

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
UNIVERSITE MOHAMED KHIDER BISKRA
جامعة محمد خيضر بسكرة



THESE

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département des Sciences de la Matière

Pour l'obtention du Diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Option : Physique des Solides

Présentée par:

FARES Nour El Houda

Thème

***LES ÉTATS DE L'ÉLECTRON ET DU POSITRON DANS LE MASSIF A LA SURFACE
ET AU VOISINAGE DE LA SURFACE DES MATÉRIAUX SEMI-CONDUCTEURS***

Soutenue le : 03 /07 / 2016

Devant le Jury :

N. Sengouga	Professeur	Président	Université de Biskra
N. Bouarissa	Professeur	Rapporteur	Université de M'sila
A. Meftah	Professeur	Examinatrice	Université de Biskra
S. Lakel	Professeur	Examineur	Université de Biskra
K. Bouamama	Professeur	Examineur	Université de Sétif
H. Choutri	Professeur	Examinatrice	Université de Bordj Bou Arréridj

2015/2016

Remerciements



Remerciements

*Je tiens à adresser en premier lieu mes plus sincères remerciements à mon directeur de thèse le **Professeur N. Bouarissa**. Je le remercie très chaleureusement de m'avoir fait découvrir un jardin de fleurs théoriques, de m'avoir guidé dans cette voie qui était nouvelle pour moi durant ces quatre années. Il ne m'a pas simplement accepté comme doctorante, mais il m'a transmis la passion de la recherche et n'a eu de cesse de m'encourager et de me soutenir durant ces années. Il est difficile de trouver des qualificatifs assez forts pour souligner sa gentillesse, son humilité, son humanité et sa patience à prodiguer des conseils pertinents. J'en profite pour lui exprimer ici ma plus profonde gratitude.*

*Je suis très honorée que le **Professeur N. Sengouga** de l'université de Biskra ait accepté de présider le jury et de m'honorer de sa présence.*

*C'est également un très grand honneur que le **Professeur A. Meftah** et le **Professeur S. Lakel** de l'université de Biskra, dont la carrière est impressionnante, aient accepté de faire partie du jury.*

*Mes remerciements vont tout particulièrement à **Mme. H. Choutri, Professeur** à l'université de Bordj Bou Arréridj, qui m'a chaleureusement accueilli dans son équipe au sein du laboratoire matériaux et systèmes électroniques. Merci pour vos précieux conseils et votre grande disponibilité, sans oublier votre grande gentillesse. C'est un grand honneur de vous avoir comme membre du jury.*

*J'adresse mes de sincères remerciements au **Professeur K. Bouamama** de l'université de Sétif d'avoir accepté d'examiner cette thèse et de me faire l'honneur d'être membre.*

*Toute ma gratitude envers le **Docteur N. Grar** de l'université de Bordj Bou Arréridj pour ses grandes qualités scientifiques et humaines.*

Je ne peux m'empêcher de remercier le staff du département SM et de la faculté SNV de l'université Mohamed Khider de Biskra. Enfin, Au terme de ce travail, je souhaite adresser mes sincères remerciements à toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation et ont permis par leur soutien et leurs conseils, de le mener à bien.

Dédicaces



A tous ceux qui me sont chers.

Résumés



Résumé

Dans ce travail, nous avons fait une étude théorique sur les propriétés électroniques, optiques, diélectriques et positroniques de l'alliage semi-conducteur ternaire III-V à base d'antimoniure cristallisant dans la phase Zinc-blende à savoir : $Al_xIn_{1-x}Sb$.

La méthode de calcul utilisée pour déterminer les propriétés électroniques est celle des pseudopotentiels. L'effet du désordre compositionnel a été pris en considération par l'introduction d'un potentiel effectif (VCA améliorée). Par contre pour l'étude des propriétés positroniques, la méthode des pseudopotentiels a été combinée au modèle de la particule indépendante.

Nos résultats montrent une transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_{X}^{Γ} au point $x = 0.73$. La structure de bande, la densité de charge, la masse effective, l'indice de réfraction (n), la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_{∞}) ont été étudiés en fonction de la concentration de l'Aluminium. D'autres caractéristiques, telles que les constantes élastiques C_{11}, C_{12} et C_{44} , ainsi que la moyenne $\langle C_{ii} \rangle$, le potentiel chimique des positrons μ^+ , l'affinité positronique A^+ , le potentiel de déformation Ed^+ , ainsi que la constante de diffusion du positron D_+ , leurs variations ont été étudiées en fonction du désordre compositionnel x .

Nos résultats sont en très bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques, ce qui a permis de conclure que la méthode adoptée dans cette étude est valable pour la détermination des propriétés électroniques et positroniques de l'alliage $Al_xIn_{1-x}Sb$.

Mots clés: Semiconducteurs, Alliage $Al_xIn_{1-x}Sb$, Pseudopotentiel, VCAA, Positron.

Abstract

In this work, we have made a theoretical study on the electronic, optical, dielectric and positronic properties of the III-V ternary semiconductor alloy based on antimonide crystallizing in the Zinc-blende phase namely: $Al_xIn_{1-x}Sb$.

The calculation method used for determining the electronic properties is the one of the pseudopotentials. The effect of compositional disorder was taken into account by introducing an effective potential (improved VCA). However, for the study of positronic properties, the pseudopotentials method was combined with the independent particle model.

