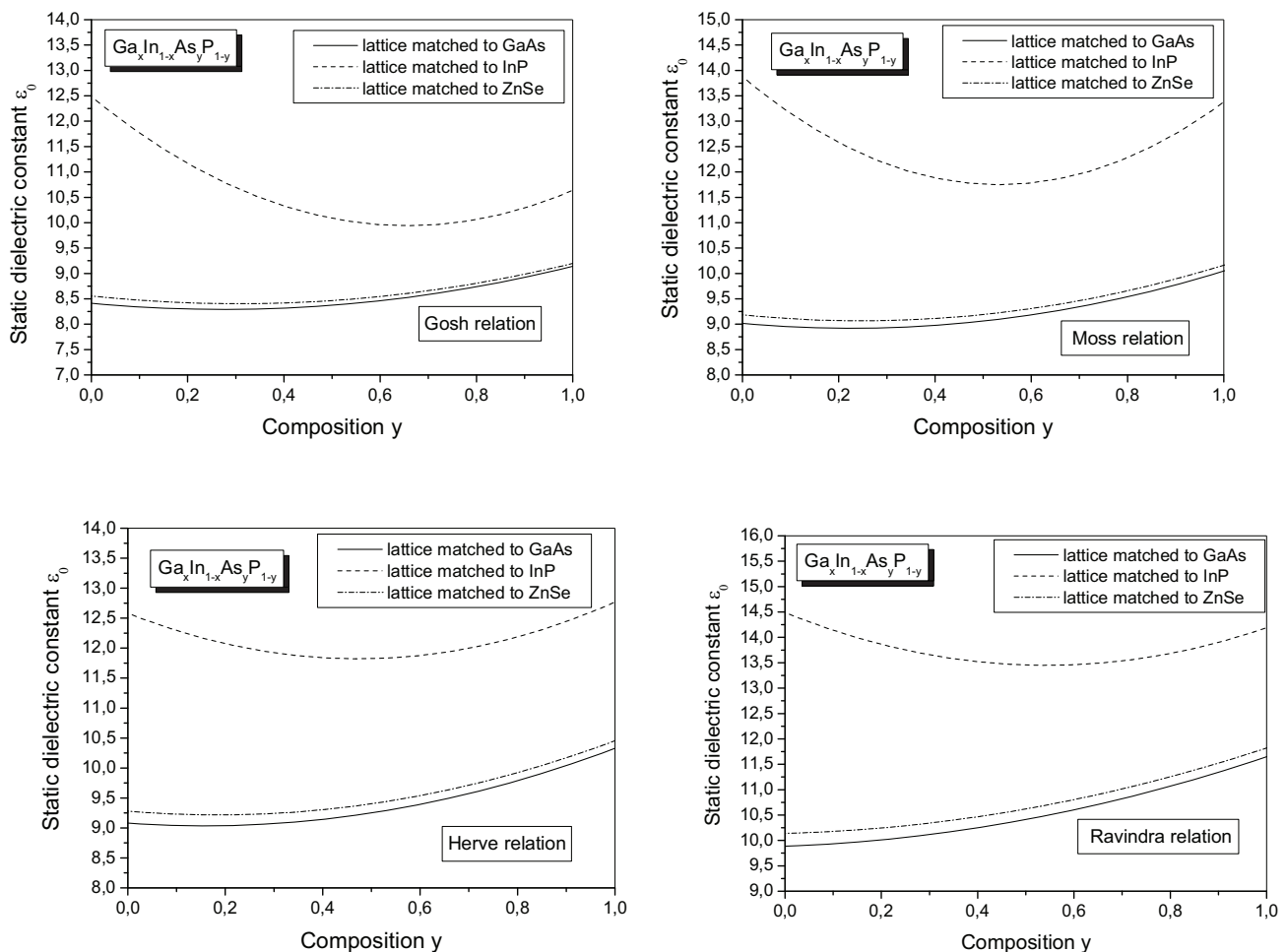


Figure V-12 : La variation de la constante diélectrique statique en fonction de concentration y de l'Arsenic du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur : InP, GaAs et ZnSe, calculé par les différentes relations.

V. 3. Propriétés élastiques :

V.3.1. Constantes élastiques :

Les calculs des constantes élastiques sont effectués par l'application des relations de Baranowski. Les tableaux (V-12, V-13 et V-14) représentent respectivement les valeurs des constantes élastiques calculés pour l'alliage sous investigation déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe avec quelques valeurs pour comparaison reporté dans la littérature. L'accord entre nos résultats et celle trouvé dans la littérature est raisonnable pour les binaire GaAs, InAs, GaP et InP, en absence des valeurs de comparaison pour les alliages ternaires et quaternaires a notre connaissance, ces résultats peuvent être prise pour référence.

Le calcul des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} permet de déterminer la stabilité du cristal selon les conditions de la stabilité mécanique du cristal cubique, exprimé par :

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

Comme l'indique les valeurs calculées des constantes élastiques données dans les Tableaux (V-12, V-13 et V-14), il est clair que ces conditions sont bien remplies et que les structures cristallines de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les différents substrats peuvent être considérées comme stables.

Tableau V-12 : Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ / InP.

Composants	Constantes élastique (10^{11} dynes.cm ⁻²)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	8.7412	10.22 ^{a, b}	3.8042	5.76 ^a , 5.73 ^b	3.9655	4.6 ^a , 4.42 ^b
GaAs	13.2473	12.11 ^a 11.88 ^b	5.7059	5.48 ^a , 5.38 ^b	6.0410	6.04 ^a , 5.94 ^b
InAs	9.9372	8.324 ^a 8.329 ^b	4.2696	4.526 ^{a, b}	4.5371	3.959 ^{a, b}
GaP	15.1779	14.39 ^a 14.05 ^b	6.5507	6.52 ^a , 6.203 ^b	6.9146	7.143 ^a , 7.033 ^b
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	11.3562 [*] 11.6738 ^{**}		4.8845 [*] 5.0153 ^{**}		5.1823 [*] 5.3302 ^{**}	
$\text{Ga}_{0.33}\text{In}_{0.67}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$	10.6051 [*] 11.1296 ^{**}		4.5749 [*] 4.7911 ^{**}		4.8325 [*] 5.0767 ^{**}	
$\text{Ga}_{0.42}\text{In}_{0.58}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}$	11.2613 [*] 11.6313 ^{**}		4.8454 [*] 4.9978 ^{**}		5.1380 [*] 5.3104 ^{**}	

* Nos calculs sans désordre, ** Nos calculs avec désordre.

^a référence [19], ^b référence [20]

Tableau V-13 : Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ GaAs.

Composants	Constantes élastique (10^{11} dynes.cm ⁻²)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	8.7412	10.22 ^{a,b}	3.8042	5.76 ^a 5.73 ^b	3.9655	4.6 ^a 4.42 ^b
GaAs	13.2473	12.11 ^a , 11.88 ^b	5.7059	5.48 ^a 5.38 ^b	6.0410	6.04 ^a , 5.94 ^b
InAs	9.9372	8.324 ^a 8.329 ^b	4.2696	4.526 ^a 4.526 ^b	4.5371	3.959 ^a , 3.959 ^b
GaP	15.1779	14.39 ^a 14.05 ^b	6.5507	6.52 ^a 6.203 ^b	6.9146	7.143 ^a , 7.033 ^b
Ga _{0.52} In _{0.48} P	11.7749 [*] 12.8609 ^{**}	-	5.0981 [*] 5.5466 ^{**}	-	5.3557 [*] 5.8611 ^{**}	-
Ga _{0.75} In _{0.25} As _{0.5} P _{0.5}	12.9117 [*] 13.5315 ^{**}	-	5.5675 [*] 5.8230 ^{**}	-	5.8848 [*] 6.1734 ^{**}	-
Ga _{0.95} In _{0.05} As _{0.9} P _{0.1}	13.2272 [*] 13.378 ^{**}	-	5.6976 [*] 5.7599 ^{**}	-	6.0317 [*] 6.1021 ^{**}	-

* Nos calcule sans désordre, **Nos calcule avec désordre.

^a référence [19], ^b référence [20]

Tableau V-14 : Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$.

Composants	Constantes élastique (10^{11} dynes.cm ⁻²)					
	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	8.7412	10.22 ^{a,b}	3.8042	5.76 ^a 5.73 ^b	3.9655	4.6 ^a , 4.42 ^b
GaAs	13.2473	12.11 ^a , 11.88 ^b	5.7059	5.48 ^a 5.38 ^b	6.0410	6.04 ^a , 5.94 ^b
InAs	9.9372	8.324 ^a 8.329 ^b	4.2696	4.526 ^a 4.526 ^b	4.5371	3.959 ^a , 3.959 ^b
GaP	15.1779	14.39 ^a 14.05 ^b	6.5507	6.52 ^a , 6.203 ^b	6.9146	7.143 ^a , 7.033 ^b
$\text{Ga}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{P}$	11.5508 [*] 12.6443 ^{**}	-	5.0025 [*] 5.4541 ^{**}	-	5.2531 [*] 5.7619 ^{**}	-
$\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}$	13.1073 [*] 13.1787 ^{**}	-	5.6450 [*] 5.6745 ^{**}	-	5.9775 [*] 6.0108 ^{**}	-
$\text{Ga}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$	12.7372 [*] 13.3883 ^{**}	-	5.4924 [*] 5.7608 ^{**}	-	5.8052 [*] 6.1084 ^{**}	-
$\text{Ga}_{0.91}\text{In}_{0.09}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}$	13.0804 [*] 13.2908 ^{**}	-	5.6339 [*] 5.7206 ^{**}	-	5.965 [*] 6.063 ^{**}	-

* Nos calcule sans désordre, **Nos calcule avec désordre.

^a référence [19], ^b référence [20]

V.3.1.1. effet de désordre :

Les calculs des constantes élastiques avec et sans considération de l'effet de désordre compositionnel sont schématisés dans les figures (V-13, V-14 et V-15) pour les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement, les constants élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) varient non linéairement avec la croissance en fonction de la concentration y de l'Arsenic quelque que soit les substrats déposés pour le quaternaire sous investigation. Le tracé des figures sont des interpolations quadratiques de nos résultats exprimés par les relations suivantes :

Pour le substrat InP

$$C_{11} = 8.7380 + 4.8760y - 2.2936y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-43a})$$

$$C_{11} = 8.8055 + 6.5575y - 3.7833y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-43b})$$

$$C_{12} = 3.8031 + 2.0164y - 0.9577y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-44a})$$

$$C_{12} = 3.8312 + 2.7096y - 1.5646y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-44b})$$

$$C_{44} = 3.9639 + 2.2676y - 1.0659y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-45a})$$

$$C_{44} = 3.9952 + 3.0507y - 1.7598y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-45b})$$

Pour le substrat GaAs

$$C_{11} = 11.7701 + 3.1032y - 1.6448y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-46a})$$

$$C_{11} = 12.8605 + 2.3191y - 1.9398y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-46b})$$

$$C_{12} = 5.0962 + 1.2813y - 0.6795y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-47a})$$

$$C_{12} = 5.5464 + 0.9560y - 0.7996y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-47b})$$

$$C_{44} = 5.3534 + 1.4441y - 0.7653y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-48a})$$

$$C_{44} = 5.8609 + 1.0800y - 0.9033y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-48b})$$

Pour le substrat ZnSe

$$C_{11} = 11.5461 + 3.2178y - 1.6765y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-49a})$$

$$C_{11} = 12.6469 + 2.4596y - 1.9395y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-49b})$$

$$C_{12} = 5.0006 + 1.3288y - 0.6927y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-50a})$$

$$C_{12} = 5.4552 + 1.0139y - 0.7995y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-50b})$$

$$C_{44} = 5.2508 + 1.4974y - 0.7800y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-51a})$$

$$C_{44} = 5.7631 + 1.1454y - 0.9032y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-51b})$$

À partir des équations si dessus il est claire que la valeur de bowing de la constante élastique C_{11} est plus importante que le bowing des équations des constantes élastiques C_{12} et C_{44} pour le quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différents substrats avec et sans désordre ce qui signifie une forte variation non linéaire de la constante élastique C_{11} en fonction de la concentration y de l'Arsenic. Dans la figure (V-13) qui représente les calculs des constantes élastiques du quaternaire

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ on observe une différence entre les courbes tracer pour les calculs sans désordre et celle calculer avec désordre moins importante que celle observer dans la figure (V-14) et la figure (V-15) pour les substrats GaAs et ZnSe respectivement. Sa signifie que nos calculs son moins influencer par l'effet de désordre pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur le substrat InP.

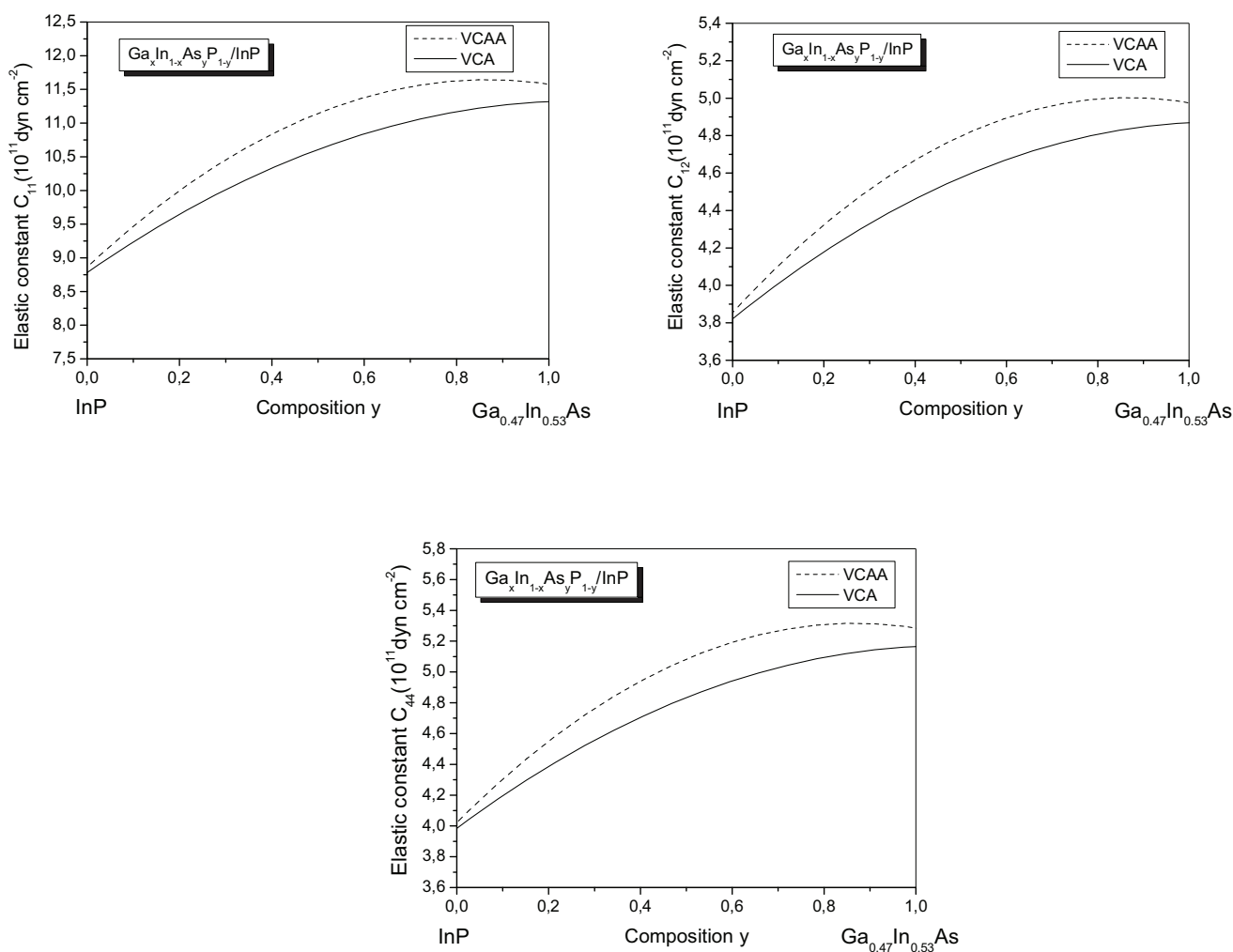


Figure V-13 : La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

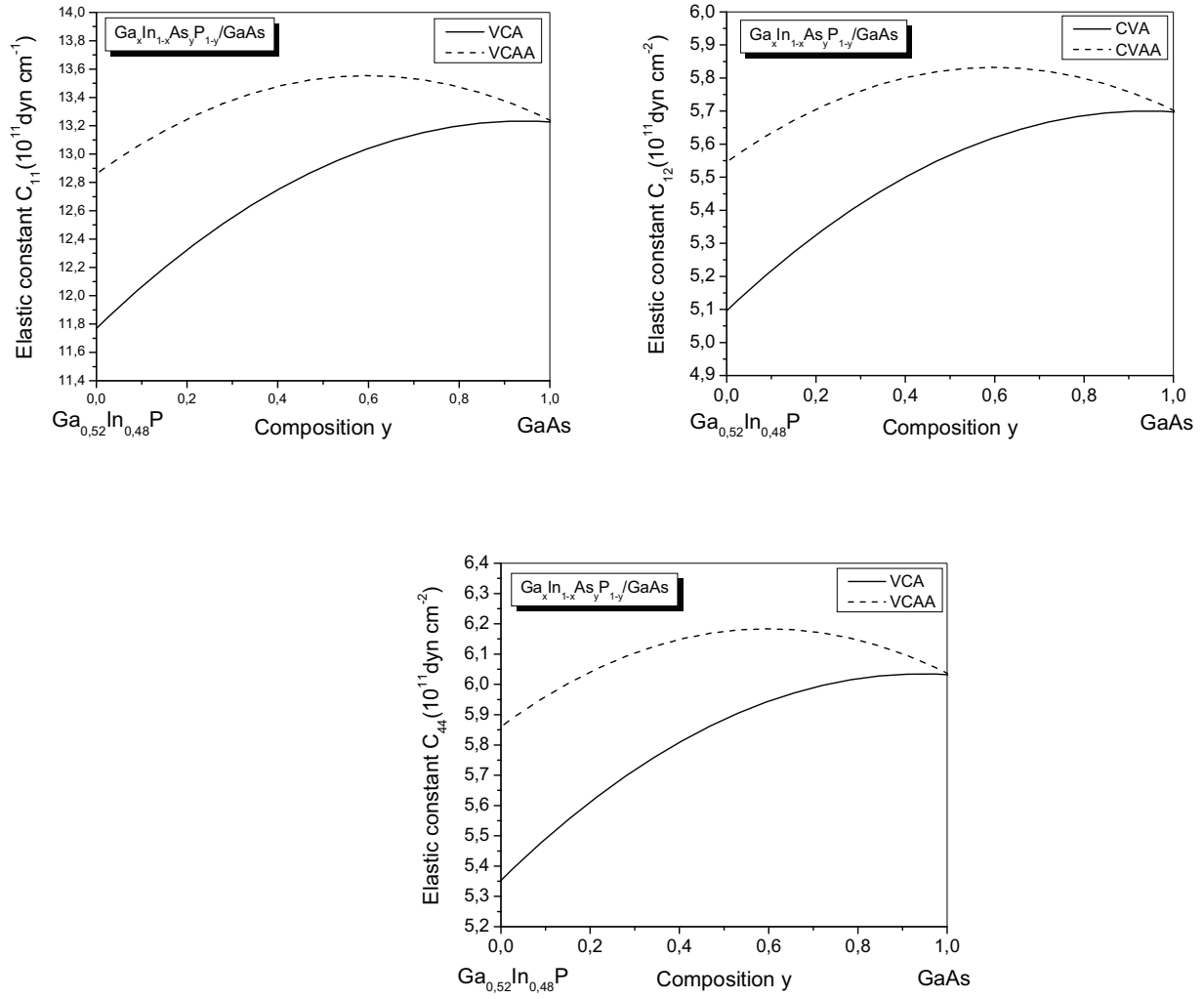


Figure V-14 : La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.