Our results show the transition of the direct gap E_{Γ}^I to indirect gap E_X^I at the $x = 0.73$ point. The band structure, the charge density, the effective mass, the refractive index (n), and the dielectric constant of high frequency (ϵ_{∞}) were studied in function of the Aluminum concentration. Other features, such as the elastic constants C_{11}, C_{12} and C_{44} , and their average $\langle C_{ii} \rangle$, the positrons chemical potential μ^+ , the positron affinity A^+ , the deformation potential Ed^+ , and the positron diffusion constant D_+ , their variations were studied in function of the compositional x disorder.

Our results are in good agreement with other experimental and theoretical results, which concluded that the method adopted in this study is valid for determining the electronic and positronic properties of the alloy $Al_xIn_{1-x}Sb$.

Keywords: Semiconductors, $Al_xIn_{1-x}Sb$ alloy, Pseudopotential, Improved VCA, Positron.

ملخص

في هذا العمل، قمنا بدراسة نظرية حول الخصائص الإلكترونية، البصرية، كهروناظرية والبوزيترونية لسبيكة أنصاف النواقل الثلاثي III-V ذات قاعدة أنتيمون والتي تتبلور في طور سفاليريت: $Al_xIn_{1-x}Sb$.

طريقة الحساب المستخدمة في تحديد الخصائص الإلكترونية هي شبه الكمون. تأثير الفوضى التركيبية قد أخذت بعين الاعتبار بإدخال كمون وهمي (تقريب للبلور الوهمي المطور). بينما لدراسة الخصائص البوزيترونية، طريقة شبه الكمون قد أدمجت مع نموذج الجسيمات المستقلة.

نتائجنا توضح أن هنالك انتقال من فجوة النطاق المباشر E_F^Γ إلى فجوة النطاق غير المباشر E_X^Γ في النقطة $x = 0.73$. بنيات النطاقات، كثافة الشحنة، الكتلة الفعلية، معامل الانكسار (n) وثابت الكهروناظرية العالي التردد (ϵ_∞) قد تمت دراستهم بدلالة تركيز الألومنيوم. مميزات أخرى، مثل الثوابت المرنة C_{11}, C_{12}, C_{44} ، و القيمة المتوسطة $\langle C_{ii} \rangle$ ، الكمون الكيميائي للبوزيترونات μ^+ ، الألفة البوزيترونية A^+ ، كمون التشويه Ed^+ ، و أيضا ثابت التدفق للبوزيترون D_+ ، قد تم دراسة التغيرات بدلالة الفوضى التركيبية x .

نتائجنا في اتفاق جيد مع النتائج التجريبية والنظرية، مما أدى إلى استنتاج مفاده أن الطريقة المعتمدة في هذه الدراسة هي مناسبة لتحديد الخصائص الإلكترونية والبوزيترونية للسبيكة $Al_xIn_{1-x}Sb$.

كلمات البحث: أنصاف النواقل، السبيكة $Al_xIn_{1-x}Sb$ ، شبه الكمون، تقريب للبلور الوهمي المطور، البوزيترون.

Sommaire



Remerciements	
Dédicaces	
Résumés	
Sommaire	
Liste des tableaux	
Liste des figures	
Introduction générale	1
Références bibliographiques	5
Chapitre I	Les semiconducteurs et leurs alliages
I.1. Introduction	6
I.2. Les différents types de semiconducteurs	7
I.2.1. Semiconducteur intrinsèque	7
I.2.2. Semiconducteur extrinsèque	7
I.2.2.1. Semiconducteur extrinsèque de type N	8
I.2.2.2. Semiconducteur extrinsèque de type P	8
I.3. Propriétés structurales des semiconducteurs III-V	9
I.3. 1. Structures cristallines des semiconducteurs III-V	9
I.3.2. Première zone de Brillouin	10
I.3.2.1. Les points de haute symétrie	11
I.3.2.2. Les lignes de haute symétrie	11
I.4. Propriétés électroniques des semiconducteurs III-V	12
I.4.1. La structure de bande	12
I.4.2. Gap énergétique	12
I.4.3. Masse effective	13
I.4.4. Densité de charge	14
I.5. Propriétés optiques des semiconducteurs III-V	15
I.6. Propriétés diélectriques des semiconducteurs III-V	17
I.7. Théorie des alliages des semiconducteurs	18
I.7.1. Introduction	18
I.7.2. L'approximation du cristal virtuel (VCA)	19
I.7.2.1. Cas d'un alliage ternaire	19
I.7.2.2. Propriétés physiques	19
I.7.2.2.1. Constante du réseau de l'alliage ternaire	20

I.7.2.2.2. Gap énergétique de l'alliage ternaire	21
I.7.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)	22
I.8. Conclusion	23
Références bibliographiques	24

Chapitre II Méthodes de calcul des structures de bandes électroniques

II.1. Introduction	27
II.2. L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin	27
II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer	29
II.2.2. Approximation du champ autocohérent	31
II.2.2.1. Approximation de Hartree	31
II.2.2.2. Approximation de Hartree-Fock	32
II.2.2.3. Approximation de Hartree-Fock-Slater	33
II.3. Les méthodes de calcul de la structure de bande électronique	34
II.3.1. Méthodes de calcul des électrons libres	34
II.3.2. Méthodes de calcul des électrons presque libres	34
II.3.3. Méthodes de calcul des ondes planes	37
II.3.4. Méthodes de calcul des ondes planes augmentées	38
II.3.5. Méthodes de calcul des ondes planes orthogonales	39
II.3.6. Méthodes des pseudopotentiels	40
II. 4. Conclusion	40
Références bibliographiques	41

Chapitre III Méthode des pseudopotentiels

III.1. Introduction	42
III.2. Principe de la méthode des pseudopotentiels	42
III.3. Théorie de Phillips et Kleinman	43
III.4. Modèle de potentiel	46
III.4.1. Modèle de potentiel de Heine-Abarenkov	47
III.4.2. Modèle de potentiel d'Ashcroft	48
III. 5. Méthode empirique du pseudopotentiel (EPM)	48
III.5.1. Approximation empirique locale	49
III.6. Conclusion	60
Références bibliographiques	61

Chapitre IV

Le positron dans la matière

IV.1. Introduction	62
IV.2. Les Sources de positrons	62
IV.3. Interaction des positrons avec la matière	64
IV.3.1. Interaction des positrons avec les électrons	64
IV.3.2. Interaction des positrons avec les noyaux	65
IV.4. Annihilation du positron	66
IV.4.1. La corrélation angulaire de l'annihilation des positrons	68
IV.5. La méthode de la particule indépendante	69
IV.5. Conclusion	73
Références bibliographiques	74

Chapitre V

Résultats et discussions

V.1. Introduction	75
V.2. Etude des propriétés électroniques	75
V.2.1. Structure de bandes électronique	79
V.2.2. Le gap d'énergie	82
V.2.3. La masse effective des électrons	87
V.2.4. Densité de charge électronique	88
V.3. Etude des propriétés optiques	91
V.3.1. Indice de réfraction	91
V.4. Etude des propriétés diélectriques	93
V.4.1. Constantes diélectriques de haute fréquence	93
V.5. Etude des propriétés positroniques	94
V.5.1. Structure de bande positronique	95
V.5.2. Le potentiel chimique μ^+	97
V.5.3. Affinité positronique	98
V.5.4. Les masses effectives des positrons	100
V.5.5. Densité de charge positronique	102
V.5.6. La durée de vie du positron	103
V.5.7. Constantes élastiques	104
V.5.8. Potentiel de déformation du positron	107
V.5.9. Constante de diffusion du positron	111
V.6. Conclusion	112

Références bibliographiques	114
Conclusion générale	116
Annexes	

Liste des tableaux



Liste des tableaux

Tableau.I.1. Tableau périodique formant les semi-conducteurs binaires.	6
Tableau.I.2. Paramètres de maille de l'InSb et l'AlSb.	10
Tableau.VI.1. Principaux émetteurs β^+ utilisables.	63
Tableau.V.1. Les facteurs de formes symétriques (V_S) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des composés binaires semi-conducteurs InSb et AlSb et leurs paramètres de réseaux $a(\text{Å})$.	77
Tableau.V.2. Comparaison entre les gaps d'énergies calculés et observés dans les composés binaires semi-conducteurs InSb et AlSb.	78
Tableau.V.3. Paramètres de réseau de l'alliage semiconducteur $Al_x In_{1-x} Sb$.	79
Tableau.V.4. Indice de réfraction (n) des semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb en utilisant différents modèles.	91
Tableau.V.5. Les coefficients de Fourier de la densité de charge des électrons de valence pour InSb, AlSb et $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ en utilisant la VCA.	95
Tableau.V.6. Le potentiel chimique des positons calculés pour les matériaux semi-conducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.	97
Tableau.V.7. L'affinité positronique calculés pour les matériaux semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.	99
Tableau.V. 8. Constantes élastiques et leurs moyenne $\langle C_{ii} \rangle$ des alliages InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ and AlSb.	105
Tableau.V. 9. Paramètres pseudopotentiels de la structure Zinc-blende ^{a)} InSb et ^{b)} AlSb à différentes pressions jusqu'à 20 Kbar.	109
Tableau.V. 10. Potentiel de déformation calculé pour les matériaux semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.	109
Tableau.V.11. Constante de diffusion calculée pour les matériaux semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.	111

Liste des figures



Liste des figures

Figure.I.1. Silicium dopé au Phosphore	8
Figure.I.2. Silicium dopé au Bore	9
Figure.I.3. Maille élémentaire du composé binaire AlSb.	9
Figure.I.4. Première zone de Brillouin de la structure Zinc blende	12
Figure.I.5. a. Semiconducteur à gap direct - b. Semiconducteur à gap indirect	13
Figure.I.6. Paramètre de réseau de quelques composés binaires	20
Figure.III.1. L'approche du pseudopotentiel empirique local	59
Figure.IV.1. Spectre en énergie des positrons émis par le Sodium ^{22}Na	63
Figure.IV.2. Schéma des deux états d'un positronium : para-positronium et ortho-positronium	65
Figure.IV.3. Comportement du positron dans la matière	66
Figure.IV.4. Annihilation d'une paire électron-positron de quantité de mouvement \vec{P}	69
Figure.V.1. Structure de bande électronique du composé binaire InSb	80
Figure.V.2. Structure de bande électronique du composé binaire AlSb	81
Figure.V.3. Structure de bande électronique de l'alliage ternaire $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	81
Figure.V.4. Variation du gap direct d'énergie E_{Γ}^{Γ} en fonction de la composition x avec et sans désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.	84
Figure.V.5. Variation du gap indirect d'énergie E_{X}^{Γ} en fonction de la composition x avec et sans désordre de l'alliage $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.	85
Figure.V.6. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} en fonction de la composition x sans désordre de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.	86
Figure.V.7. Variation des gaps d'énergies direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} en fonction de la composition x avec désordre de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.	86
Figure.V.8. La variation de la masse effective de l'électron dans $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ en fonction de la fraction molaire.	88
Figure.V.9. Densité totale de charges électroniques de la bande de valence selon la direction $[1\ 1\ 1]$ au deux points de Chadi et Cohen de l'alliage ternaire $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	89
Figure.V.10. Densité totale de charges électroniques de la première bande de conduction selon la direction $[1\ 1\ 1]$ de l'alliage ternaire $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	90