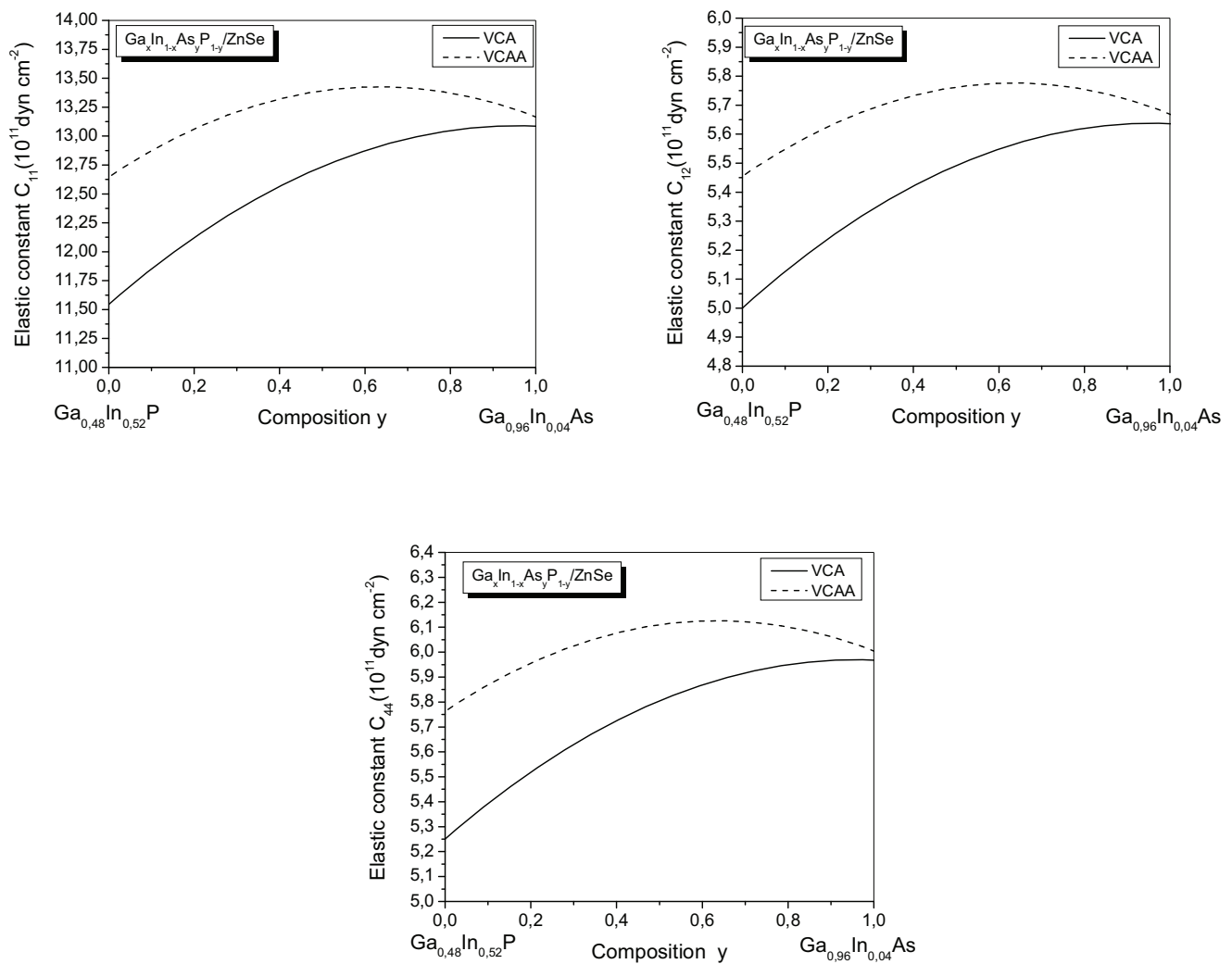


Figure V-15 : La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic : sans désordre (—) et avec désordre (- - -) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.1.3.2. Effet de substrat :

La variation des constantes (C_{11} , C_{12} et C_{44}) en fonction de concentration y dans le cas où l'effet de désordre est pris en considération sont représenté dans la figure (V-16). La tendance des constantes C_{11} , C_{12} et C_{44} est non linéaire pour tous nos calculs de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les différents substrats (InP, GaAs et ZnSe). Ainsi on peut noter que les valeurs des constantes C_{11} , C_{12} et C_{44} sont plus importantes lorsque l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ est déposé sur les substrats GaAs et ZnSe de même que l'effet de désordre est plus important avec ces deux substrats.

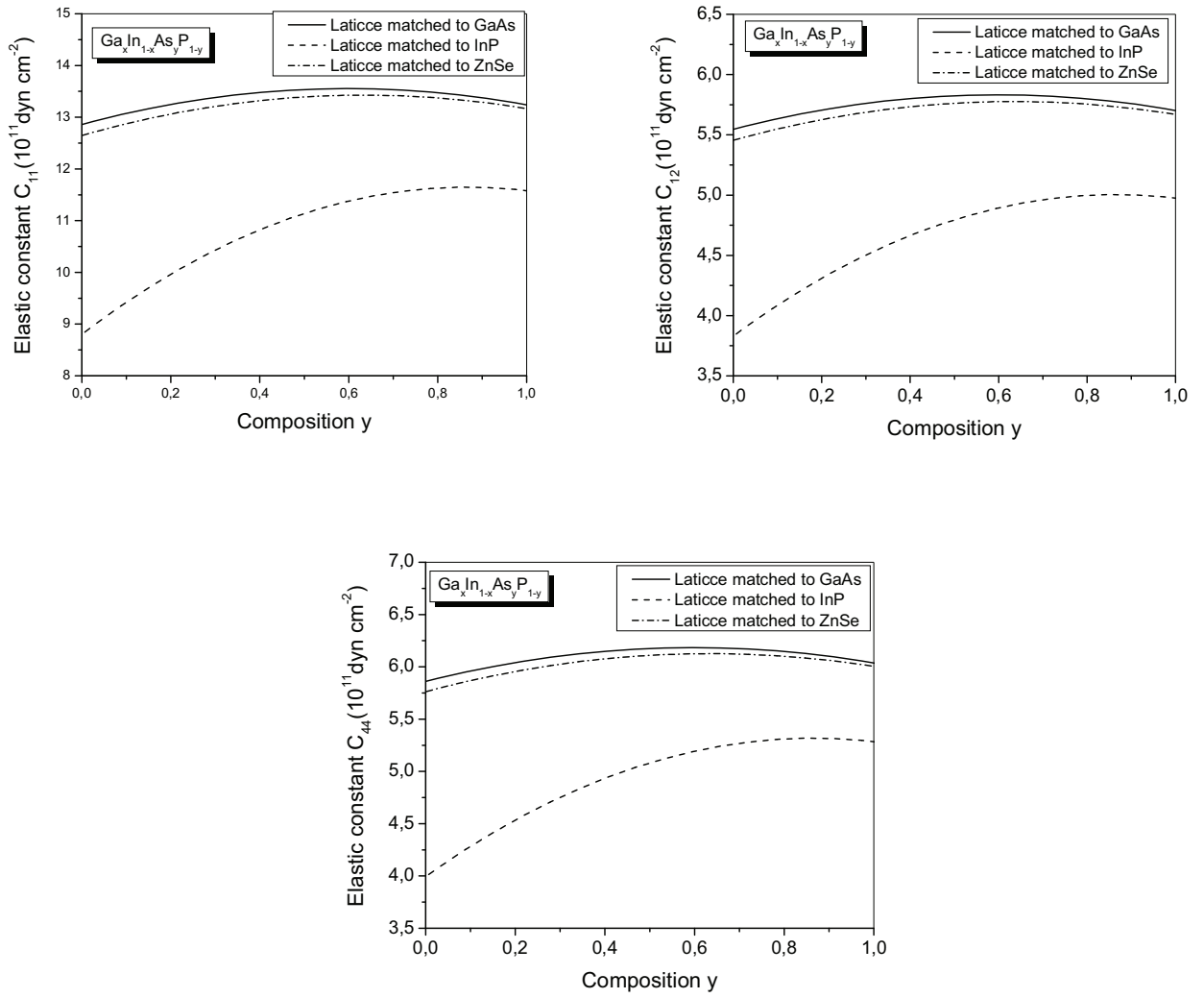


Figure V-16 : La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs, ZnSe.

V.3.2. Modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V de Reuss G_R :

Les tableaux (V-18, V-19 et V-20) représentent respectivement les valeurs des modules de cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V et de Reuss G_R du quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe. Les valeurs calculées du module de cisaillement est en accords comparant avec les valeurs existantes dans la littérature. L'absence des valeurs expérimentales pour comparer les valeurs de modules de cisaillement de Voigt et de Reuss même pour les composés binaire nous permet de dire que nos résultats peuvent être pris comme référence pour d'autres études.

Tableau V.15 : modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V et de Reuss en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

composants	G		Gr		Gv	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	3.2790	3.4 ^a	3.1913	-	3.3667	-
GaAs	5.0007	4.66 ^a	4.8685	-	5.1329	-
InAs	3.7567	2.8 ^a	3.6576	-	3.8557	-
GaP	5.7225	5.65 ^a	5.5709	-	5.8741	-
Ga _{0.47} In _{0.53} As	4.2904 [*] 4.4134 ^{**}	-	4.1771 [*] 4.2971 ^{**}	-	4.4036 [*] 4.5298 ^{**}	-
Ga _{0.33} In _{0.67} As _{0.5} P _{0.5}	3.9996 [*] 4.2026 ^{**}	-	3.8936 [*] 4.0916 ^{**}	-	4.1055 [*] 4.3137 ^{**}	-
Ga _{0.42} In _{0.58} As _{0.9} P _{0.1}	4.2536 [*] 4.3970 ^{**}	-	4.1413 [*] 4.2810 ^{**}	-	4.3660 [*] 4.5129 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [21]

Tableau V-16 : modules de Cisaillement, de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.

composants	G		Gr		Gv	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	3.2790	3.4 ^a	3.1913	-	3.3667	-
GaAs	5.0007	4.66 ^a	4.8685	-	5.1329	-
InAs	3.7567	2.8 ^a	3.6576	-	3.8557	-
GaP	5.7225	5.65 ^a	5.5709	-	5.8741	-
Ga _{0.52} In _{0.48} P	4.4309 [*] 4.8511 ^{**}	-	4.3131 [*] 4.7227 ^{**}	-	4.5488 [*] 4.9795 ^{**}	-
Ga _{0.75} In _{0.25} As _{0.5} P _{0.5}	4.8707 [*] 5.1107 ^{**}	-	4.7418 [*] 4.9758 ^{**}	-	4.9996 [*] 5.2457 ^{**}	-
Ga _{0.95} In _{0.05} As _{0.9} P _{0.1}	4.9929 [*] 5.0515 ^{**}	-	4.8609 [*] 4.9180 ^{**}	-	5.1249 [*] 5.1849 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [21]

Tableau V-17 : modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss en (10^{11} dynes.cm⁻²) calculé pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

composants	G		G_r		G_v	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	3.2790	3.4 ^a	3.1913	-	3.3667	-
GaAs	5.0007	4.66 ^a	4.8685	-	5.1329	-
InAs	3.7567	2.8 ^a	3.6576	-	3.8557	-
GaP	5.7225	5.65 ^a	5.5709	-	5.8741	-
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	4.3459 [*]	-	4.2303 [*]	-	4.4615 [*]	-
	4.7689 ^{**}	-	4.6426 ^{**}	-	4.8952 ^{**}	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	4.9481 [*]	-	4.8173 [*]	-	5.0789 [*]	-
	4.9758 ^{**}	-	4.8443 ^{**}	-	5.1073 ^{**}	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	4.8048 [*]	-	4.6776 [*]	-	4.9320 [*]	-
	5.0569 ^{**}	-	4.9234 ^{**}	-	5.1905 ^{**}	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	4.9377 [*]	-	4.8072 [*]	-	5.0682 [*]	-
	5.0192 ^{**}	-	4.8866 ^{**}	-	5.1518 ^{**}	-

^{*} nos calcule sans désordre, ^{**} nos calcule avec désordre.

^a référence [20]

V.3.2.1. Effet de désordre :

Nos calculs des module de cisaillement sont schématiser dans les figures (V-21, V-22 et V-23) pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement. Les modules calculés représentent une croissance non linéaire en fonction de la concentration de l'Arsenic, comme on peut noter généralement que l'effet de désordre compositionnel a le même impact remarqué pour les constantes élastiques.

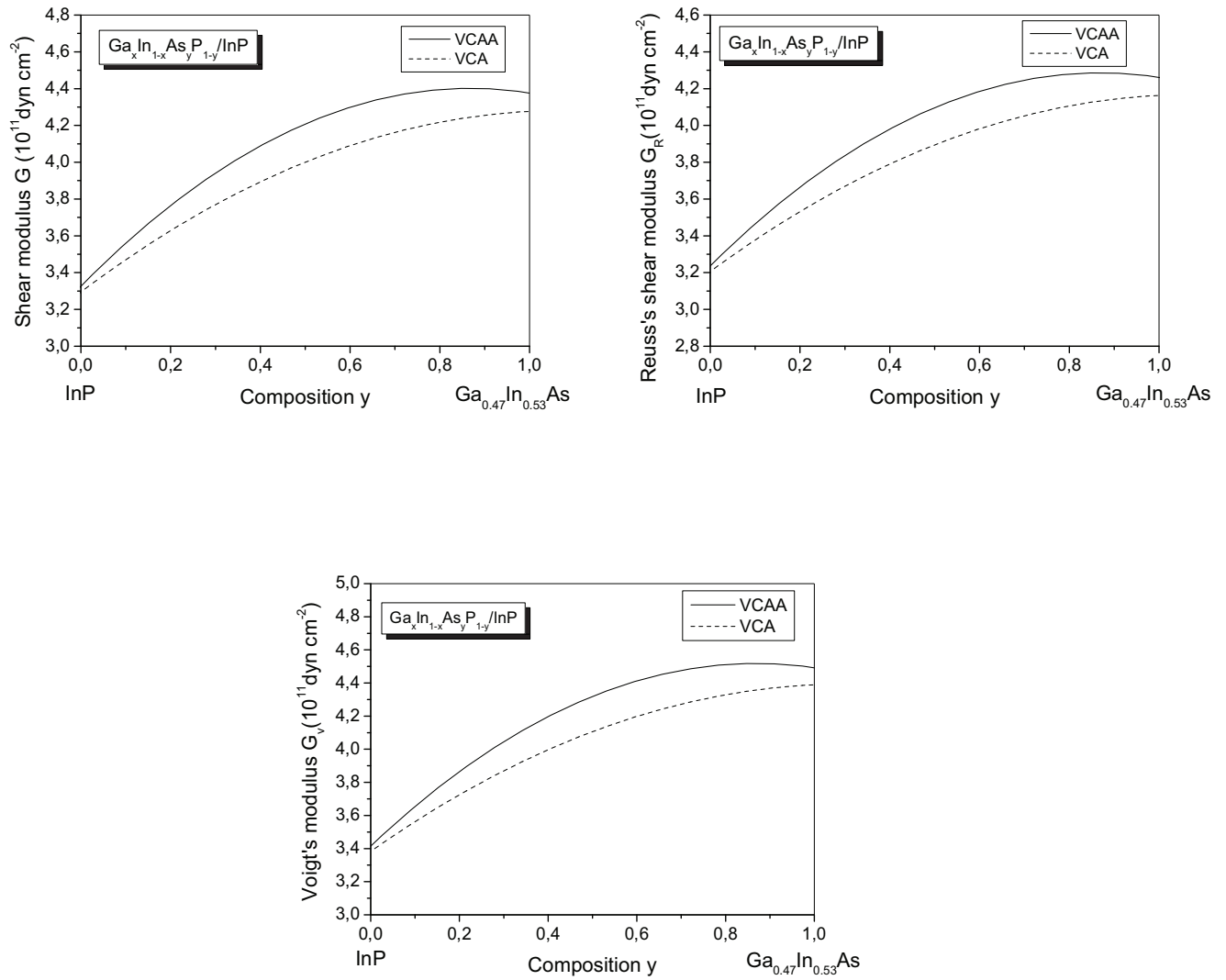


Figure V-17 : La variation des modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_v , et de cisaillement de Reuss G_R en ($10^{11} \text{ dynes.cm}^{-2}$) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

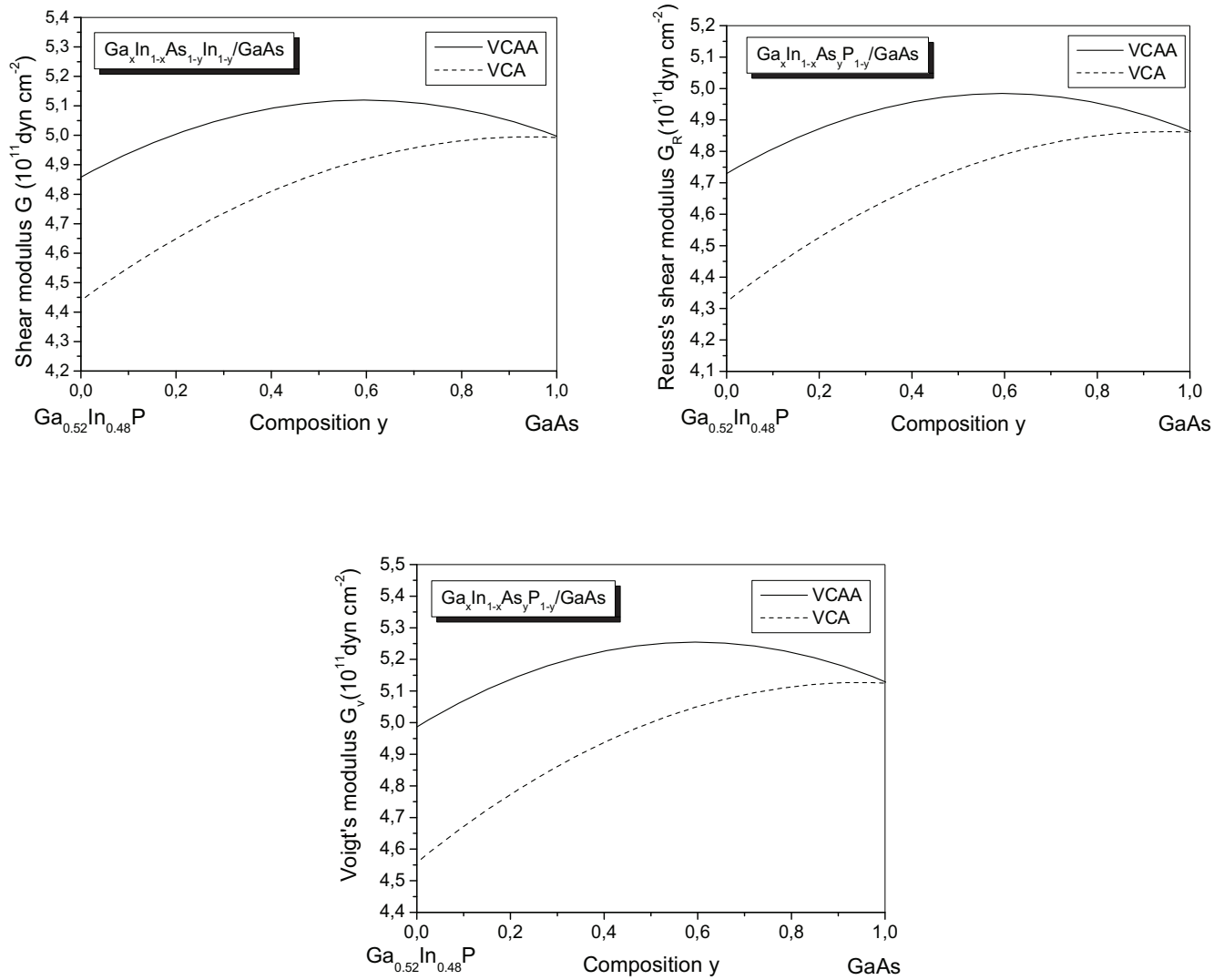


Figure V-18 : La variation des *modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R* en ($10^{11} \text{ dynes.cm}^{-2}$) en fonction de la concentration y quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.

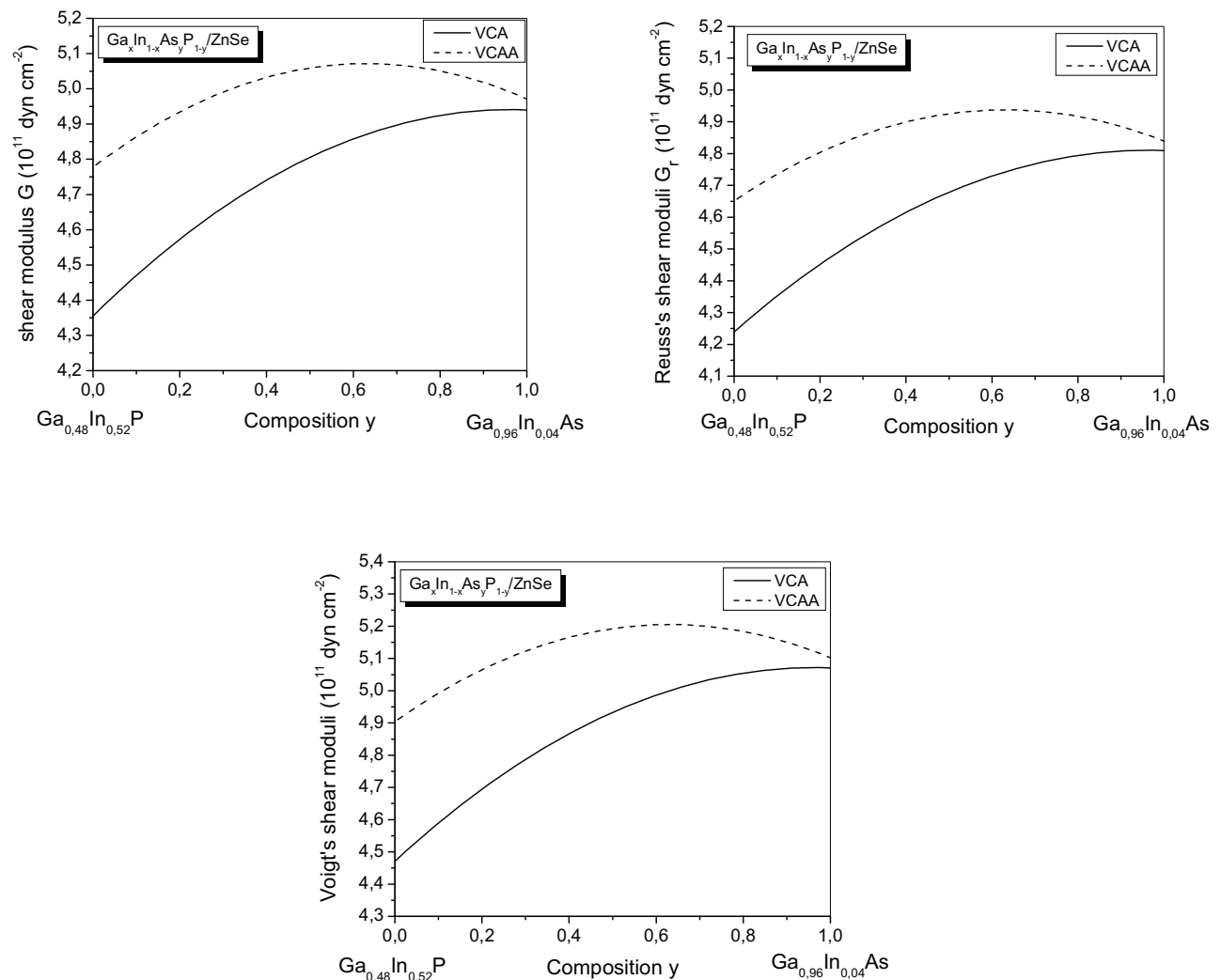


Figure V-19 : La variation des *modules de Cisaillement* G , de *cisaillement de Voigt* G_V , et de *cisaillement de Reuss* G_R en (10^{11} dynes. cm^{-2}) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.3.2.2. Effet de substrat :

La figure V.20 est le tracer de la variation des modules de cisaillement G , G_R et G_V du quaternaire sous investigation déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe dans le cas où l'effet de désordre est pris en considération en fonction de la concentration y de l'Arsenic. On peut noter de même que l'effet de substrat n'a aucune influence sur la tendance des courbes en fonction de y , comme il est clair pour ces modules leurs valeurs pour les substrats GaAs et ZnSe sont plus importantes aux modules calculés pour le InP contrairement aux résultats obtenus pour les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} .

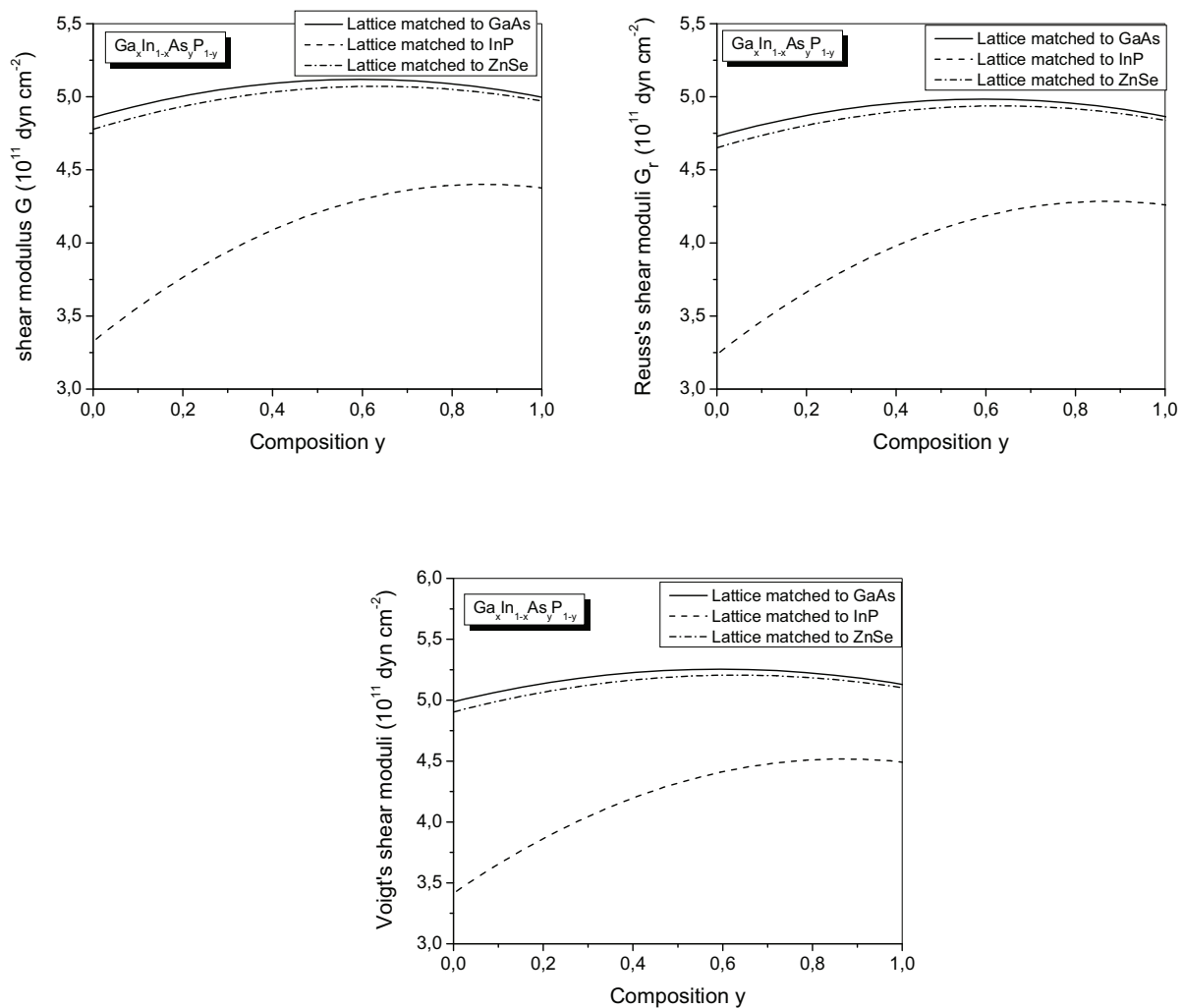


Figure V-20 : La variation des *modules de Cisaillement G , de cisaillement de Voigt G_V , et de cisaillement de Reuss G_R* en (10^{11} dynes. cm^{-2}) en fonction de la concentration y quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

V.3.3. Modules de compressibilité (Bu), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) :

La détermination des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} permet de calculer les modules de compressibilité (Bu), de cisaillement (Cs) et de Young (Y) en employant les équations cités dans le troisième chapitre (III.42, III.43 et III.44) respectivement. Ces calculs sont illustrés dans les tableaux (V-15, V-16, V-17) pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement. La comparaison des résultats obtenus pour les trois modules avec les valeurs disponibles montrent un accord assez raisonnable pour les binaires, pour les alliages ternaires et quaternaires nos résultats peuvent être pris comme références.

Tableau V-18 : Modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en (10^{11} dynes.cm⁻²) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

Composants	B		Y		Cs	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	5.4499	7.247 ^a , 7.23 ^b	8.1938	8.9 ^c	2.4685	2.25 ^b
GaAs	8.2197	7.69 ^a , 7.55 ^b	12.4727	11.6 ^c	3.7707	3.25 ^b
InAs	6.1587	5.794 ^a , 5.79 ^b	9.3658	7.4 ^c	2.8338	1.90 ^b
GaP	9.4264	9.143 ^a , 8.82 ^b	14.2783	14.0 ^c	4.3136	3.92 ^b
Ga _{0.47} In _{0.53} As	7.0417 [*] 7.2348 ^{**}	-	10.6985 [*] 11.0030 ^{**}	-	3.2359 [*] 3.3293 ^{**}	-
Ga _{0.33} In _{0.67} As _{0.5} P _{0.5}	6.5849 [*] 6.904 ^{**}	-	9.9786 [*] 10.4813 ^{**}	-	3.0151 [*] 3.1692 ^{**}	-
Ga _{0.42} In _{0.58} As _{0.9} P _{0.9}	6.9840 [*] 7.2089 ^{**}	-	10.6075 [*] 10.9622 ^{**}	-	3.2079 [*] 3.3167 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [22], ^b référence [23], ^c référence

Tableau V-19 : modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en (10^{11} dynes.cm⁻²) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.

composants	B		Y		Cs	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	5.4499	7.247 ^a , 7.23 ^b	8.1938	8.9	2.4685	2.25 ^b
GaAs	8.2197	7.69 ^a , 7.55 ^b	12.4727	11.6	3.7707	3.25 ^b
InAs	6.1587	5.794 ^a , 5.79 ^b	9.3658	7.4	2.8338	1.90 ^b
GaP	9.4264	9.143 ^a , 8.82 ^b	14.2783	14.0	4.3136	3.92 ^b
Ga _{0.52} In _{0.48} P	7.3237 [*] 7.9846 ^{**}	-	11.0620 [*] 12.1024 ^{**}	-	3.3383 [*] 3.6571 ^{**}	-
Ga _{0.75} In _{0.25} As _{0.5} P _{0.5}	8.0155 [*] 8.3925 ^{**}	-	12.1510 [*] 12.7451 ^{**}	-	3.6721 [*] 3.8542 ^{**}	-
Ga _{0.95} In _{0.05} As _{0.9} P _{0.1}	8.2074 [*] 8.2994 ^{**}	-	12.4534 [*] 12.5984 ^{**}	-	3.7647 [*] 3.8092 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [19], ^b référence [20]

Tableau V-20 : modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (Cs) en (10^{11} dynes.cm⁻²) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

composants	B		Y		Cs	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	5.4499	7.247 ^a , 7.23 ^b	8.1938	8.9	2.4685	2.25 ^b
GaAs	8.2197	7.69 ^a , 7.55 ^b	12.4727	11.6	3.7707	3.25 ^b
InAs	6.1587	5.794 ^a , 5.79 ^b	9.3658	7.4	2.8338	1.90 ^b
GaP	9.4264	9.143 ^a , 8.82 ^b	14.2783	14.0	4.3136	3.92 ^b
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	7.1853 [*] 7.8508 ^{**}	-	10.8502 [*] 11.8977 ^{**}	-	3.2741 [*] 3.5951 ^{**}	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	8.1324 [*] 8.1758 ^{**}	-	12.3414 [*] 12.4099 ^{**}	-	3.7311 [*] 3.7521 ^{**}	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	7.9073 [*] 8.3032 ^{**}	-	11.9866 [*] 12.6107 ^{**}	-	3.6223 [*] 3.8137 ^{**}	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	8.1160 [*] 8.2440 ^{**}	-	12.3156 [*] 12.5173 ^{**}	-	3.7232 [*] 3.7850 ^{**}	-

* nos calculs sans désordre, ** nos calculs avec désordre.

^a référence [22], ^b référence [23]

V.3.3.1. Effet de désordre :

La variation de module de compressibilité, de Young et de cisaillement pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats binaire InP, GaAs et ZnSe sont illustrés dans les figures IV.17, IV.18 et IV.19 respectivement. La variation des trois modules prouve une croissance non linéaire en fonction de la concentration y de l'Arsenic, avec la présence d'un effet de désordre remarquable et plus important dans le cas où l'alliage est déposé sur GaAs et ZnSe.

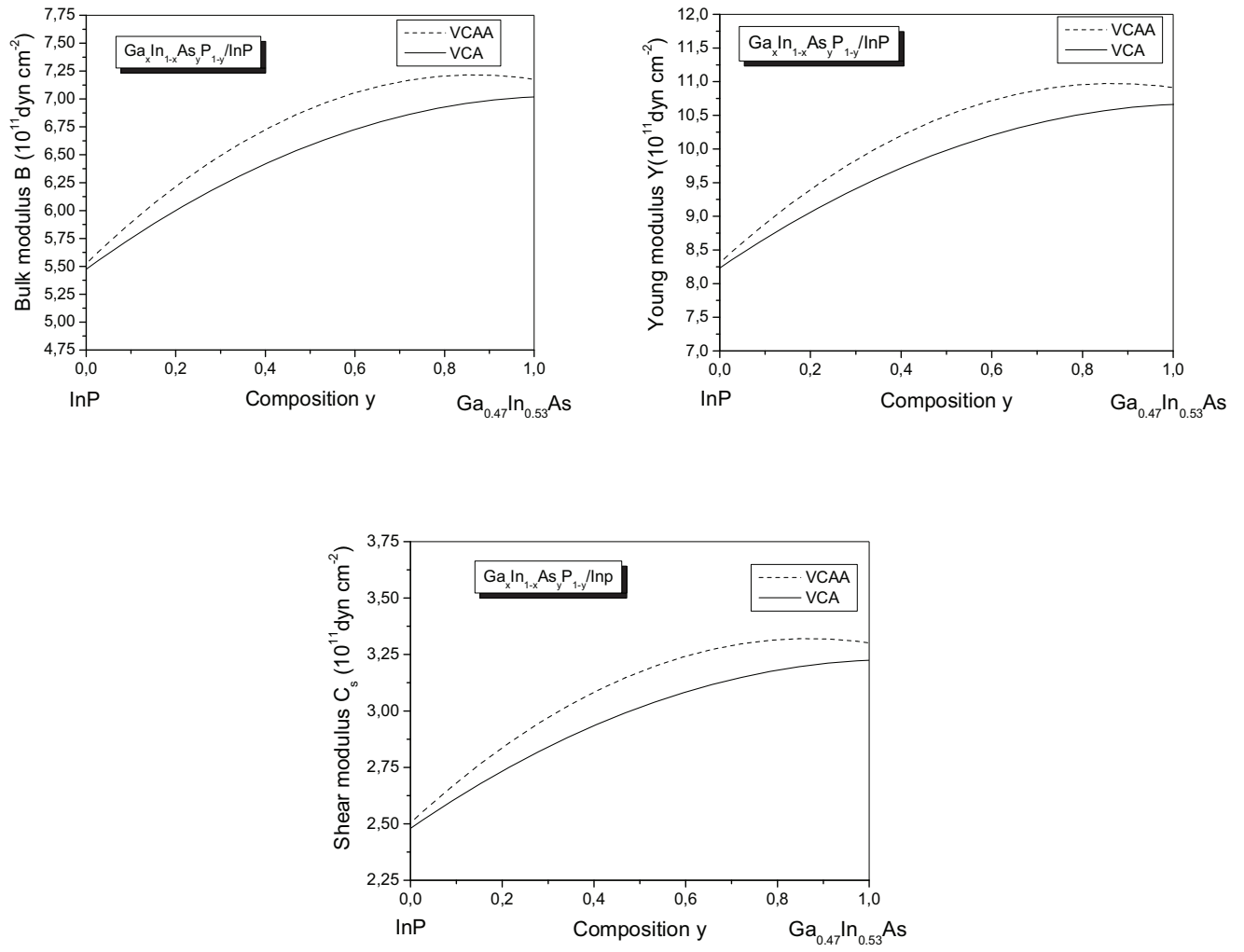


Figure V- 21 : La variation des modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

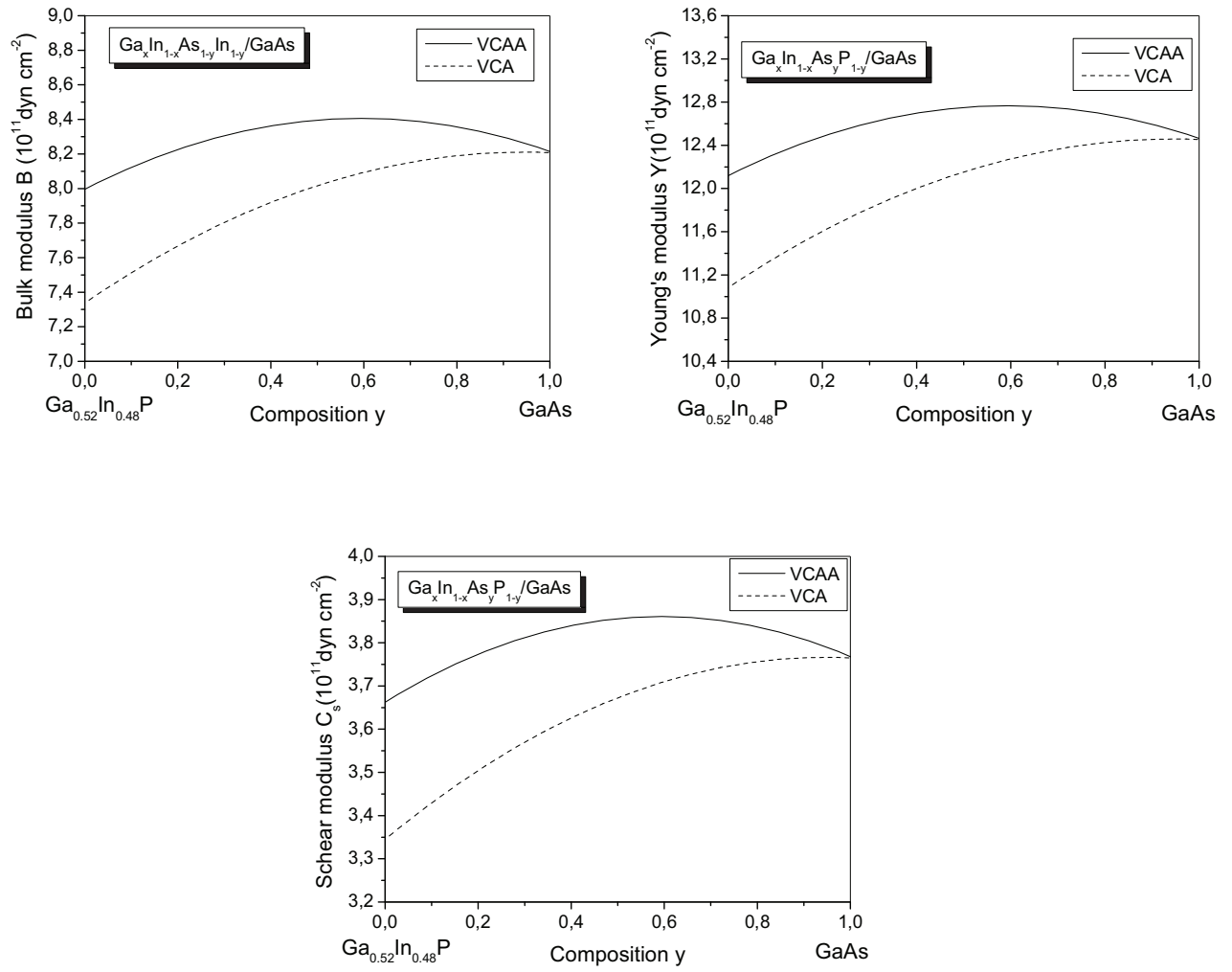


Figure V-22 : La variation des modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.