Figure.V.11. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$	92
Figure.V.12. La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$.	94
Figure.V.13. Structure de bande positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$.	96
Figure.V.14. La variation du potentiel chimique du positron dans l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$	98
Figure.V.15. La variation de l'affinité positronique dans l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$ en fonction de la fraction molaire x	99
Figure.V.16. La variation la masse effective du positron dans l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$	101
Figure.V.17. Densité de charges positroniques selon la direction [1 1 1] de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$.	102
Figure.V.18. Durée de vie positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$.	104
Figure.V.19. La variation des constantes élastiques C_{11}, C_{12} et C_{44} de l'alliage semiconducteur ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$.	106
Figure.V.20. La variation de la moyenne des constantes élastiques $\langle C_{ii} \rangle$ de l'alliage semiconducteur ternaire $Al_x In_{1-x}Sb$.	107
Figure.V.21. Potentiel de déformation positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$.	110
Figure.V.22. Constante de diffusion positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5}Sb$.	112

Introduction Générale



Introduction



Introduction générale

L'étude des matériaux semiconducteurs, tant sur le plan théorique que sur le plan pratique est incontestablement une branche majeure de la physique de l'état solide. Depuis de nombreuses années les propriétés physiques des matériaux élémentaires, Si, Ge par exemple, ont été étudiées et cela a permis une meilleure compréhension de la nature même de ces matériaux. Par la suite, de nombreux composés (*GaAs*, *InSb* et tous les composés binaires III-V ou II-VI par exemple) ont été étudiés en s'appuyant sur les connaissances acquises à partir des éléments simples. On a pu ainsi déduire les schémas de bandes des composés III-V des résultats obtenus avec Ge et Si [1].

L'extrême diversité dans le comportement des éléments, quand on balaie le tableau périodique de Mendeleïev, a poussé les chercheurs à créer de nouveaux composants plus complexes mais plus intéressants parce qu'ils présentent de nouvelles propriétés insolites. Avec les alliages semiconducteurs ternaires III-V sont apparus des applications potentielles en optoélectronique tels que les lasers, les diodes émettrices, les cellules photovoltaïques et les détecteurs. Pour ces applications les composés binaires ou les semiconducteurs élémentaires ne peuvent pas toujours être utilisés, vu que certaines propriétés et particulièrement les propriétés optiques (telle que la largeur de la bande interdite et la longueur d'onde) sont des caractéristiques invariables dans un matériau.

Dans l'alliage ternaire de la forme $A_x B_{1-x} C$, il est adéquat de savoir comment varie la structure de bandes lorsque l'on passe d'un composé BC à un autre composé AC en faisant varier la concentration de l'élément A dans cet alliage. En effet plusieurs propriétés dépendent de cette variation. Citons à titre d'exemple le paramètre du réseau qui varie linéairement, alors que le gap énergétique et la masse effective varient de façon quadratique. Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optiques, électroniques, structurales, etc.) des alliages ternaires, tel que l'approximation du cristal cohérent (CPA) [2,3] et l'approche du cristal virtuel (VCA) [4].

Un effort intellectuel important a été consenti par des équipes de chercheurs dans le domaine de l'état solide depuis l'avènement de la mécanique quantique. Leurs travaux nous permettent, actuellement, de manipuler la structure microscopique de la matière pour créer de nouveaux solides, ou pour transformer radicalement ceux qui faisaient partie du lot quotidien [5]. La réussite de ces efforts engagés pour la fabrication de nouveaux matériaux adaptés aux besoins de l'industrie dépend de l'incorporation de plusieurs connaissances précises telles que la méthode théorique de modélisation, la prévision du comportement du matériau et l'outil informatique. Ce domaine multidisciplinaire des sciences fondamentales et génie des matériaux est devenu un pilier indispensable au progrès de toute technologie.

La structure électronique est la pierre angulaire de la modélisation des dispositifs à base de semiconducteurs, elle nous indique les états énergétiques des porteurs de charge ainsi toutes les propriétés électroniques en dépendent directement. La physique du solide a connu un essor impressionnant de par la mise au point de nouvelles techniques de calcul, plus rapides, plus précises, qui permettent le calcul des structures électroniques. Ceci a permis la réalisation d'un grand nombre de matériaux utilisés actuellement dans l'industrie.

Ces nouvelles méthodes de calculs, par traitement informatique, reposent sur différentes approches fortement liées. Telles que les approches *ab initio*, et les approches semi-empiriques comme la méthode *k.p*, la méthode de combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) et la méthode des pseudopotentiels empiriques (EPM). Cette dernière a prouvé depuis son introduction dans l'investigation, la compréhension et la prédiction des propriétés électroniques des solides. Cette théorie a été introduite pour simplifier les calculs des propriétés électroniques en éliminant la nécessité d'inclure les états du cœur des atomes et le potentiel profond, responsable de la structure du cœur.

La théorie des particules élémentaires prévoit qu'à chaque particule correspond une particule jumelle, appelée antiparticule. Le positon, antiparticule de l'électron, a été prévu par la théorie de Dirac dès 1930 [6]. Il fut mis en évidence vers 1932 par Anderson [7].

Le positron présente les mêmes valeurs de charge, masse, spin et moment magnétique que son antiparticule l'électron. Il n'en diffère que par les signes opposés de sa charge et de son moment magnétique. Par conséquent, ses propriétés obéiront aux lois de la mécanique quantique, sans être limitées dans la matière par le principe d'exclusion de Pauli. Les deux antiparticules peuvent s'annihiler avec émission de photon [8].