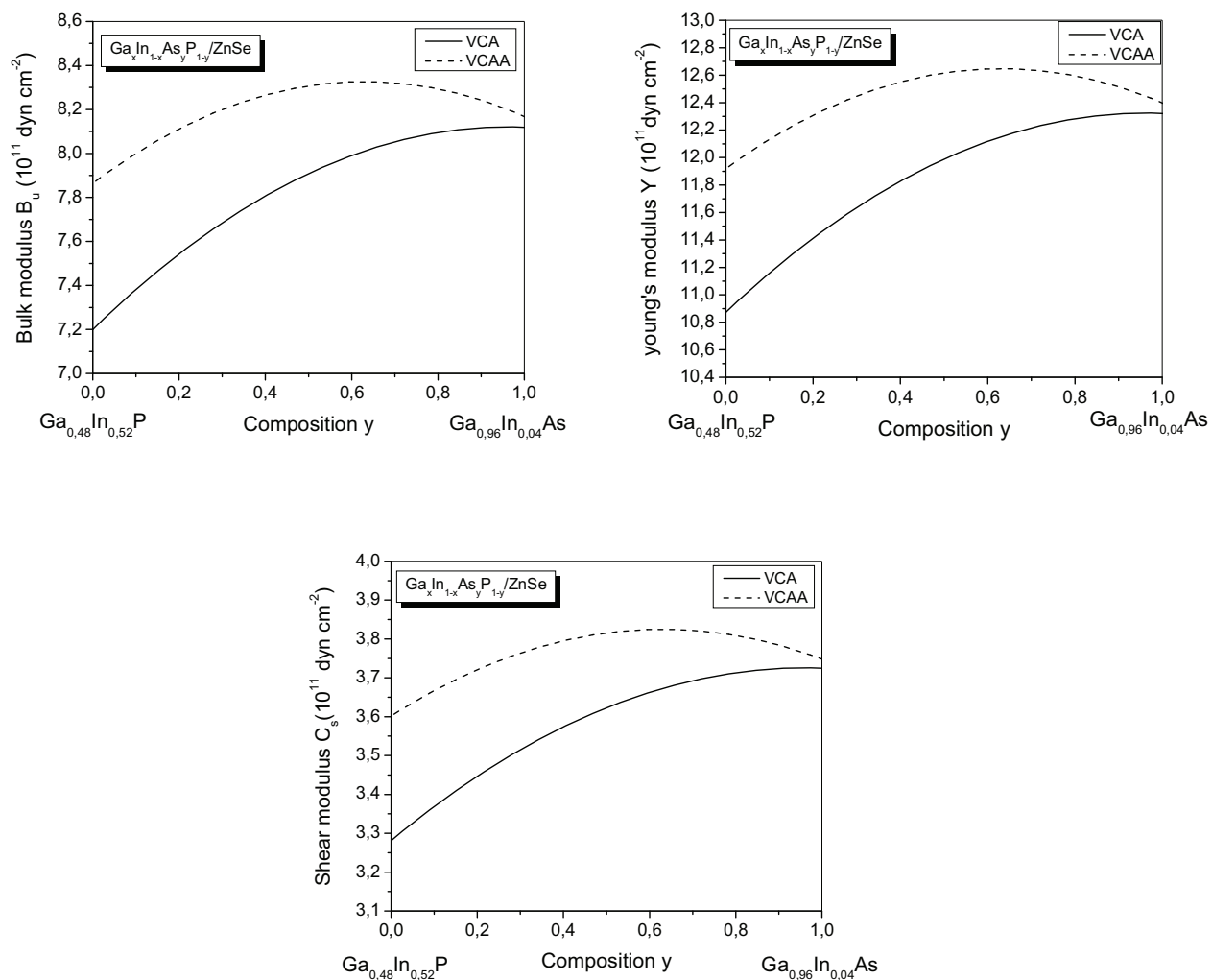


Figure V-23 : La variation des modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.3.3.2. Effet de substrat :

Avec la présence de l'effet de désordre compositionnel la figure V.24 est une représentation de la variation des modules : de compressibilité, de Young et de cisaillement en fonction de la variation de composition y de l'As. Pour les trois substrats proposés les courbes montrent une croissance non linéaire avec des valeurs des modules moins importantes dans le cas où le quaternaire est déposé sur le InP, pour le cas des substrats GaAs et ZnSe l'effet de substrat est faiblement présent.

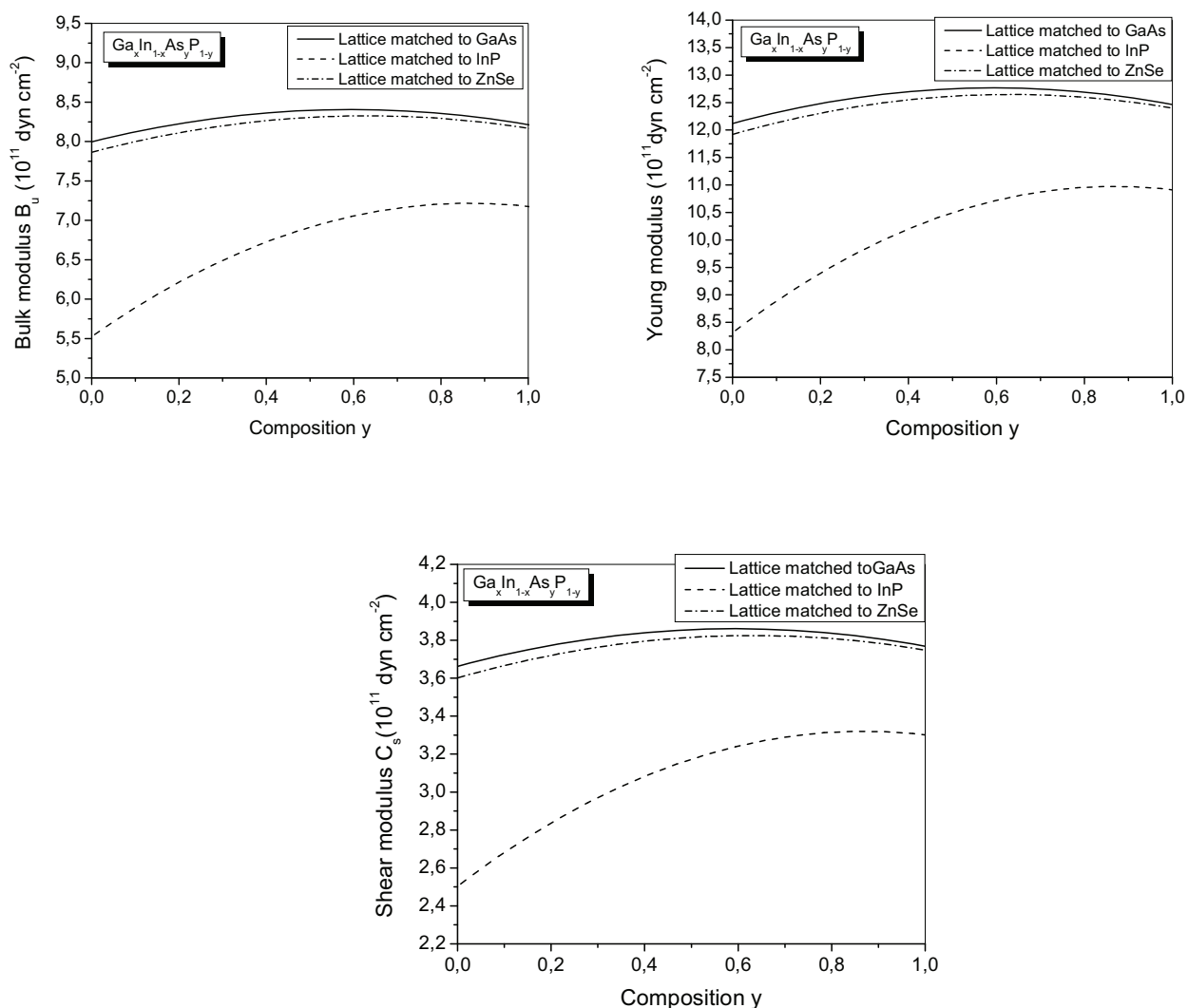


Figure V- 24 : La variation des modules de compressibilité (B), de Young (Y) et de cisaillement (C_s) en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

V.3.4. Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ :

Dans les tableaux V.21, V.22 et V.23 sont illustrés les valeurs calculées de : Paramètre de Kleinman ζ (paramètre interne de déformation), facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ , avec quelques valeurs pour comparaisons. La comparaison des résultats obtenus pour les trois modules avec les valeurs disponibles montrent un accord assez raisonnable pour les binaires, pour les alliages ternaires et quaternaires nos résultats peuvent être pris comme références.

Tableau V-21 : Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

Composants	paramètre de Kleinman ζ		Facteur d'isotropie A		Coefficient de Poisson σ	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	0.6065	0.584 ^a 0.744 ^a	0.6225	0.508 ^b	0.3032	0.30 ^a
GaAs	0.6021	0.500 ^a 0.456 ^a	0.6242	0.547 ^b	0.3011	0.24 ^a , 0.3 ^b
InAs	0.6011	0.552 ^a 0.706 ^a	0.6238	0.480 ^b	0.3005	0.30 ^b
GaP	0.603	0.501 ^a 0.688 ^a	0.6246	0.558 ^b	0.3015	0.24 ^b
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	0.6015 [*] 0.6010 ^{**}	-	0.6244 [*] 0.6246 ^{**}	-	0.3008 [*] 0.3005 ^{**}	-
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	0.6028 [*] 0.6019 ^{**}	-	0.6239 [*] 0.6243 ^{**}	-	0.3014 [*] 0.3009 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	0.6017 [*] 0.6011 ^{**}	-	0.6244 [*] 0.6246 ^{**}	-	0.3008 [*] 0.3005 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [22], ^b référence [24]

Tableau V-22 : Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.

composants	paramètre de Kleinman ζ		Facteur d'isotropie A		Coefficient de Poisson σ	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	0.60647	0.584 0.744	0.62248	0.508 ^b	0.3032	0.30 ^a
GaAs	0.60210	0.500 0.456	0.62417	0.547 ^b	0.3011	0.24 ^a , 0.3 ^b
InAs	0.60106	0.552 0.706	0.62384	0.480 ^b	0.3005	0.30 ^b
GaP	0.60295	0.501 0.688	0.62458	0.558 ^b	0.3015	0.24 ^b
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	0.60429 [*] 0.60264 ^{**}	-	0.62332 [*] 0.62396 ^{**}	-	0.3021 [*] 0.3013 ^{**}	-
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	0.60257 [*] 0.60172 ^{**}	-	0.62399 [*] 0.62432 ^{**}	-	0.3013 0.3009 ^{**}	-
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	0.60213 [*] 0.60192 ^{**}	-	0.62416 [*] 0.62424 ^{**}	-	0.30106 [*] 0.30096 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [22], ^b référence [24]

Tableau V-23 : Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

composants	paramètre de Kleinman ζ		Facteur d'isotropie A		Coefficient de Poisson σ	
	Cal	Autres	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	0.60647	0.584 ^a 0.744 ^a	0.62248	0.508 ^b	0.30323	0.30
GaAs	0.60210	0.500 ^a 0.456 ^a	0.62417	0.547 ^b	0.30105	0.24 ^a , 0.3 ^b
InAs	0.60106	0.552 ^a 0.706 ^a	0.62384	0.480 ^b	0.30051	0.30 ^b
GaP	0.60295	0.501 ^a 0.688 ^a	0.62458	0.558 ^b	0.30147	0.24 ^b
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	0.60441 [*] 0.60271 ^{**}	-	0.62328 [*] 0.62394 ^{**}	-	0.3022 [*] 0.3014 ^{**}	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	0.60206 [*] 0.60196 ^{**}	-	0.62419 [*] 0.62423 ^{**}	-	0.3010 [*] 0.30098 ^{**}	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	0.60258 [*] 0.60168 ^{**}	-	0.62399 [*] 0.62434 ^{**}	-	0.3013 [*] 0.3008 ^{**}	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	0.60209 [*] 0.60181 ^{**}	-	0.62418 [*] 0.62429 ^{**}	-	0.3010 [*] 0.3009 ^{**}	-

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [21], ^b référence [23]

V.3.4.1. effet de désordre :

La variation des Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic sont schématisés respectivement dans les figures V.25, V.26 et V.27, a partir de ces courbes on peut noter que :

- Une croissance non linéaire du facteur d'isotropie A en fonction de la composition y avec la remarque de présence d'un effet de désordre compositionnel qui provoque l'augmentation de la valeur du facteur A, comme on peut noter que l'effet de désordre est assez important pour le cas d'alliage déposé sur les substrats GaAs et ZnSe que le substrat InP.
- Le paramètre de Kleinman ζ et le coefficient de Poisson σ diminues non linéairement en fonction de la concentration y de l'Arsenic. L'effet de désordre compositionnel est

important est doit être pris en considération, on note aussi que le substrat InP est moins influencé par l'effet de désordre.

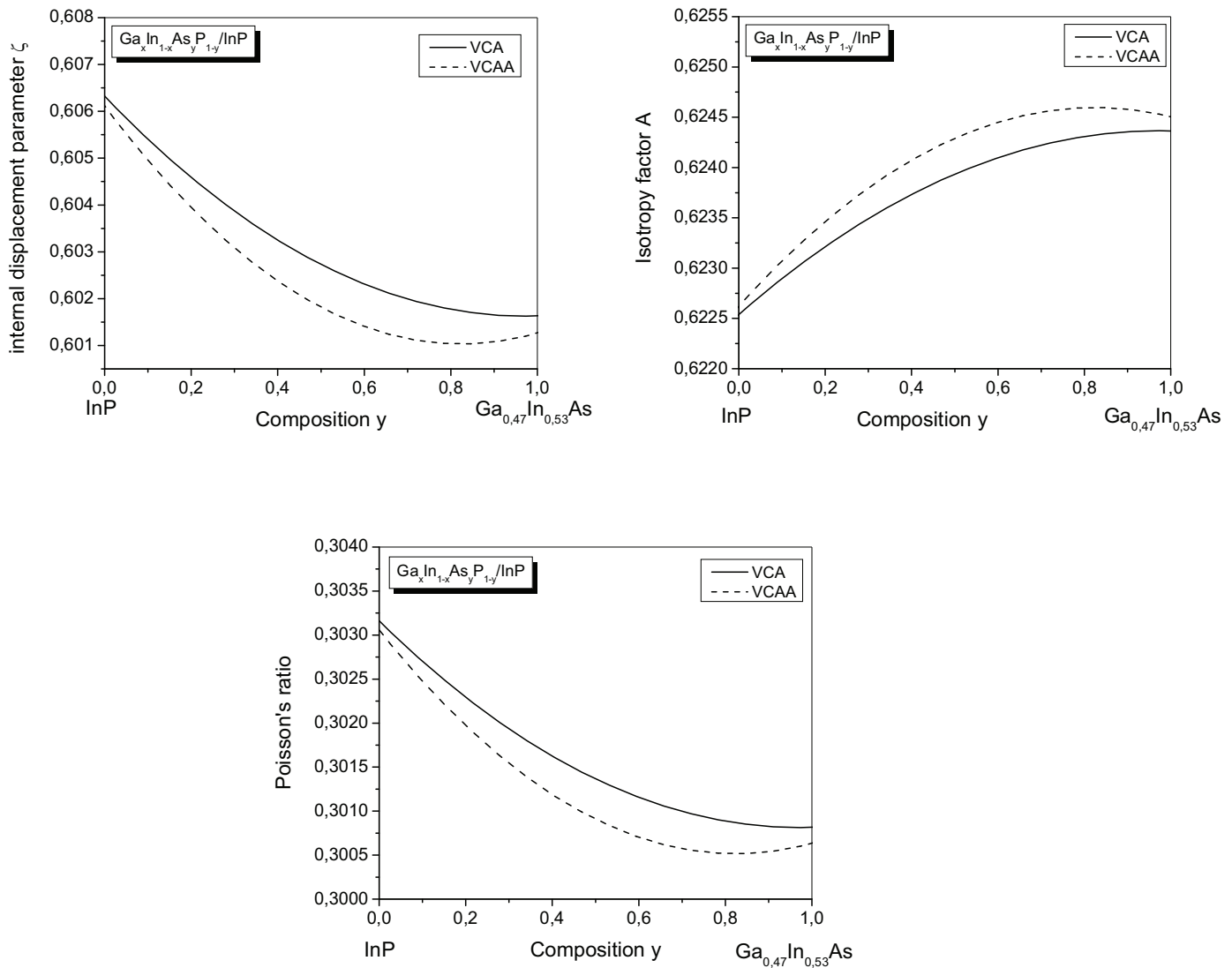


Figure V-25 : La variation du Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

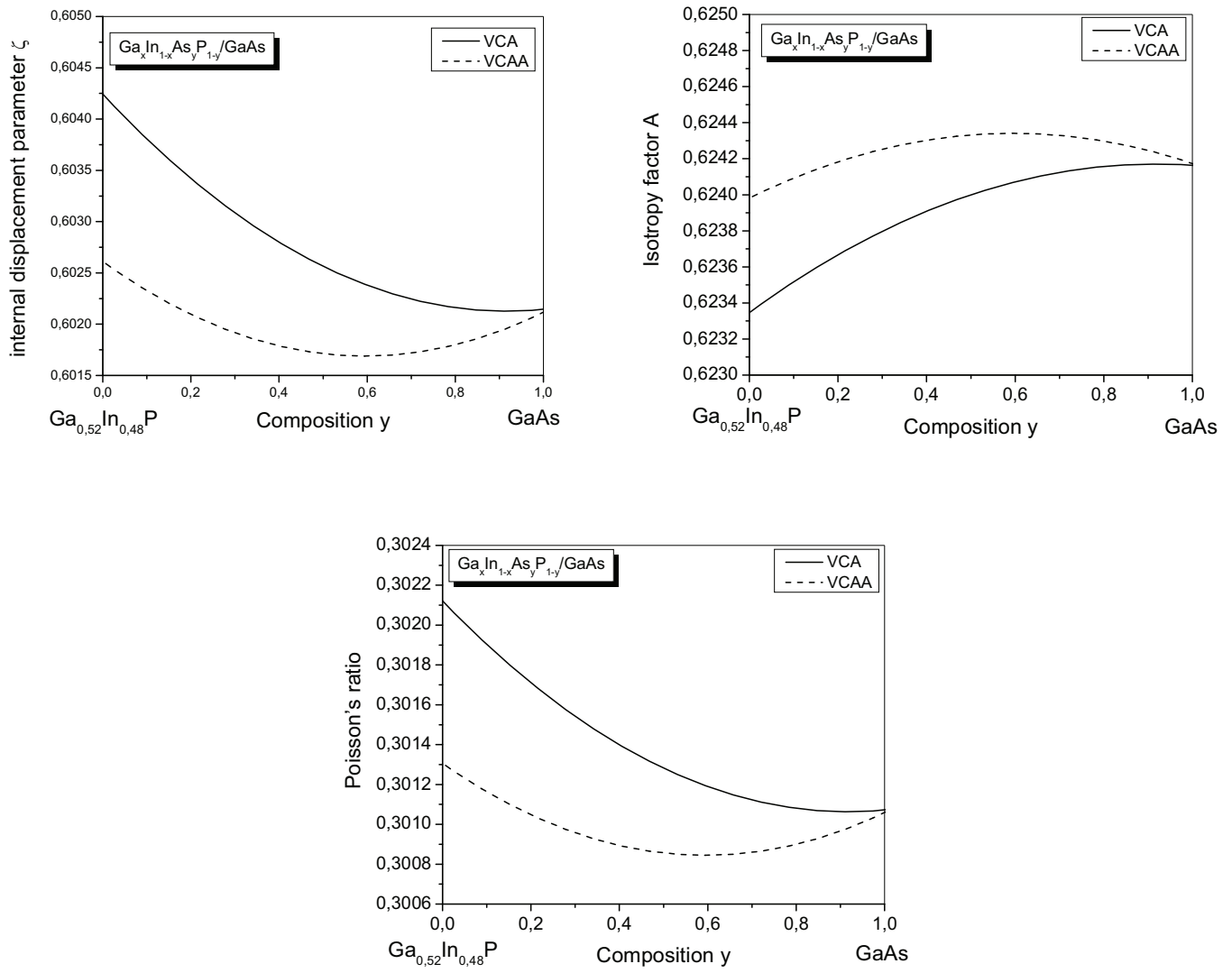


Figure V- 26 : La variation du Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire

$$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}.$$

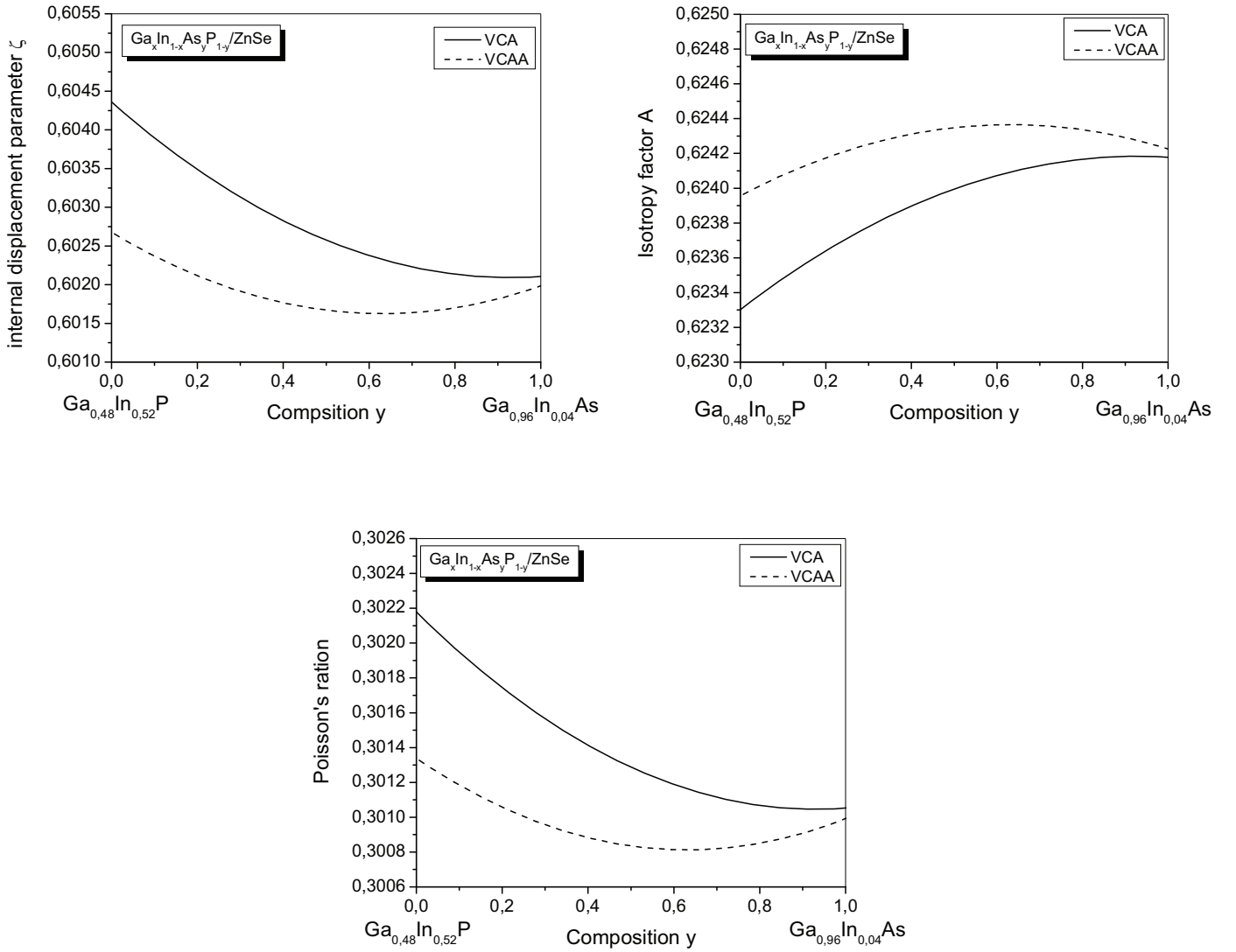


Figure V-27 : La variation du Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.3.4.2. Effet de substrat :

La figure V.28 représente une variation non linéaire du Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et du coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic avec la considération de l'effet de désordre compositionnel, de ces courbes on peut noter que :

- Pour le cas de coefficient d'isotropie A l'effet de substrat dans le cas où l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ est déposé sur GaAs et ZnSe à des concentrations inférieure à 0.5 est superposé d'où on peut dire qu'il n'y a pas d'effet de substrat. Lorsque la concentration est

supérieure à 0.5 les calculs sont faiblement influencés par les substrats GaAs et ZnSe. Les grandes valeurs de A sont obtenues lorsque l'alliage d'intérêt est déposé sur InP pour des grandes concentrations y.

- Pour le Paramètre de Kleinman ζ et le coefficient de Poisson σ l'effet de substrat sur les calculs effectués pour l'alliage déposé sur InP est plus important que pour les substrats GaAs et ZnSe à des concentrations $y < 0.53$ avec l'absence de l'effet des substrats GaAs et ZnSe. Pour le cas où $y > 0.53$ l'effet de substrats est faiblement remarqué sur les calculs pour le quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ et $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ qui représente des valeurs plus importante que celle calculé pour le substrat InP.

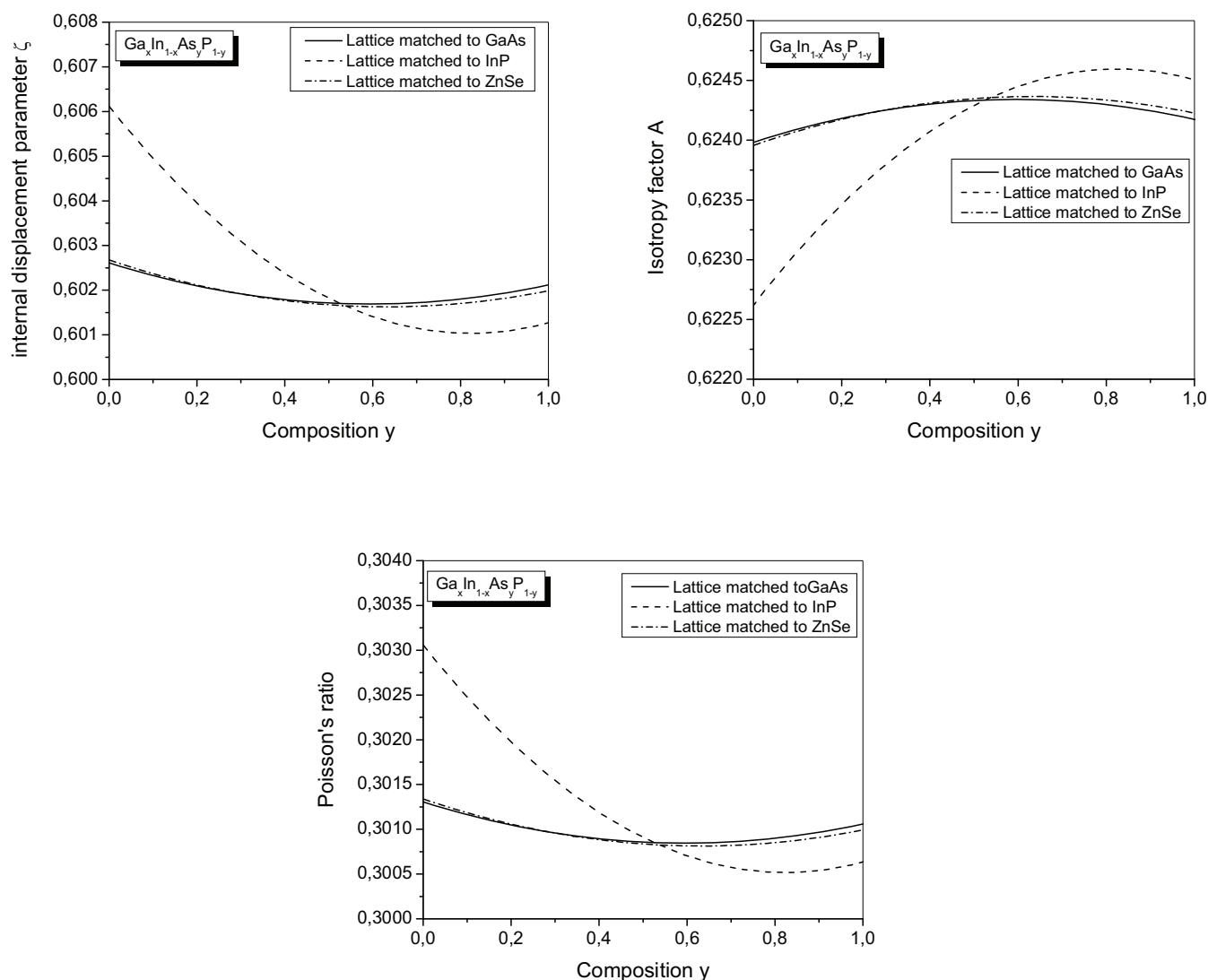


Figure V-28 : La variation du Paramètre de Kleinman ζ , facteur d'isotropie A et le coefficient de Poisson σ en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

IV.3.5. Les constantes de force α et β :

Les valeurs des constantes de force α et β pour l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe en fonction de la concentration y sont illustrées dans les tableaux V-24, V-25 et V-26 respectivement.

Tableau V-24 : Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$.

Constantes des forces en N/m				
composants	α		β	
	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	29.5693	41.095 ^a , 39.02 ^b	7.2433	6.25 ^a , 7.74 ^b
GaAs	42.9155	40.895, 42.04 ^b	10.6584	9.159 ^a , 7.15 ^b
InAs	34.4504	33.744 ^a , 35.52 ^b	8.5840	5.531 ^a , 6.49 ^b
GaP	47.4603	46.965 ^a , 48.00 ^b	11.7557	10.448 ^a , 8.91 ^b
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	38.1607 [*] 39.2024 ^{**}	-	9.4951 [*] 9.7691 ^{**}	-
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	35.6958 [*] 37.4174 ^{**}	-	8.8473 [*] 9.2996 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	37.8494 [*] 39.0629 ^{**}	-	9.4132 [*] 9.7324 ^{**}	-

* nos calculs sans désordre, ** nos calculs avec désordre.

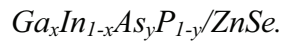
^a référence [3], ^b référence [29]

Tableau 25 : Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$.

Constantes des forces en N/m				
composants	α		β	
	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	29.5693	41.095 ^a , 39.02 ^b	7.2433	6.25 ^a , 7.74 ^b
GaAs	42.9155	40.895, 42.04 ^b	10.6584	9.159 ^a , 7.15 ^b
InAs	34.4504	33.744 ^a , 35.52 ^b	8.5840	5.531 ^a , 6.49 ^b
GaP	47.4603	46.965 ^a , 48.00 ^b	11.7557	10.448 ^a , 8.91 ^b
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	38.2578 [*] 41.6939 ^{**}	-	9.4364 [*] 10.3375 ^{**}	-
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	41.8544 [*] 43.8139 ^{**}	-	10.3797 [*] 10.8945 ^{**}	-
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	42.8519 [*] 43.3301 ^{**}	-	10.6417 [*] 10.7674 ^{**}	-

* nos calculs sans désordre, ** nos calculs avec désordre.

^a référence [3], ^b référence [29]

Tableau 26 : Les constantes de force α et β en (N/m) de l'alliage quaternaire

Constantes des forces en N/m				
composants	α		β	
	Cal	Autres	Cal	Autres
InP	29.5693	41.095 ^a , 39.02 ^b	7.2433	6.25 ^a , 7.74 ^b
GaAs	42.9155	40.895, 42.04 ^b	10.6584	9.159 ^a , 7.15 ^b
InAs	34.4504	33.744 ^a , 35.52 ^b	8.5840	5.531 ^a , 6.49 ^b
GaP	47.4603	46.965 ^a , 48.00 ^b	11.7557	10.448 ^a , 8.91 ^b
Ga _{0.48} In _{0.52} P	37.6333 [*]	-	9.2789 [*]	-
	41.1024 ^{**}		10.1885 ^{**}	
Ga _{0.96} In _{0.04} As	42.5701 [*]	-	10.5741 [*]	-
	42.7963 ^{**}		10.6335 ^{**}	
Ga _{0.23} In _{0.77} As _{0.5} P _{0.5}	41.3967 [*]	-	10.2658 [*]	-
	43.4603		10.8081 ^{**}	
Ga _{0.91} In _{0.09} As _{0.9} P _{0.1}	42.4847 [*]	-	10.5516 [*]	-
	43.1515 ^{**}		10.7268 ^{**}	

* nos calcule sans désordre, ** nos calcule avec désordre.

^a référence [3], ^b référence [29]

IV.3.5.1. Effet de désordre :

Les figures V-29, V-30 et V-31 illustrent la variation des constantes de force α et β en fonction de la fraction molaire y de l'Arsenic. La tendance des courbes de α et β est semblable à celle des constantes élastiques d'où on peut conclure de même que l'effet de désordre compositionnel est important et ne doit pas être négligé.

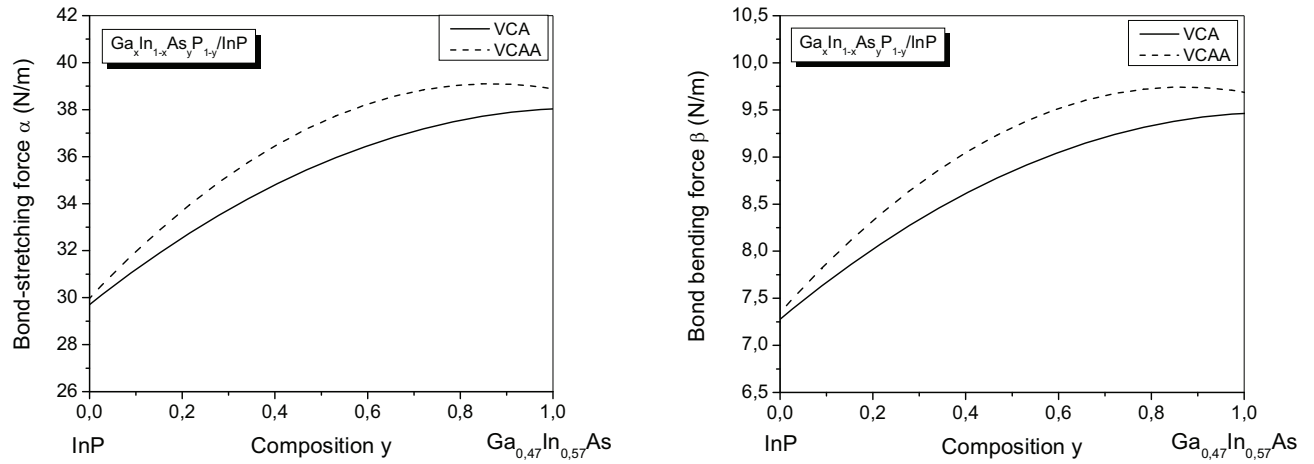


Figure V-29 : La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.

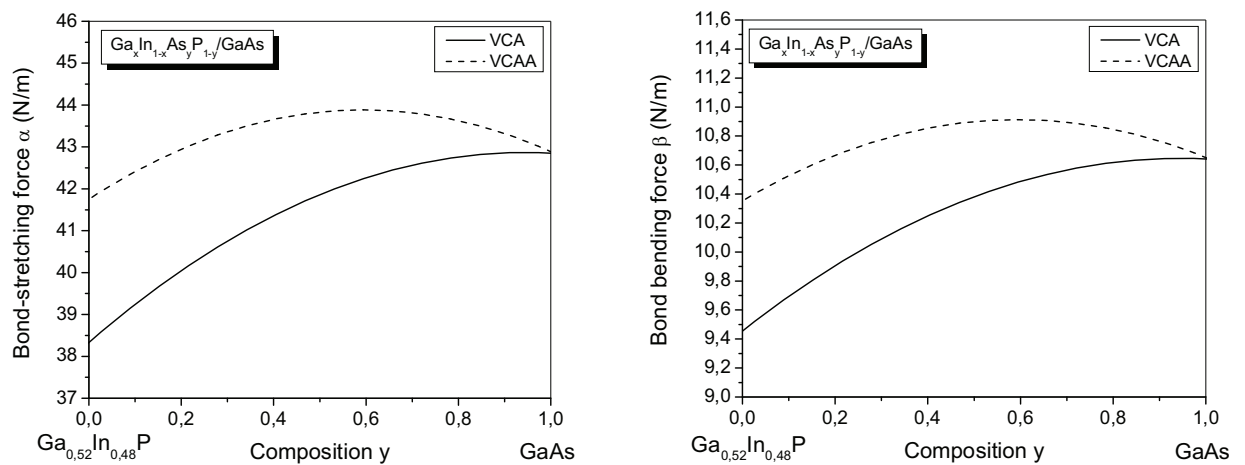


Figure V-30 : La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.

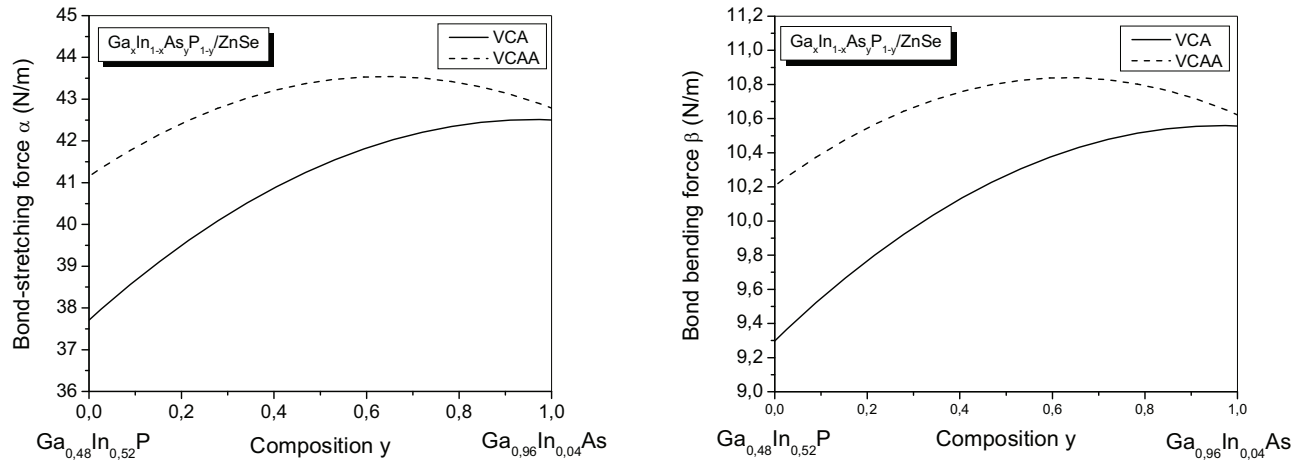


Figure V- 31 : La variation des constantes de force α et β de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ en fonction de la concentration y de l'Arsenic.

Effet de substrat :

La figure V.32 représente la variation des constantes de forces α et β en fonction de la concentration de l'Arsenic lorsque l'effet de désordre est pris en compte, les courbes de la figure V-32 présentent une variation non linéaire des constantes des forces quelque soit le substrat choisis pour les calculs. Les calculs effectués pour le quaternaire déposé sur les substrats GaAs et ZnSe sont plus importante que celle calculé pour le InP.

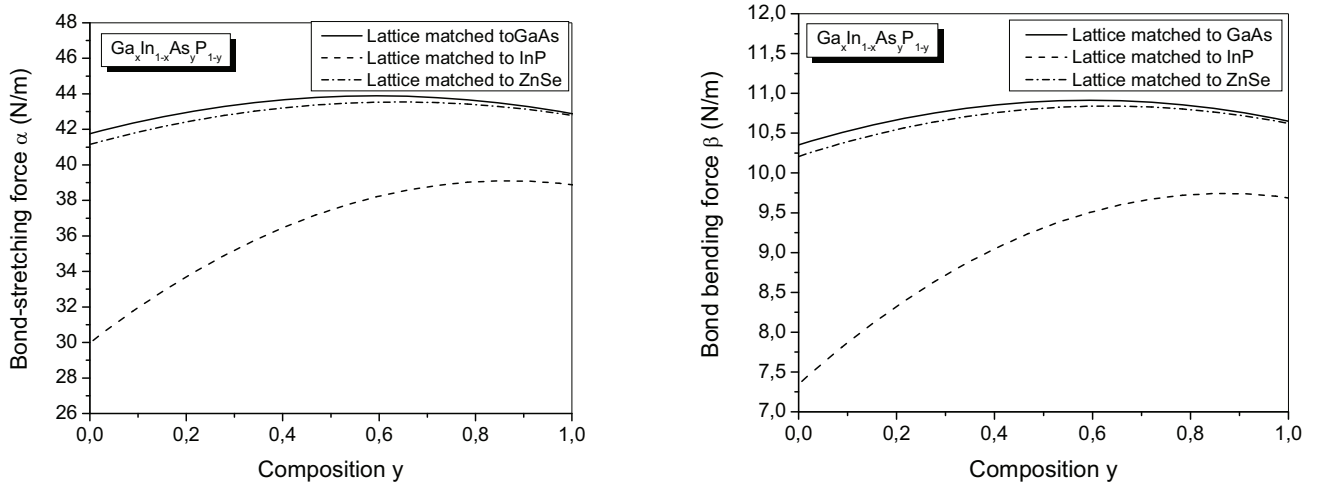


Figure V-32 : La variation des constantes de force α et β en fonction de la concentration y de l'Arsenic de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

V.4. Etude de dynamique de réseau :

V.4.1. La charge effective transversale :

La charge effective transversale représente un paramètre de base de caractérisation des propriétés diélectriques de matières solides. La charge effective est calculée par l'utilisation de la même relation reportée dans la référence [20] :

$$2e_T^* = \Delta Z + \frac{8\alpha_p}{1 + \alpha_p^2} \quad (V-28)$$

Où

$$\Delta Z = xZ_{Ga} + (1-x)Z_{In} - yZ_{As} - (1-y)Z_P \quad (V-29)$$

Et Z : est la valance.

Les valeurs calculé de e_T^* pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe sont présentés dans les tableaux (V-29, V-30 et V-31) avec les données disponibles pour la comparaison. On note que pour les éléments InP et GaAs, l'accord entre nos résultats de e_T^* et les données connus dans la littérature est de 1.65%, 0.79% des références [14] et [26] respectivement, tandis que pour le cas de InAs et GaP le décalage est plus grand, nos résultats expriment des prédictions pour les autres résultats ($0 < y < 1$).

Tableau V-26 : Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ pour des différentes compositions y .

Composants	e_T^*	
	Cal	autres
InP	2.6546	2.7 ^c , 2.4 ^d
GaAs	2.1429	2.16 ^f
InAs	1.8118	2.53 ^g , 1.57 ^g 1.94 ^h
GaP	2.3095	2.04 ^g , 2.27 ⁱ
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	1.9811 [*] 1.7953 ^{**}	2.38 ^j
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	2.2745 [*] 2.0857 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	2.0272 [*] 1.8238 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a reference [14], ^b reference [25], ^c reference [26]

^d reference [13], ^e reference [27], ^f reference [28]

Tableau V-27 : Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ pour des différentes compositions y .