Le positron est une sonde particulièrement intéressante pour l'étude des massifs et des surfaces, citons également son intérêt en chimie, en métallurgie où l'efficacité du positron est apparue en 1964, lorsque Berko [9] remarqua que la durée de vie du positron dans l'aluminium était augmentée si celui-ci était écroui. On s'est rapidement rendu compte de l'intérêt du positron en physique du solide.

C'est en utilisant la méthode des pseudopotentiels, que notre travail présente l'investigation des propriétés fondamentales de l'électron et du positron dans le massif, à la surface et au voisinage de la surface de l'alliage ternaire semi-conducteur à savoir $Al_x In_{1-x} Sb$ dans la phase Zinc-blende. L'objectif étant de l'utiliser d'une façon optimisée et plus efficace dans les dispositifs optoélectroniques. La méthode des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel, cette dernière faisant introduire l'effet du désordre compositionnel de l'alliage comme un potentiel additif au potentiel du cristal, nous permet de déterminer les états électroniques. Par contre pour le calcul des états positroniques, la méthode des pseudopotentiels a été combinée avec le modèle de la particule indépendante.

Pour aboutir aux objectifs de cette étude, notre thèse acheminera le parcours suivant :

- On débute par une introduction générale, où on expose la problématique de cette étude, en donnant un bref aperçu sur le choix de la méthode de calcul.
- La théorie des semiconducteurs et leurs propriétés fondamentales ainsi que la théorie du cristal virtuel, en tenant compte de l'effet du désordre compositionnel comme un potentiel effectif, appliquée aux alliages semiconducteurs, sont développées au premier chapitre.

- La matière condensée peut être décrite à l'aide d'une équation de Schrödinger, qui prend en compte l'énergie cinétique de tous les ions et des électrons et leurs interactions. Le problème est très complexe vu le nombre de particules qui existent, en conséquence, il faut recourir à des approximations. Le deuxième chapitre décrit ces différentes approximations et les méthodes de calculs des structures de bandes électroniques.

- Une étude bien détaillée, en équations analytiques, où a été mise en évidence de la méthode des pseudopotentiels couplée à l'approximation du cristal virtuel pour le calcul des états électroniques de l'alliage ternaire semiconducteur $Al_x In_{1-x} Sb$ cristallisant dans la phase Zinc-blende, est présentée dans le troisième chapitre.

- Le quatrième chapitre est consacré à une description du comportement du positron dans la matière condensée, ainsi que la méthode de calcul des états positroniques qui se base sur l'approche des pseudopotentiels combinée au modèle de la particule indépendante.

- On exposera les principaux résultats obtenus avec une interprétation de ceux-ci, ainsi qu'une comparaison avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux dans le cinquième chapitre.

- Enfin, une conclusion générale permettra de mettre en avant les innovations apportées par ce travail. et les perspectives qu'on espère concrétiser au futur.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] M. Cardona, J. Phys. Chem. Sol. 24 (1963) 1543.
- [2] A. B. Chen, A. Sher, Phys. Rev. B 19 (1979) 3057.
- [3] V. B. Gera, R. Gupta, K.T. Jain, Phys. Rev. B 36 (1987) 9657.
- [4] M. Jaros, Rep. Prog. Phys. 48 (1985) 1091.
- [5] J. Mercier, G. Zambelli, W. Kurz, « Introduction à la science des matériaux », Ed PPUR presses polytechniques Amazon, France (1999).
- [6] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. 26 (1930) 261.
- [7] C. D. Anderson, Science 76 (1932) 238.
- [8] L. Valentin, « Physique subatomique », Tome I, Ed Herman, Paris (1975).
- [9] S. Berko, J.C. Eskrine, Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 307.

Chapitre I

LES SEMICONDUCTEURS ET LEURS ALLIAGES



I.1. Introduction

L'intelligence humaine n'a épargné aucun effort pour assembler artificiellement les atomes offerts par la nature, au profit de l'industrie, qui a connu un essor fulgurant avec le développement des semi-conducteurs de type III-V. Ces matériaux de choix sont destinés à l'optoélectronique créant ainsi des détecteurs de lumière et des émetteurs sur une très large gamme spectrale allant de 0.2mm à 300 mm [1].

Dans le tableau périodique, la famille des semi-conducteurs s'étend de la colonne II A-B à la colonne VI A de la classification de Mendeleïev, passant par le silicium qui reste toujours au cœur de la révolution électronique. Le Tableau.I.1 illustre les matériaux semiconducteurs du tableau périodique, cette famille de semiconducteurs s'est agrandie par l'association des éléments des colonnes II et VI ou encore III et V qui sont plus performants que le silicium, mais plus difficile à réaliser avec un prix de revient élevé.

Tableau.I.1. Tableau périodique formant les semiconducteurs binaires [2].