Composants	e_T^*	
	Cal	autres
InP	2.6546	2.7 ^a , 2.4 ^b
GaAs	2.1429	2.16 ^c
InAs	1.8118	2.53 ^d , 1.57 ^d 1.94 ^e
GaP	2.3095	2.04 ^d , 2.27 ^f
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	2.4843 [*] 2.2550 [*]	
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	2.2414 [*] 2.0443 ^{**}	
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	2.1493 [*] 2.0994 ^{**}	

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a reference [14], ^b reference [25], ^c reference [26]

^d reference [13], ^e reference [27], ^f reference [28]

Tableau V-28 : Charge effective transversale e_T^* de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$ pour des différentes compositions y .

Composants	e_T^*	
	Cal	autres
InP	2.6546	2.7 ^a , 2.4 ^b
GaAs	2.1429	2.16 ^c
InAs	1.8118	2.53 ^d , 1.57 ^d 1.94 ^e
GaP	2.3095	2.04 ^d , 2.27 ^f
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	2.4965 [*] 2.2683 ^{**}	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	2.1327 [*] 2.1087 ^{**}	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	2.2436 [*] 2.0322 ^{**}	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	2.1328 [*] 2.1088 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^a reference [14], ^b reference [25], ^c reference [26]

^d reference [13], ^e reference [27], ^f reference [28]

V.4.1.1. Effet de désordre :

Les variations de la charge effective transversal en fonction de la concentration y de l'Arsenic sont exposés dans la figure (V-33), où la charge effective transversal diminue de façon monotone avec l'augmentation de concentration y ($0 < y < 1$). Une dépendance non linéaire est obtenue, décrite par les relations suivantes :

Pour le substrat InP

$$e_T^* = 2.661 - 0.860y + 0.173y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-30})$$

$$e_T^* = 2.667 - 1.438y + 0.556y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-31})$$

Pour le substrat GaAs

$$e_T^* = 2.487 - 0.635y + 0.288y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-32})$$

$$e_T^* = 2.555 - 0.731y + 0.618y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-33})$$

Pour le substrat ZnSe

$$e_T^* = 2.499 - 0.653y + 0.284y^2 \quad (\text{VCA}) \quad (\text{V-34})$$

$$e_T^* = 2.269 - 0.785y + 0.625y^2 \quad (\text{VCAA}) \quad (\text{V-35})$$

A partir de ces expressions, on note que la valeur de bowing obtenue lorsque l'effet de désordre compositionnel est pris en considération sont différentes est plus importantes a celles obtenues pour le cas d'absences de l'effet de désordre se qui signifie que l'effet de désordre on e_T^* pour l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différentes substrats (GaAs, InP et ZnSe) est important est ne peut être négligé dans les calculs.

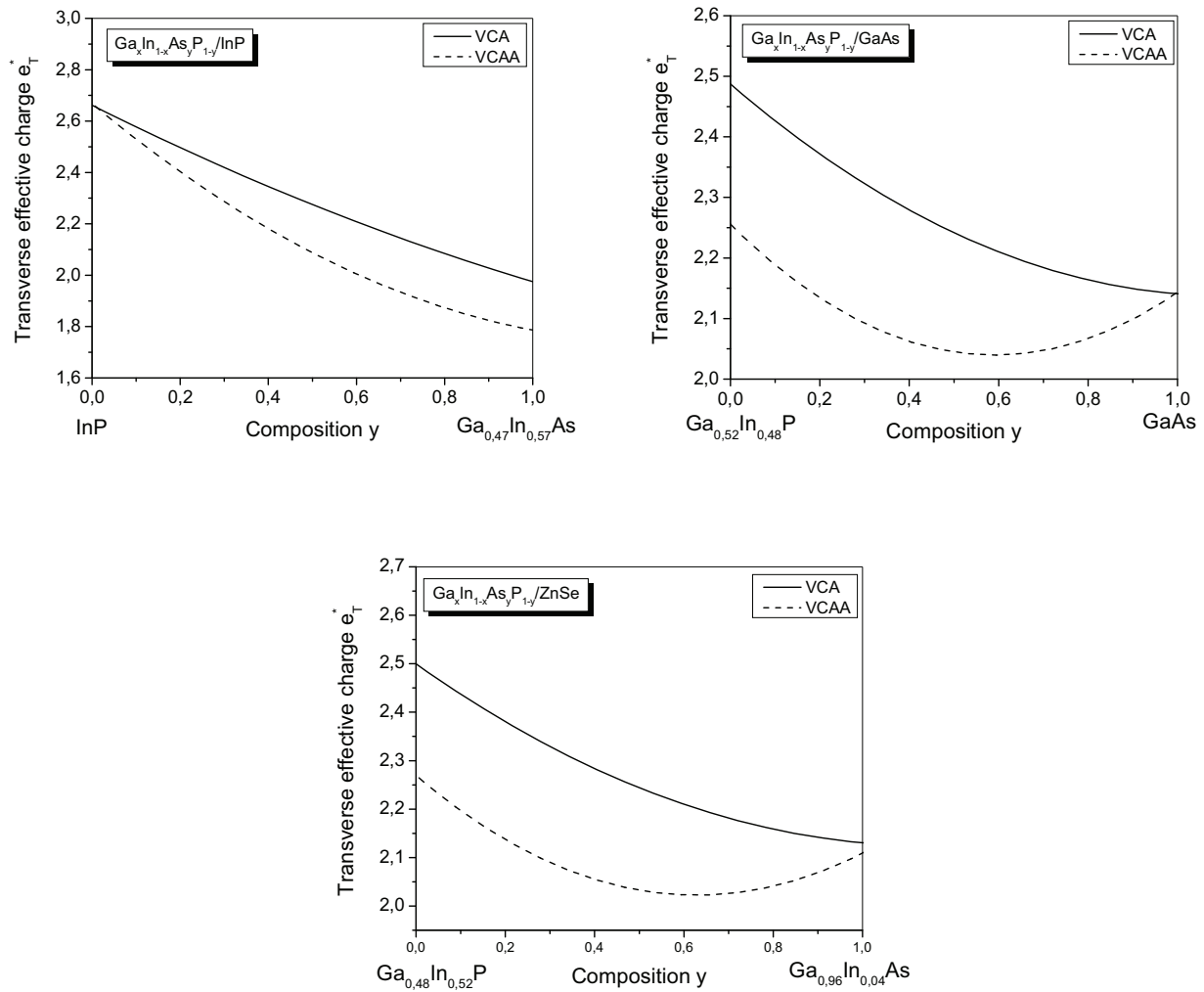


Figure V- 33 : La variation de la charge effective transversale e_T^* en fonction de la composition y de l'alliage semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$: sans désordre (—) et avec désordre (- - -).

V.4.1.2. Effet de substrat :

La figure (V-34) représente le tracer de la charge effective transversal de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe en fonction de la fraction molaire y de l'Arsenic. Le tracé de e_T^* dans le cas où l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ est déposé sur GaAs et ZnSe à des concentrations inférieure à 0.5 est superposé d'où on peut dire qu'il n'y a pas d'effet de substrat. Lorsque la concentration est supérieure à 0.5 les calculs sont faiblement influencé par les substrats GaAs et ZnSe. Dans le cas des valeurs obtenues de e_T^* pour le quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ sont plus importantes que les valeurs de e_T^* dans le cas des substrats GaAs et ZnSe à des concentrations d'Arsenic ($y \leq 0.55$) et ($y \leq 0.58$) respectivement. Cependant, pour des concentrations supérieures au 0.55 et 0.58 pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ et $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{ZnSe}$ respectivement deviennent plus importante que celle calculée dans le cas du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

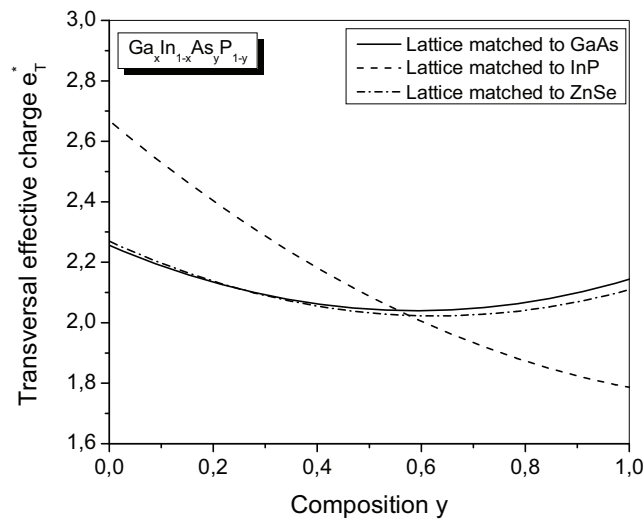


Figure V- 34 : La variation de la charge effective transversale e_T^* en fonction de la composition y de l'alliage semi-conducteur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

V.4.2. Les fréquences des modes optiques :

La compréhension de vibration du réseau est importante pour de nombreuses raisons, il permet de déterminer la propagation du son à travers le cristal ainsi que ses propriétés thermiques. Il a un effet sur la propagation d'électrons et même affecte l'absorption et l'émission de lumière des cristaux [30,31]. Suite à la procédure utilisée par Bouarissa et al [32], la fréquence longitudinale

optique et la fréquence transversal sont calculés à partir de la combinaison de la relation de Lyddane-Sachs-Teller [33]

$$\frac{\omega_{TO}^2}{\omega_{LO}^2} = \frac{\epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \quad (V-36)$$

Avec l'utilisation de l'expression suivante [34] :

$$\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2 = \frac{4\pi e_T^{*2} e^2}{M\Omega_0 \epsilon_{\infty}} \quad (V-37)$$

Où ϵ_{∞} , ϵ_0 , e_T^* sont respectivement la constante diélectrique à haute fréquence, la constante diélectrique statique et la charge effective transversal, avec Ω_0 est le volume occupé par un atome et M est la masse réduite.

V.4.2.1. Les fréquences optiques longitudinale :

Nos résultats concernant la fréquence optique longitudinale ω_{LO} sont présentés dans les tableaux (V-30, V-31 et V-32) pour l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement, également les données disponibles dans la littérature sont présentés. En général, l'accord entre nos résultats et ceux rapportés dans la référence [16] pour InP, GaAs, InAs et GaP sont raisonnable. En absence des données dans la littérature concernant le quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différentes substrats dans le plage ($0 < y < 1$), au meilleur de nos connaissances, nos résultats peuvent servir comme référence.

Tableau V-30 : La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ pour quelques compositions.

Composant	$\omega_{LO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	6.9456	6.5784	7.5544	7.0165	6.5 ^a , 7.1 ^b
GaAs	5.9704	5.9376	5.9287	6.2585	5.5 ^a
InAs	5.7710	5.6751	5.7143	5.7034	4.5 ^a
GaP	6.9501	6.9196	6.9295	6.9007	7.6 ^a
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	8.3977 [*] 10.0973 ^{**}	8.2089 [*] 8.8987 ^{**}	8.5768 [*] 9.3112 ^{**}	8.0389 [*] 8.7971 ^{**}	-
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	5.0915 [*] 5.6727 ^{**}	7.8785 [*] 8.3455 ^{**}	8.3987 [*] 8.7407 ^{**}	7.7995 [*] 8.1533 ^{**}	-
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	9.0325 [*] 10.0731 ^{**}	8.2709 [*] 8.9616 ^{**}	8.6285 [*] 9.3371 ^{**}	8.0599 [*] 8.7971 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre. ^(a) Réf. [16], ^(b) Réf [34]

Tableau V-31 : La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ pour des différentes compositions.

Composant	$\omega_{LO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	6.9456	6.5784	7.5544	7.0165	6.5 ^a , 7.1 ^a
GaAs	5.9704	5.9376	5.9287	6.2585	5.5 ^a
InAs	5.7710	5.6751	5.7143	5.7034	4.5 ^a
GaP	6.9501	6.9196	6.9295	6.9007	7.6 ^a
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	5.4565 [*] 6.2230 ^{**}	5.4351 [*] 6.1952 ^{**}	5.4367 [*] 6.1924 ^{**}	6.0672 [*] 6.6377 ^{**}	-
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	6.0419 [*] 6.7813 ^{**}	6.0146 [*] 6.7468 ^{**}	6.0111 [*] 6.7382 ^{**}	6.4302 [*]	-
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	6.0485 [*] 6.2272 ^{**}	6.0171 [*] 6.1932 ^{**}	6.0085 [*] 6.1839 [*]	6.3471 [*] 6.4938 ^{**}	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre. ^(a)Réf. [16], ^(b) Réf [34]

Tableau V-32 : La fréquence du mode longitudinal optique ω_{LO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$ pour des différentes compositions.

Composant	$\omega_{LO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	6.9456	6.5784	7.5544	7.0165	6.5 ^a , 7.1 ^b
GaAs	5.9704	5.9376	5.9287	6.2585	5.5 ^a
InAs	5.7710	5.6751	5.7143	5.7034	4.5 ^a
GaP	6.9501	6.9196	6.9295	6.9007	7.6 ^a
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	5.3567* 6.1064**	5.3358* 6.0790**	5.3362* 6.0752**	5.9681* 6.5237**	-
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	5.9539* 6.0388**	5.9203* 6.0041**	5.9113* 5.9949**	6.2330* 6.3033**	-
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	5.9742* 6.7640**	5.9469* 6.7286**	5.9426* 6.7193**	6.3581* 7.0031**	-
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	6.0215* 6.2854**	5.9895* 6.2496**	5.9807* 6.2401**	6.3119* 6.5309**	-

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre. ^(a) Réf. [16], ^(b) Réf [34]

V.4.2.1.1. Effet de désordre

La variation de la fréquence LO des phonons dans le Système quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé à InP, GaAs et ZnSe en fonction de la composition y avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel sont représentée respectivement sur les Figures (V.35, V.36 et V.37). L'ajustement polynomial quadratique de nos résultats a donné les expressions analytiques suivantes :

Pour le substrat InP

$$\omega_{LO} = 4.1021 + 2.1923y - 0.5428y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (38a)$$

$$\omega_{LO} = 4.07228 + 3.7395y - 1.2159y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (38b)$$

$$\omega_{LO} = 4.1199 + 2.2106y - 0.528y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (39a)$$

$$\omega_{LO} = 4.0891 + 3.7913y - 1.212y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (39b)$$

$$\omega_{LO} = 6.997 + 2.152y - 1.087y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (40a)$$

$$\omega_{LO} = 6.959 + 2.905y - 0.989y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (40b)$$

$$\omega_{LO} = 6.997 + 2.152y - 1.087y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (41a)$$

$$\omega_{LO} = 6.959 + 2.905y - 0.989y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad \text{b)}$$

Pour le substrat GaAs

$$\omega_{LO} = 5.4204 + 1.8431y - 1.3131y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (42a)$$

$$\omega_{LO} = 6.1853 + 2.4655y - 2.7196y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (42b)$$

$$\omega_{LO} = 5.442 + 1.8549y - 1.3139y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (43a)$$

$$\omega_{LO} = 6.2129 + 2.4878y - 2.7367y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (43b)$$

$$\omega_{LO} = 5.395 + 1.796y - 1.302y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (44a)$$

$$\omega_{LO} = 6.625 + 1.962y - 2.333y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (44b)$$

$$\omega_{LO} = 10.332 + 1.544y - 2.524y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (45a)$$

$$\omega_{LO} = 10.896 + 1.818y - 3.387y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (45b)$$

Pour le substrat ZnSe

$$\omega_{LO} = 5.3204 + 1.8896y - 1.2759y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (46a)$$

$$\omega_{LO} = 6.0627 + 2.6877y - 2.7467y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (46b)$$

$$\omega_{LO} = 5.442 + 1.8549y - 1.3139y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (47a)$$

$$\omega_{LO} = 6.2129 + 2.4878y - 2.7367y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (47b)$$

$$\omega_{LO} = 5.953 + 1.324y - 1.030y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (48a)$$

$$\omega_{LO} = 6.505 + 2.157y - 2.356y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (48b)$$

$$\omega_{LO} = 10.046 + 1.658y - 2.453y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (50a)$$

$$\omega_{LO} = 10.586 + 2.118y - 3.406y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (50b)$$

Nous observons une forte non-linéarité de la variation de ω_{LO} par rapport à y dans les deux cas, montrant ainsi qu'un fort bowing des phonons de fréquence déterminé par les équations avec et sans effet de désordre. D'autre part, la différence entre les deux courbes tracées sur la figure (V.35, V.36 et V.37) est clair indiquant ainsi que l'effet de désordre sur la composition ω_{LO} dans $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les trois substrats est important et doit être pris en considération dans les calculs.

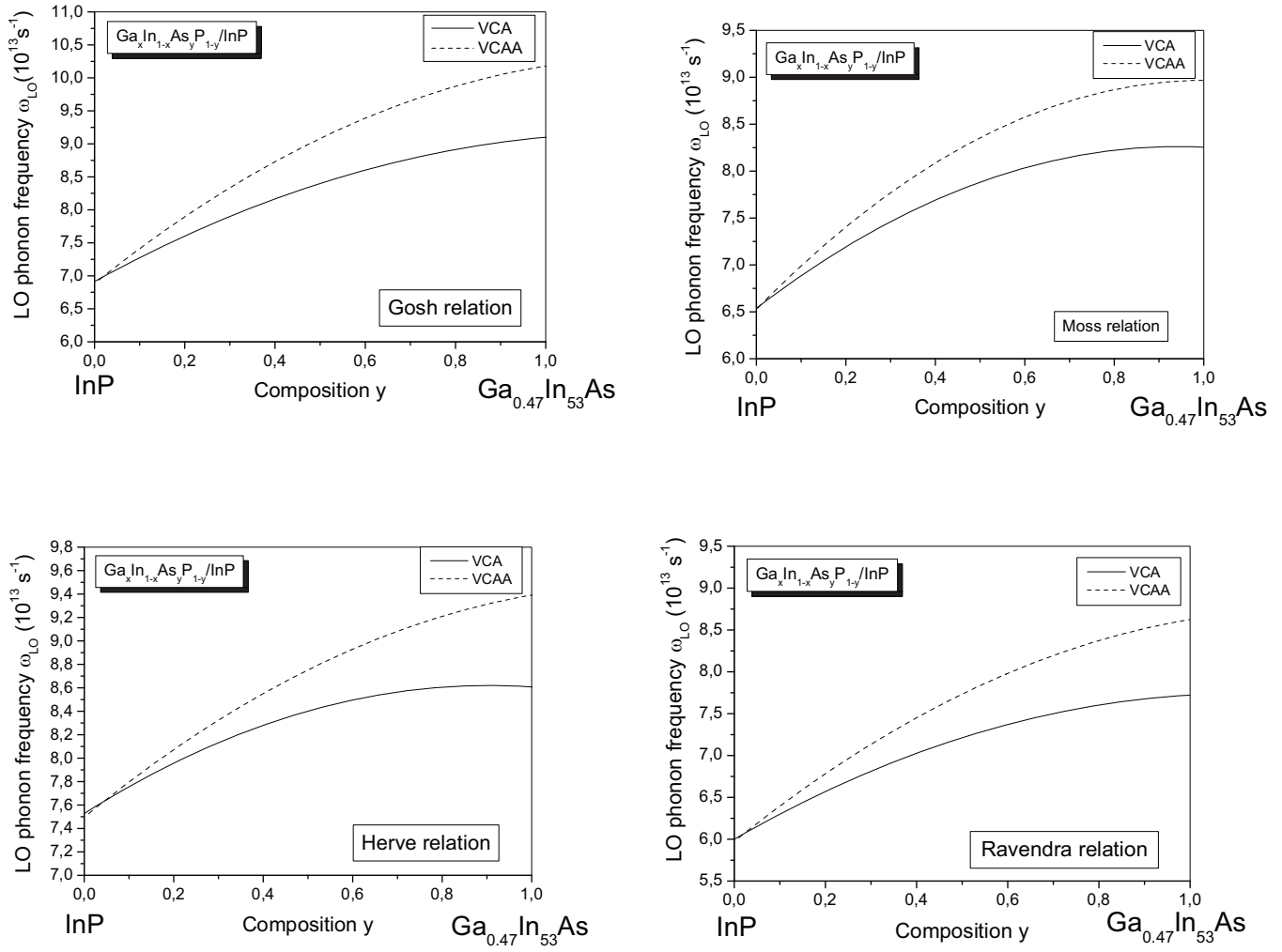


Figure V- 35 : Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

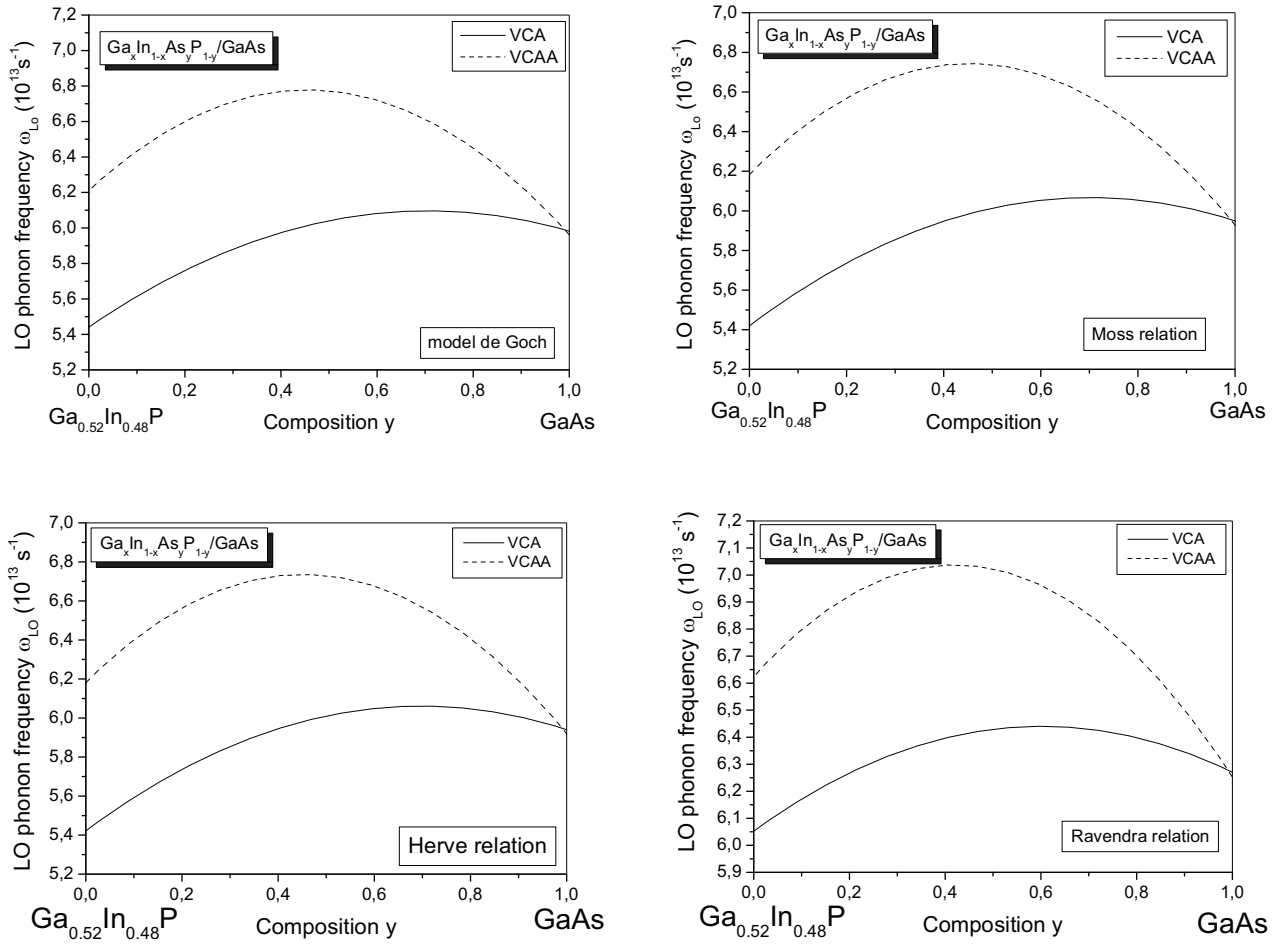


Figure V-36 : Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.

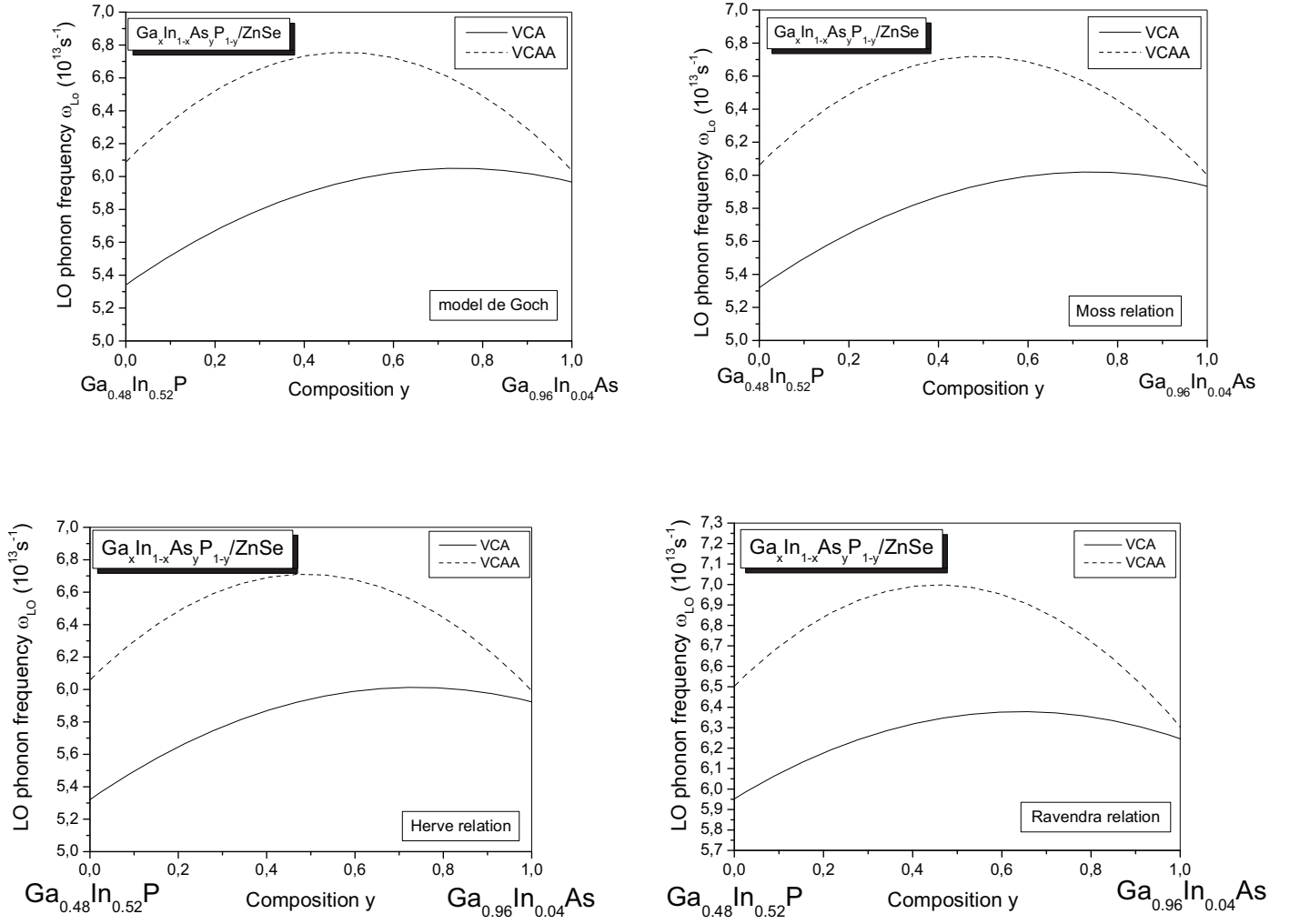


Figure V- 37 : Variation des fréquences optiques longitudinale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.4.2.1.1. Effet de substrat :

Dans la Figure V.38 nous affichons ω_{LO} en fonction de y pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur différents substrats. Les courbes sont tracées en tenant compte de l'effet de désordre de la composition y . Une inspection de la figure montre que le comportement des ω_{LO} en fonction de y est non linéaire pour toutes les relations utilisés dans les calculs. L'effet de substrat à être significative dans les grandes compositions y mais faible à basse compositions y . Les grandes valeurs de ω_{LO} peuvent être obtenus pour des grandes compositions y lorsque l'alliage d'intérêt est déposé sur InP.

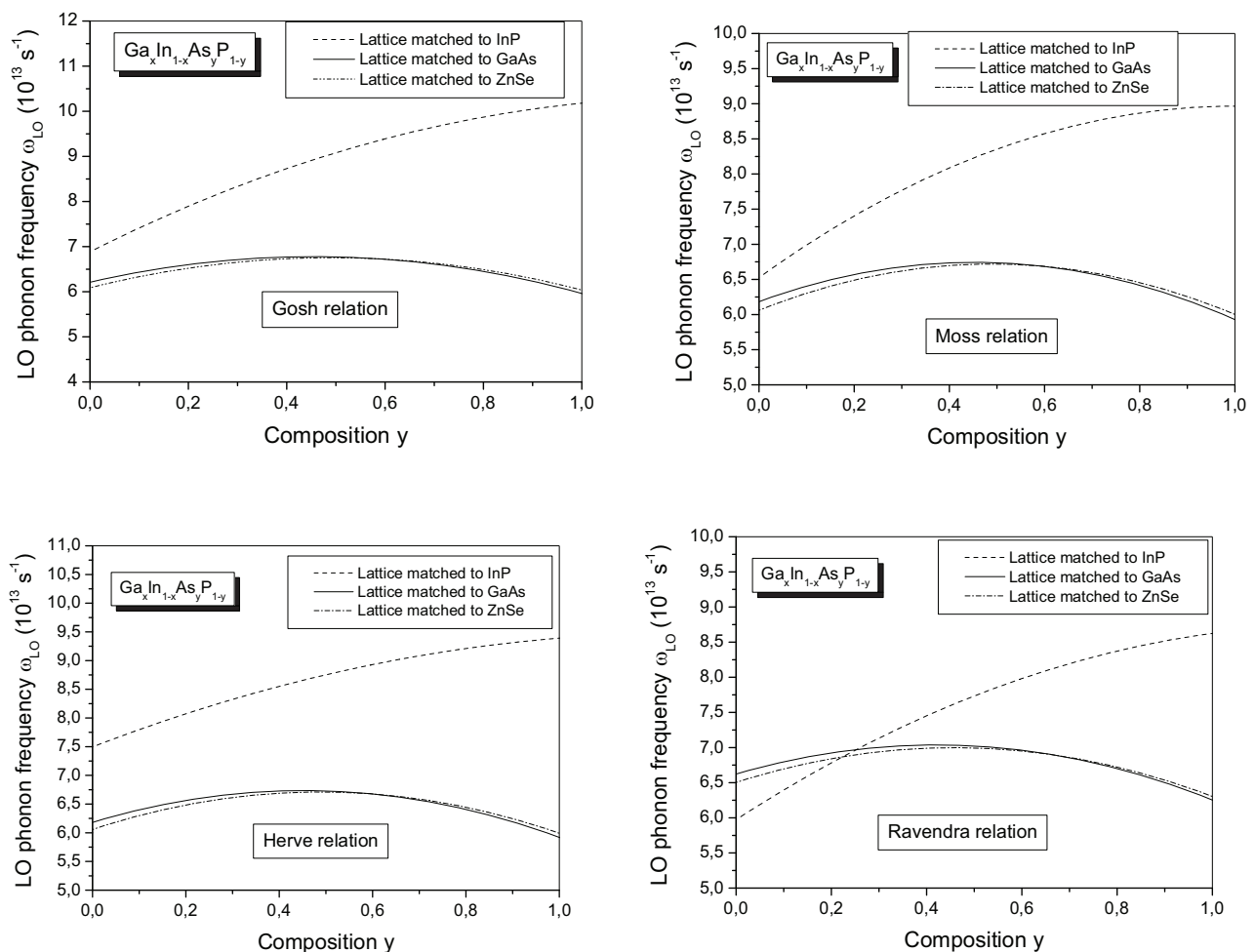


Figure V-38 : Variation des fréquences optiques transversale ω_{LO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

V.4.2.2. Les fréquences optiques transversale

Nos résultats concernant la fréquence optique transversale ω_{TO} sont présentés dans les tableaux (V-33, V-34 et V-35) pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe respectivement, avec les données disponibles dans la littérature pour comparaison. Nos résultats pour InP, GaAs sont en bon accord avec l'expérience. En absence des données dans la littérature concernant le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur différents substrats dans le plage ($0 < y < 1$), au meilleur de nos connaissances, nos résultats peuvent servir comme référence.

Tableau V-33 : La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP$ pour des différentes compositions.

Composant	$\omega_{TO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	5.5260	5.2211	6.4416	5.9703	5.7 ^a , 6.25 ^b
GaAs	5.5710	5.5358	5.5263	5.8788	5.1 ^a
InAs	5.5914	5.4924	5.5328	5.5215	4.1 ^a
GaP	6.3025	6.2689	6.2798	6.2481	6.9 ^a
$Ga_{0.47}In_{0.53}As$	7.6453 [*]	7.8153 [*]	8.2006 [*]	7.6827 [*]	
	9.8006 ^{**}	8.6314 ^{**}	9.0476 ^{**}	8.5459 ^{**}	
$Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.5}P_{0.5}$	7.6453 [*]	7.1636 [*]	7.7503 [*]	7.1896 [*]	-
	8.5267 ^{**}	7.8388 ^{**}	8.2656 ^{**}	7.7051 ^{**}	
$Ga_{0.42}In_{0.58}As_{0.9}P_{0.1}$	8.5598 [*]	7.8309 [*]	8.2122 [*]	7.6666 [*]	-
	9.7537 ^{**}	8.6714 ^{**}	9.0531 ^{**}	8.5271 ^{**}	

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre, ^a Réf. [16], ^(b) Réf [34]

Tableau V-34 : La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/GaAs$ pour des différentes compositions.

Composant	$\omega_{TO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	5.5260	5.2211	6.4416	5.9703	5.7 ^a , 6.25 ^b
GaAs	5.5710	5.5358	5.5263	5.8788	5.1 ^a
InAs	5.5914	5.4924	5.5328	5.5215	4.1 ^a
GaP	6.3025	6.2689	6.2798	6.2481	6.9 ^a
$Ga_{0.52}In_{0.48}P$	4.7126 [*]	4.6878 [*]	4.6897 [*]	5.4080 [*]	
	5.7003 ^{**}	5.6699 ^{**}	5.6669 ^{**}	6.1504 ^{**}	
$Ga_{0.75}In_{0.25}As_{0.5}P_{0.5}$	5.5484 [*]	5.5186 [*]	5.5149 [*]	5.9688 [*]	
	6.4209 ^{**}	6.3843 ^{**}	6.3754 [*]	6.6848 ^{**}	
$Ga_{0.95}In_{0.05}As_{0.9}P_{0.1}$	5.6395 [*]	5.6058 [*]	5.5966 [*]	5.9586 [*]	
	5.8495 ^{**}	5.8134 ^{**}	5.8035 ^{**}	6.1326 ^{**}	

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre, ^(a) Réf. [16], ^(b) Réf [34]

Tableau V-35 : La fréquence du mode transversal optique ω_{TO} calculé par les différentes relations de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$ pour des différentes compositions.

Composant	$\omega_{TO} (10^{13} s^{-1})$				
	Ghosh	Moss	Herve	Ravendra	Autre
InP	5.5260	5.2211	6.4416	5.9703	5.7 ^a , 6.25 ^b
GaAs	5.5710	5.5358	5.5263	5.8788	5.1 ^a
InAs	5.5914	5.4924	5.5328	5.5215	4.1 ^a
GaP	6.3025	6.2689	6.2798	6.2481	6.9 ^a
$Ga_{0.48}In_{0.52}P$	4.6055 [*]	4.5812 [*]	4.5817 [*]	5.3043 [*]	-
	5.5777 ^{**}	5.5477 ^{**}	5.5435 ^{**}	6.0317 ^{**}	
$Ga_{0.96}In_{0.04}As$	5.5638 [*]	5.5279 [*]	5.5184 [*]	5.8616 [*]	-
	5.6635 ^{**}	5.6265 ^{**}	5.6167 ^{**}	5.9448 ^{**}	
$Ga_{0.23}In_{0.77}As_{0.5}P_{0.5}$	5.4832 [*]	5.4535 [*]	5.4488 [*]	5.8992 [*]	-
	6.4137 ^{**}	6.3764 ^{**}	6.3666 ^{**}	6.6653 ^{**}	
$Ga_{0.91}In_{0.09}As_{0.9}P_{0.1}$	5.6207 [*]	5.5864 [*]	5.5769 [*]	5.9308 [*]	-
	5.9288 ^{**}	5.8909 ^{**}	5.8807 ^{**}	6.1885 ^{**}	

*Nos calculs sans désordre, **Nos calculs avec désordre

^(a) Réf. [16], ^(b) Réf [34]

V.3.2.1. Effet de désordre :

Dans les Figures (V.39, V.40 et V.41) nous affichons la fréquence de phonons ω_{TO} pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe contre la composition y avec et sans tenir compte de l'effet de désordre compositionnel. L'ajustement polynomial quadratique de nos calculs a donné les relations suivantes,

Pour le substrat InP

$$\omega_{TO} = 3.2583 + 3.1681y - 0.9548y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (51a)$$

$$\omega_{TO} = 3.2417 + 5.0832y - 1.9401y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (51b)$$

$$\omega_{TO} = 3.2806 + 3.1825y - 0.938y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (52a)$$

$$\omega_{TO} = 3.26301 + 5.1305y - 1.934y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (52b)$$

$$\omega_{TO} = 5.949 + 3.208y - 1.452y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (53a)$$

$$\omega_{TO} = 5.924 + 4.479y - 1.791y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (53b)$$

$$\omega_{TO} = 5.949 + 3.208y - 1.452y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (54a)$$

$$\omega_{TO} = 5.924 + 4.479y - 1.791y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (54b)$$

Pour le substrat GaAs

$$\omega_{TO} = 4.677 + 2.4955y - 1.6273y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (55a)$$

$$\omega_{TO} = 5.6643 + 2.9864y - 3.1242y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (55b)$$

$$\omega_{TO} = 4.70202 + 2.5045y - 1.6264y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (56a)$$

$$\omega_{TO} = 5.6945 + 3.0065y - 3.1392y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (56b)$$

$$\omega_{TO} = 9.211 + 2.471y - 2899y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (57a)$$

$$\omega_{TO} = 10.102 + 2.609y - 3.957y^2 \quad (\text{VCAA Herve}) \quad (57b)$$

$$\omega_{TO} = 5.395 + 1.797y - 1.302y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (58a)$$

$$\omega_{TO} = 6.141 + 2.411y - 2.679y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (58b)$$

Pour le substrat ZnSe

$$\omega_{TO} = 4.5699 + 2.5642y - 1.5957y^2 \quad (\text{VCA Moss}) \quad (59a)$$

$$\omega_{TO} = 5.5363 + 3.2421y - 3.1556y^2 \quad (\text{VCAA Moss}) \quad (59b)$$

$$\omega_{TO} = 4.5944 + 2.5737y - 1.5941y^2 \quad (\text{VCA Ghosh}) \quad (60a)$$

$$\omega_{TO} = 5.5661 + 3.2648y - 3.1707y^2 \quad (\text{VCAA Ghosh}) \quad (60b)$$

$$\omega_{TO} = 8.929 + 2.596y - 2.828y^2 \quad (\text{VCA Herve}) \quad (61a)$$

$$\omega_{TO} = 9.793 + 2.949y - 3.979y^2 \quad (\text{VCAA Heve}) \quad (61b)$$

$$\omega_{TO} = 5.291 + 1.848y - 1.265y^2 \quad (\text{VCA Ravindra}) \quad (62a)$$

$$\omega_{TO} = 6.016 + 2.636y - 2.706y^2 \quad (\text{VCAA Ravindra}) \quad (62b)$$

De même qu'avec ω_{LO} , nous observons un fort comportement non-linéaire de ω_{TO} contre y . Nous notons également que l'effet de désordre sur ω_{TO} dans $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur InP, GaAs et ZnSe est important et doit être inclus dans les calculs.