I	II	III	IV	V	VI	VII
H ¹ 1s						
Li ³ 2s	Be ⁴ 2s ²	B ⁵ 2s ² 2p	C ⁶ 2s ² 2p ²	N ⁷ 2s ² 2p ³	O ⁸ 2s ² 2p ⁴	F ⁹ 2s ² 2p ⁵
Na ¹¹ 3s	Mg ¹² 3s ²	Al ¹³ 3s ² 3p	Si ¹⁴ 3s ² 3p ²	P ¹⁵ 3s ² 3p ³	S ¹⁶ 3s ² 3p ⁴	Cl ¹⁷ 3s ² 3p ⁵
K ¹⁹ 4s	Ca ²⁰ 4s ²	Sc ²¹ 4s ² 3d	Ti ²² 4s ² 3d ²	V ²³ 4s ² 3d ³	Cr ²⁴ 4s ² 3d ⁴	Mn ²⁵ 4s ² 3d ⁵
Cu ²⁹ 4s 3d ¹⁰	Zn ³⁰ 4s ² 3d ¹⁰	Ga ³¹ 4s ² 4p	Ge ³² 4s ² 4p ²	As ³³ 4s ² 4p ³	Se ³⁴ 4s ² 4p ⁴	Br ³⁵ 4s ² 4p ⁵
Rb ³⁷ 5s	Sr ³⁸ 5s ²	Y ³⁹ 5s ² 4d	Zr ⁴⁰ 5s ² 4d ²	Nb ⁴¹ 5s 4d ⁴	Mo ⁴² 5s 4d ⁵	Tc ⁴³ 5s 4d ⁶
Ag ⁴⁷ 5s 4d ¹⁰	Cd ⁴⁸ 5s ²	In ⁴⁹ 5s ² 5p	Sn ⁵⁰ 5s ² 5p ²	Sb ⁵¹ 5s ² 5p ³	Te ⁵² 5s ² 5p ⁴	I ⁵³ 5s ² 5p ⁵
Cs ⁵⁵ 6s	Ba ⁵⁶ 6s ²	La ⁵⁷⁻⁷¹ Series	Hf ⁷² 6s ² 5d ² 4f ¹⁴	Ta ⁷³ 6s ² 5d ³	W ⁷⁴ 6s ² 5d ⁴	Re ⁷⁵ 6s ² 5d ⁵
Au ⁷⁹ 6s 5d ¹⁰	Hg ⁸⁰ 6s ² 5d ¹⁰	Tl ⁸¹ 6s ² 6p	Pb ⁸² 6s ² 6p ²	Bi ⁸³ 6s ² 6p ³	Po ⁸⁴ 6s ² 6p ⁴	At ⁸⁵ 6s ² 6p ⁵

- Semiconducteurs binaire III-V
- Semiconducteurs binaire III-VI
- Semiconducteurs binaire II-VI
- Semiconducteurs binaire I- VII
- Semiconducteurs binaire IV-VI

Les semi-conducteurs III-V suscitent un vif intérêt tant pour les propriétés fondamentales que pour leurs applications potentielles en optoélectronique. Leur intérêt pratique est renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle ou totale de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

I.2. Différents types de semiconducteurs

Par son habilité à conduire le courant, un semi-conducteur est un matériau se situant entre le conducteur et l'isolant. Un semi-conducteur à l'état pur (intrinsèque) n'est pas un bon conducteur ni un bon isolant. Les éléments uniques les plus utilisés pour les semiconducteurs sont le silicium, le germanium et le carbone [3].

Il existe deux types de semi-conducteurs, l'un pur dit intrinsèque et l'autre dopé appelé extrinsèque.

I.2.1. Semi-conducteur intrinsèque

Si le cristal est si pur que les impuretés donnent une contribution négligeable aux densités de porteurs de charge, on parle de semi-conducteur intrinsèque. Dans le cas intrinsèque, les électrons de la bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux de la bande de valence autre fois occupés, laissant des trous derrière eux. Le nombre d'électrons de la bande de conduction est donc égal au nombre de trous dans la bande de valence [4].

$$n_c(T) = p_v(T) \equiv n_i(T) \quad \text{I-1}$$

I.2.2. Semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées au domaine d'utilisation de ce matériau. L'introduction de ces dopants perturbe les bandes interdites, en créant des états accessibles à l'intérieur de ces bandes et rend le gap plus perméable. Selon le type de dopage, on distingue deux types de semi-conducteurs [5].

I.2.2.1. Semi-conducteur extrinsèque de type N

L'insertion d'atomes pentavalents dans la structure cristalline d'un semiconducteur permet d'introduire artificiellement des électrons libres. En effet, un des cinq électrons de la couche périphérique des atomes pentavalents ne participe pas aux liaisons de valence.

Dans un semiconducteur de type N les électrons libres sont donc majoritaires alors que les trous sont minoritaires. Les atomes donneurs sont les atomes pentavalents que l'on introduit dans le semiconducteur pour le rendre extrinsèque de type N, ces atomes sont susceptibles de donner un électron libre. On parle de dopage de type N (Figure.I.1).

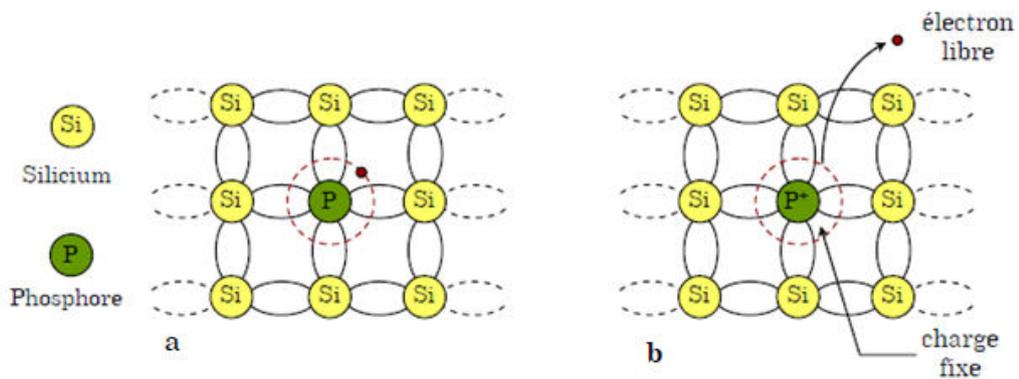


Figure.I.1. Silicium dopé au Phosphore. a. $T = 0 K$. b. $T \neq 0 K$ [4].