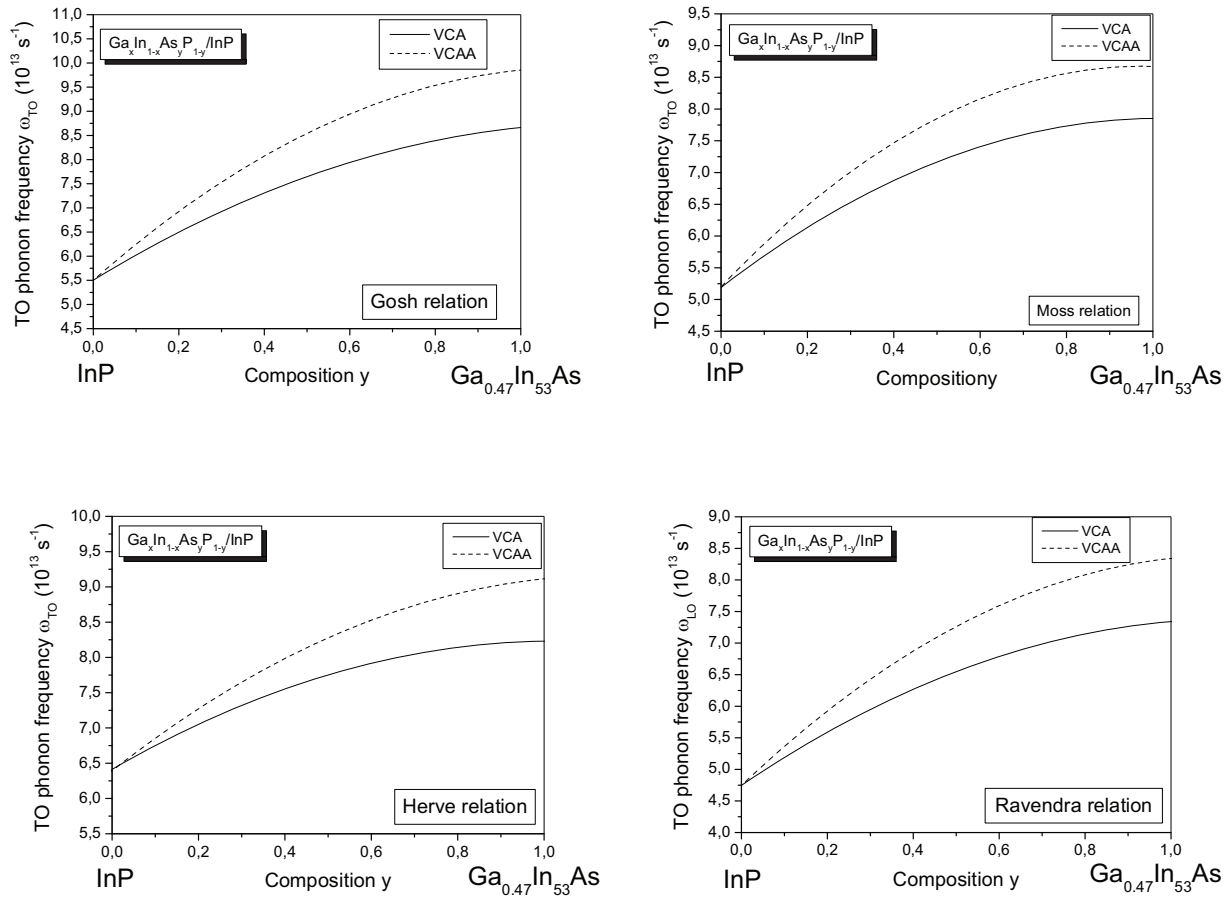


Figure V-39 : Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$.

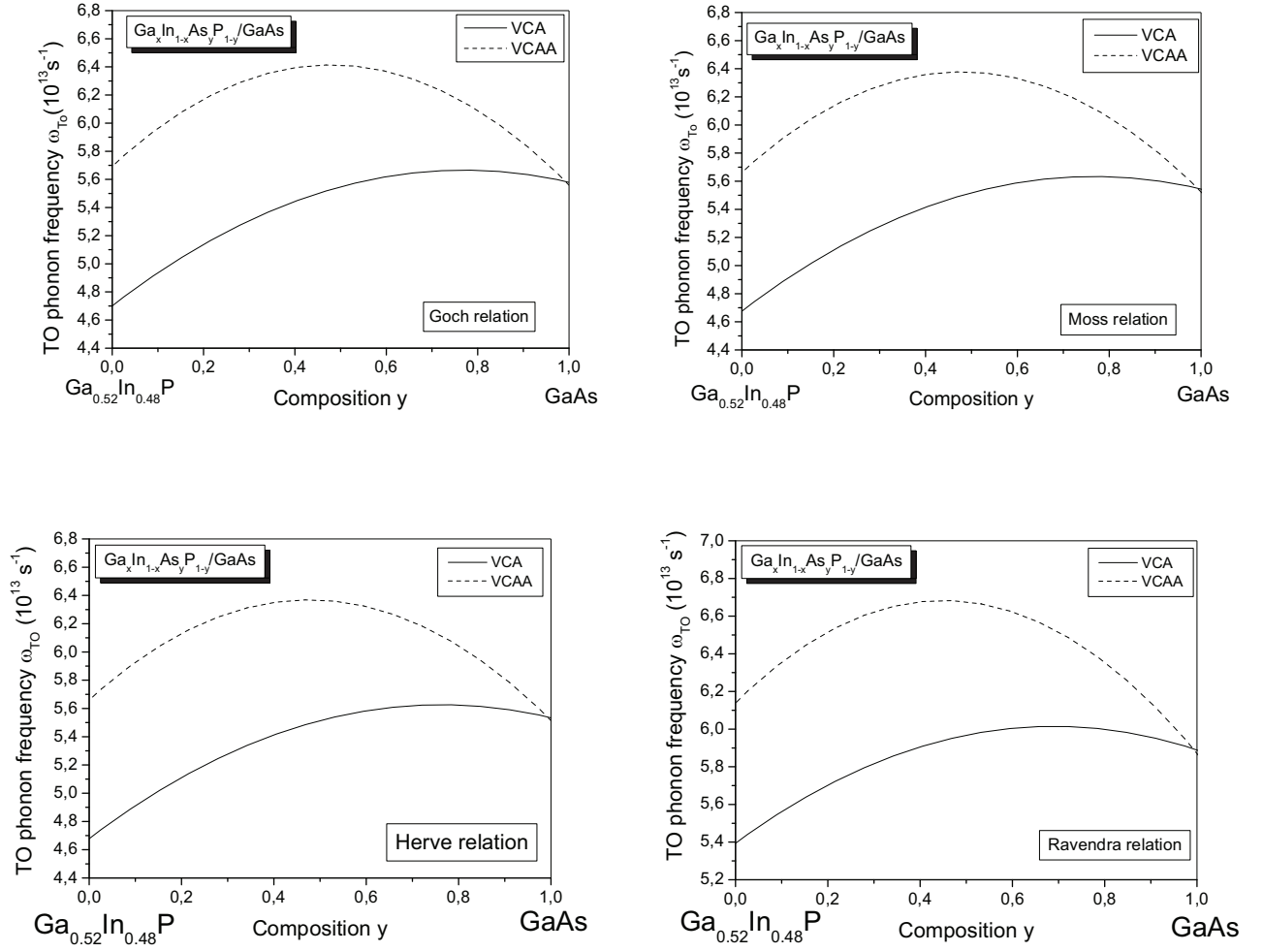


Figure V-40 : Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$.

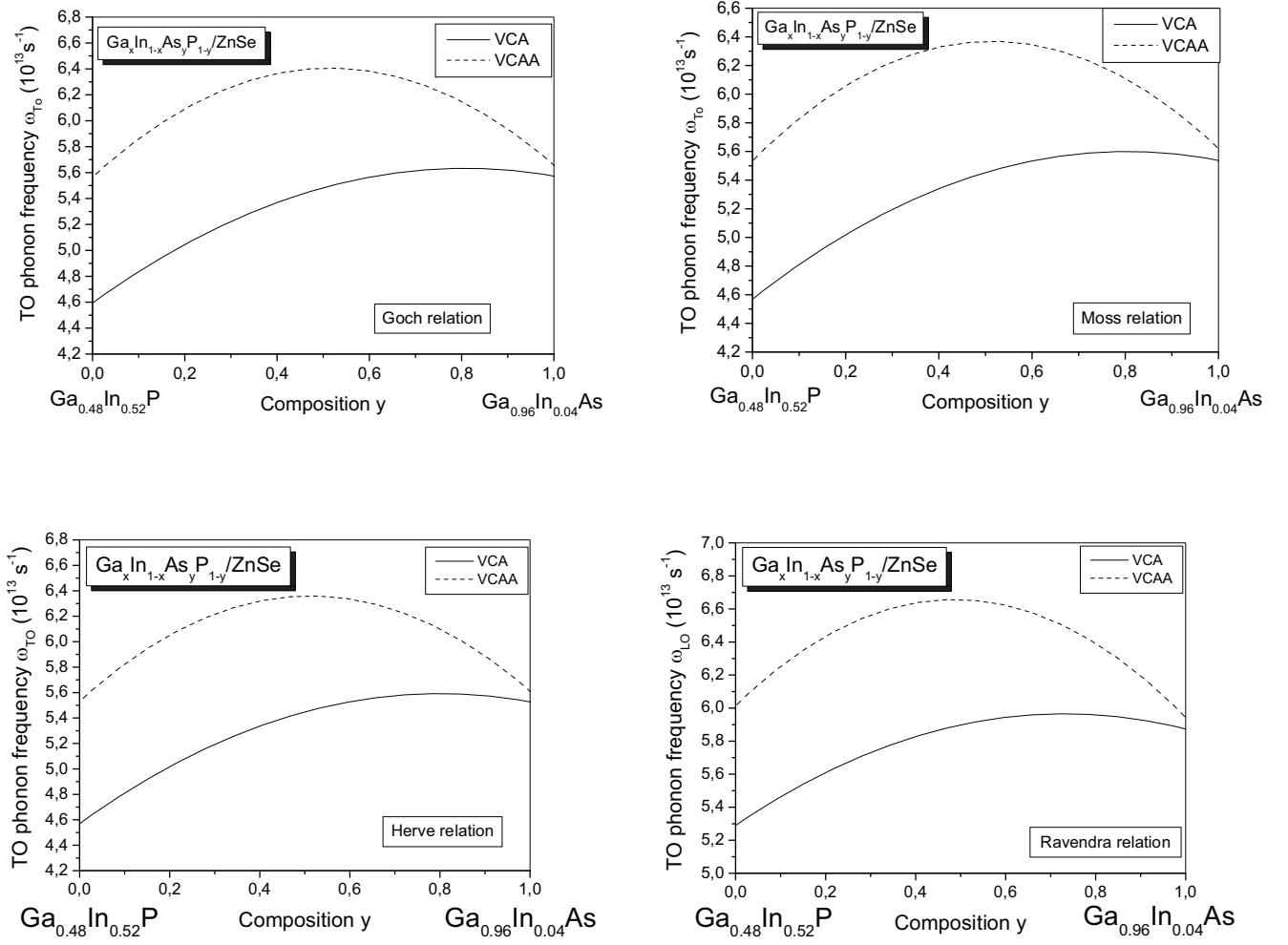


Figure V-41 : Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/ZnSe$.

V.3.2.2.2. Effet de substrat :

En introduisant l'effet de désordre dans les calculs, nous avons tracé ω_{TO} par rapport à y pour l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur GaAs, InP et ZnSe dans la figure (V.42). On remarque une variation non linéaire de ω_{TO} en fonction de y . Pour une composition y élevée, l'effet de substrat semble être importants et les grands valeurs de ω_{TO} sont obtenus lorsque l'alliage d'intérêt est déposé sur InP pour des concentrations élevées. Néanmoins, à basse compositions y , l'effet de substrat devient faible et la différence entre les valeurs de ω_{TO} obtenu pour $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur différents substrats d'intérêt devient moins importants.

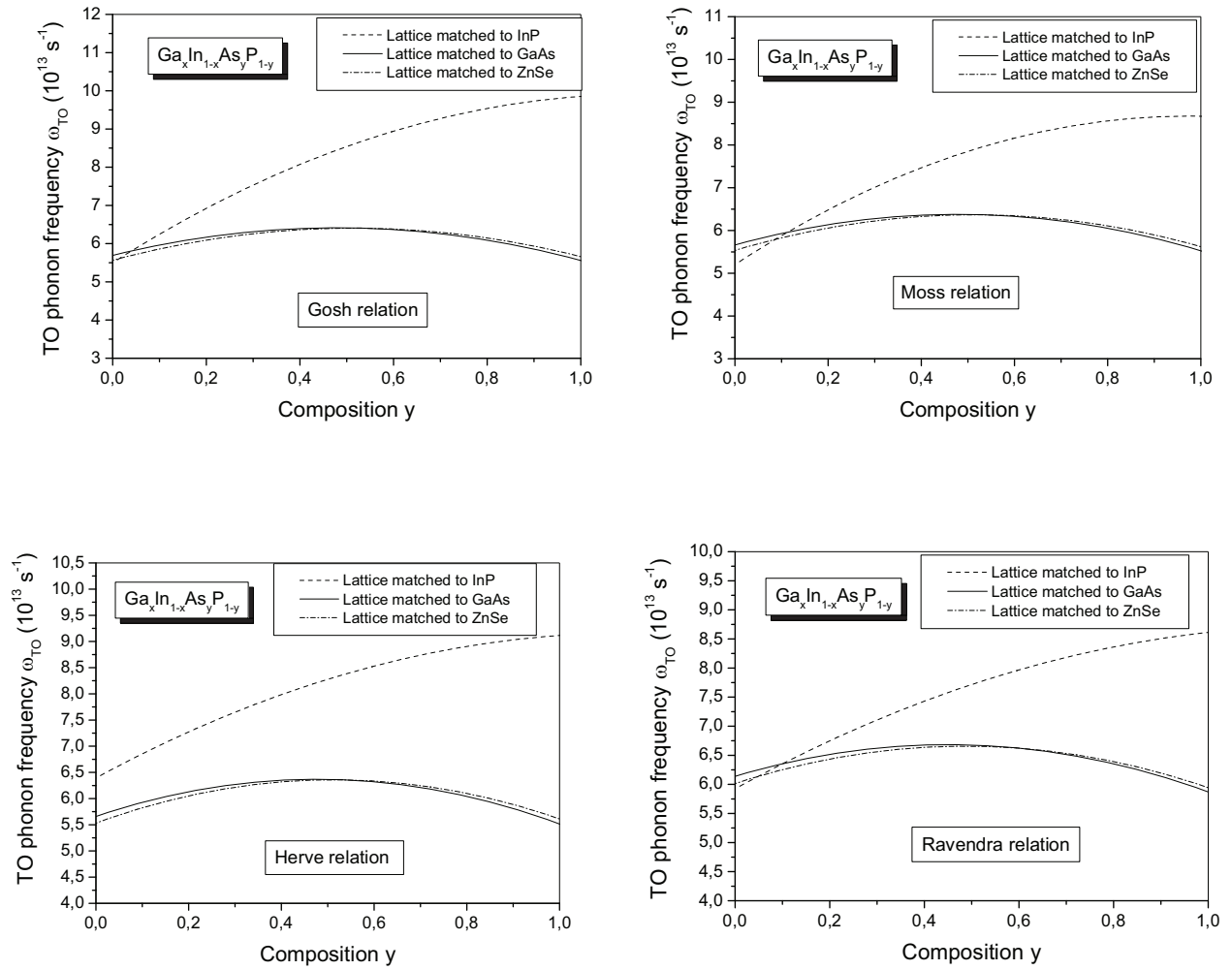


Figure V-42 : Variation des fréquences optiques transversale ω_{TO} en fonction de concentration y de l'Arsenic de l'alliage $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur les substrats : InP, GaAs et ZnSe.

Références

- [1] M. Guden, J. Piprek, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **4** (1996) 349.
- [2] E.F.Schubert,E.O.Gobel,Y.Horikoshi,k.Ploog,and H.J.Queisser,Physical Review B, 30, (1984) 813.
- [3] S. Adachi, Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds. (Canada: Wiley) (1992).
- [4] A. Bechiri and N. Bouarissa, Superlatt. Microstruct. **39** (2006) 478.
- [5] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53** (1982) 8775.
- [6] V. Kumar and J. K. Singh, Indian Journal of Pure and Appl Phys, **48** (2010) 571.
- [7] R. E. Nahory, M. A. Pollack, W. D. Johnston, Jr. and R. L. Barns, Appl. Phys. Lett. 33, (1978) 659.
- [8] E. H. Perea, E. E. Mendez and C. G. Fonstad, Appl. Phys. Lett. 36, (1980) 978.
- [9] S. Adachi, J. Appl. Phys. 66, (1989) 6030.
- [10] M. Levinshstein, S. Rumyantsev and M. Shur, *Handbook Series on Semiconductor Parameters* (Singapore: World Scientific) (1999).
- [11] O. Madelung, Semiconductor Data Handbook (from CDRom) third Ed, Springer (2004).
- [12] M. Cardona and P. Y. Yu, Compreh. Semicond. Sci. Technol. **2** (2011) 125.
- [13] S. Kasap and P. Capper, Handbook of electronic and Photonic Materials. Springer (2006).
- [14] M. J. Weber, CRC Hand book of Optical Materials, 80th ed (2000)
- [15] L. G. Meiners, J. Appl. Phys. **59** (1986) 1611.
- [16] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors (Canada: Wiley) (2009).
- [17] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th ed, John Wiley and Sons (2005).
- [18] L. G. Meiners, J. Appl. Phys. **59** (1986) 1611.
- [19] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors (Canada: Wiley) (2009).
- [20] N. Bouarissa, Lett. A **245** (1998) 285 and references cited therein.
- [21] W. J. Tropf, M. F. Thomas and T. J. Harris, *Handbook of Optics*, Vol. II (1995).
- [22] R. K. Willardson, A. C. Beer, E. R. Weber, Semiconductors and Semimetals, Vol 37, Academic Press, Inc.(1992)
- [23] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors,Wiley (2005)
- [24] P. Vogl, J. Phys. C, **11** (1978) 251.
- [25] N. Bouarissa, Phys. Lett. A, **245** (1998) 285 and references cited therein.

- [26] N. Bouarissa, S. Bougouffa and A. Kamli, *Semicond. Sci. Technol.* **20** (2005) 265.
- [27] M. Lannoo and J. N. Decarpigny, *Phys. Rev. B*, **8** (1973) 5704.
- [28] M. Boucenna and N. Bouarissa, *Mat. Eng. B*, **138** (2007) 228.
- [29] S. Zerroug and F. Ali Sahraoui, N. Bouarissa, *Materials Letters*. **60** (2006) 546.
- [30] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A*, **245** (1998) 285.
- [31] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed, John Wiley and Sons (2005).
- [32] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi, *Rev. Mod. Phys.* **73** (2001) 515 and references therein.
- [33] N. Bouarissa and S. Saib, *Elastic modulus*, *Current Appl. Phys.* **13** (2013) 493.
- [34] N. Bouarissa, S. Bougouffa and A. Kamli, *Semicond. Sci. Technol.* **20** (2005) 265.

Conclusion générale

Conclusion générale

L'objectif de ce travail de thèse consistait à étudier quelques propriétés optiques, élastiques et dynamiques de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur les substrats InP, GaAs et ZnSe, la méthode utilisée est celle du pseudopotentiel empirique (EPM) couplée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) associée avec le modèle des orbitales liées de Harrison (Bond Orbital Model).

A partir des différents calculs effectués dans ce travail on a pu conclure que :

L'effet de désordre compositionnel est important et ne doit pas être négligé dans les calculs. La variation des différents paramètres calculés dans ce travail tel que l'indice de réfraction, les constantes diélectriques, les constantes élastiques et les modules liés et les fréquences de phonon en fonction de la composition y ont été trouvés non linéaires.

Dans notre travail, l'indice de réfraction a été calculé à l'aide des équations de Ghosh, Moss, Herve et Ravindra. Les résultats obtenus montrent : un bon accord en les comparant avec les valeurs expérimentales disponibles pour les composés binaires est particulièrement celle calculée avec les relations de Herve et de Ravindra, une croissance en fonction de la composition y de l'Arsenic est observée. Dans le cas de la constante diélectrique à haute fréquence on note une tendance qualitativement semblable à celle de l'indice de réfraction avec la concentration y puisque ϵ_∞ est une valeur quadratique de n . De même un meilleur accord est obtenu pour les relations de Herve et de Ravindra, les mêmes observations sont notées pour la constante diélectrique statique. À partir des résultats obtenus des constantes diélectriques à haute fréquence et statique on peut conclure que l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ déposé sur le substrat InP montre qu'il est un matériau utile dans la fabrication des condensateurs à grande capacité.

Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} montrent une augmentation en fonction de la fraction molaire y de l'Arsenic, à partir des constantes élastiques on a pu conclure que l'alliage sous investigation est stable dans l'intervalle de 0 à la concentration y . Les valeurs trouvées du module de compressibilité B , module de Young, les constantes de force α et β et le module de cisaillement C_s sont en très bon accord avec l'expérience et les autres travaux disponibles pour les composés binaires GaAs et InP. Tandis que pour les binaires InAs et GaP la différence est assez large. Ces modules croissent non linéairement avec la

variation de la fraction molaire de l'Arsenic tandis que le paramètre d'isotropie A diminue avec l'augmentation de la concentration y .

Nous avons étudié le dynamique du réseau de l'alliage quaternaire $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ déposé sur différents substrats. Nos travaux sont les premiers à être effectués sur $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$. Les valeurs des fréquences optiques transversale et longitudinale des composés binaires montrent un bon accord avec les valeurs expérimentales disponibles, les fréquences LO et TO décroît avec l'augmentation de la concentration y de l'Arsenic. Nos calculs prévoient les fréquences de phonon des alliages ternaire et quaternaire où les données expérimentales ne sont pas disponibles.

L'effet de substrat est important et spécifiquement pour des grandes concentrations y de l'Arsenic. Le présent travail a montré que les valeurs les plus grandes de fréquences optiques calculées peuvent être obtenues lorsque $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ est déposé sur InP pour des concentrations y importante.

En fin pour un bon choix de concentration de l'Arsenic et de substrat, le système quaternaire en question pourrait fournir les plus diverses possibilités pour atteindre les propriétés optiques, élastique et de vibration souhaité des cristaux.