I.2.2.2. Semi-conducteur extrinsèque de type P

Dans le semiconducteur, il est également possible d'introduire artificiellement des trous plutôt que des électrons libres, il suffit d'insérer des atomes trivalents dans la structure cristalline. Les électrons de la couche périphérique de ces atomes prennent part à trois liaisons de valences, laissant un trou dans la quatrième. Un électron quelconque peut quitter la liaison qu'il occupe, laissant à son tour un trou derrière lui et venir occuper la place vacante. Tout se passe alors comme si le trou introduisant était libre de se déplacer dans un réseau cristallin.

On appelle atomes accepteurs, les atomes trivalents introduits dans le semiconducteur pour le rendre extrinsèque de type P, sont susceptibles d'accepter un électron de valence. On parle de dopage de type P (Figure.I.2).

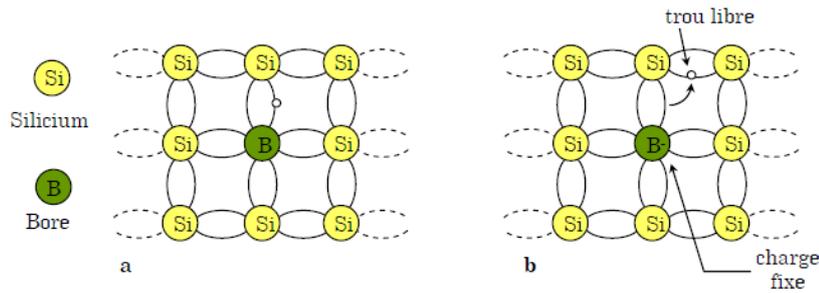


Figure.I.2. Silicium dopé au Bore. a. $T = 0\text{ K}$. b. $T \neq 0\text{ K}$ [4].

I.3. Propriétés structurales des semiconducteurs III-V

I.3.1. Structures cristallines des semiconducteurs III-V

Les matériaux semi conducteurs de la colonne III de la classification de Mendeleïev possèdent trois électrons de valence sur leurs dernières orbitales s et p. On prend l'exemple de l'Aluminium qui a la structure électronique $3s^2 3p^1$ par contre les éléments de la colonne V ont cinq électrons de valence sur leurs dernières orbitales $ns^2 np^3$. L'arrangement des atomes forme des orbitales atomiques hybrides de type sp^3 .

La Blende est formée de la superposition de deux réseaux cubiques à face centrées décalée l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale du cube, l'un étant occupé par l'anion (Sb), l'autre par le cation (Al). Les sites de chacun des deux réseaux sont occupés par des atomes de type différents. Chaque atome électropositif est entouré d'un tétraèdre d'atome électronégatifs et réciproquement, l'arrête du cube notée (a) est le paramètre de maille du réseau [6].

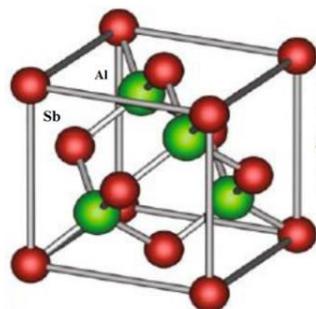


Figure.I.3. Maille élémentaire du composé binaire AlSb.

Les liaisons chimiques entre les atomes sont fortement covalentes avec une mise en commun d'électrons entre les atomes d'éléments III et ceux d'éléments V. Cependant, il existe aussi un faible caractère ionique dans les liaisons en raison de la différence d'électro négativité entre les éléments III et V [7].

L'état cristallin est la conséquence de l'arrangement géométrique périodique des atomes qui le constituent [8]. A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, dans lequel on représente les variations des fréquences du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde k caractérisant la propagation de l'onde considérée [6].

Le paramètre de maille d'une telle structure dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Une maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments la constituant est grand et inversement [9]. Ainsi dans le cas d'une structure ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$ l'incorporation Aluminium dans la maille cristalline $InSb$ diminue le paramètre de maille (a) de l'alliage. Le Tableau.I.2 illustre le paramètre de maille de deux composés binaires $InSb$ et $AlSb$.

Tableau.I.2. Paramètres de maille de l' $InSb$ et l' $AlSb$ [10,11].

	$InSb$	$AlSb$
$a(\text{Å})$	6.49^a	6.1355^b

aRef [10] et bRef [11].

I.3.2. Première zone de Brillouin

Une zone de Brillouin est par définition la maille de Wigner-Seitz du réseau réciproque. Le plus petit volume entièrement compris entre les plans médiateurs des vecteurs du réseau réciproque tracés à partir de l'origine est appelée première zone de Brillouin.

Cette première zone de Brillouin possède la forme d'un octaèdre tronqué (Figure.I.4). Cet espace réduit du réseau réciproque est caractérisé par des points et des lignes d'importance particulière, on les appelle les points et les lignes de haute symétrie [6].

I.3.2.1. Les points de haute symétrie

Γ : Centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_{\Gamma}(0, 0, 0)$.

X : Centre d'une face carrée de l'octaèdre appartenant à l'un des axes k_x , k_y ou k_z avec l'une des faces carrées.

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

L : Centre d'une face hexagonale de l'octaèdre ayant les coordonnées.

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

W : Point W se trouve sur l'un des sommets des faces carrées et de coordonnées.

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

Z : Point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre et de coordonnées.

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

I.3.2.2. Les lignes de haute symétrie

Δ : Ligne de direction (100), reliant le centre Γ au point X.

Σ : Point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.

Λ : Ligne de direction (100), reliant le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre.

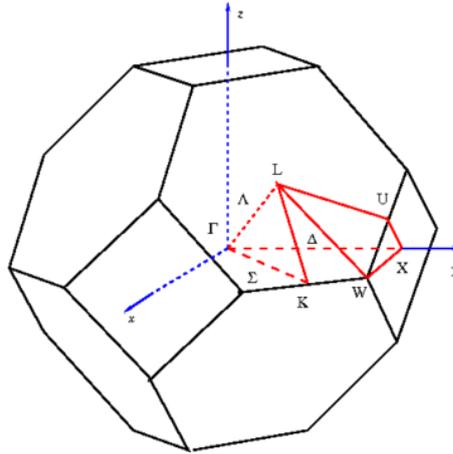


Figure.I.4. Première zone de Brillouin de la structure Zinc blende [6].

I.4. Propriétés électroniques des semiconducteurs III-V

I.4.1. La structure de bande

La périodicité dans le cristal conduit à une distribution des états énergétiques sous la forme de bandes définies par la relation de dispersion. L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V considérés. Leur structure c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde k dans la structure de bandes. Dans ces matériaux, les transitions entre les bandes de valence et de conduction seront alors le plus souvent radiatives. Cette caractéristique leur confère des propriétés optiques remarquables :

- L'émission de photons par recombinaison des porteurs en excès permet leur utilisation pour la fabrication de diodes lasers ou électroluminescentes.
- Le bon rendement de conversion de photons en électrons peut être utilisé dans la photodétection.

I.4.2. Gap énergétique

Les courbes $E_{cv}(k)$ dites aussi relations de dispersion où E_c est le minimum de la bande de conduction, E_v le maximum de la bande de valence et \vec{k} le vecteur d'onde associé à un électron, ces courbes font apparaître deux types de semi-conducteur.

Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} on dit que le semiconducteur est à gap direct. Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{k} différentes, on dit que le semi-conducteur est à gap indirect (Figure.I.5).

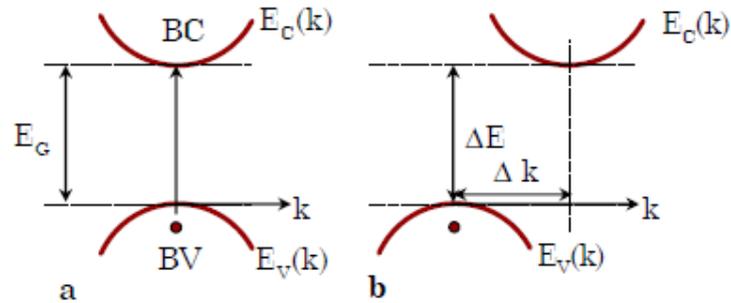


Figure.I.5. a. Semiconducteur à gap direct - b. Semiconducteur à gap indirect.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux), et donc dans le fonctionnement des composants utilisés en optoélectronique. On peut remarquer, que dans un semiconducteur à gap direct un électron du haut de la bande de valence qui acquière une énergie passe dans la bande de conduction sans changer de quantité de mouvement, ce qui n'est pas le cas dans un semiconducteur à gap indirect.

I.4.3. Masse effective

Un électron dans un état de bande est bien décrit, dans son comportement dynamique, par une masse effective m^* , c'est une propriété importante pour l'étude des phénomènes de transport dans les solides. Elle est obtenue directement de la structure de bande du matériau. L'approximation la plus simple, correspond à la dépendance parabolique de $E(k)$, pour les semiconducteurs du type III-V, au voisinage du minimum de la bande de conduction au point Γ ($k=0$), la bande de conduction est parabolique et isotopique. La masse effective devient une quantité scalaire et indépendante de la direction [5,12].

L'inverse de la masse effective $\frac{1}{m^*}$ est donc proportionnel à la deuxième dérivée de l'énergie $E(k)$ par rapport aux composantes du vecteur d'onde $k = (k_x, k_y, k_z)$, elle est de la forme :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{\delta^2 E(k)}{\delta k^2} \quad \text{I-2}$$

I.4.4. Densité de charge

La fonction d'onde semble effectivement détenir la clef de la physique quantique, ainsi, d'après Born, la signification de l'onde de Schrödinger est la suivante: la quantité $\rho = \psi^* \psi$ représente la densité de probabilité de présence d'une particule aux divers points de l'espace. Plus précisément, la probabilité P pour qu'une particule se trouve dans une région de l'espace de volume Ω est déterminée par [13] :

$$P = \int_{\Omega} |\psi(r)|^2 d^3 r \quad \text{I-3}$$

Pour chaque bande d'indice n , et en sommant sur tous les états k de cette bande, la densité spécifique ρ_n s'écrit comme suit :

$$\rho_n(r) = e \sum_k |\psi_{n,k}(r)|^2 \quad \text{I-4}$$

D'où la densité de charge totale est la sommation sur tous les états k des n bandes du cristal, elle est de la forme :

$$\rho(r) = \sum_n \rho_n(r) \quad \text{I-5}$$

Plusieurs méthodes ont été développées pour le calcul de la densité de charges électroniques, telles que la méthode par échantillonnage des 3360 points de J.P. Walter et al [14], ou bien la méthode de Baldereschi [15] basée sur le point moyen. Dans notre cas, on va se limiter au calcul de la densité par la méthode du pseudopotentiel empirique.

Selon le théorème de Bloch, la fonctions d'onde est de la forme :

$$\psi_{nk}(r) = \sum_G C_n(k) e^{i(k+G)r} \quad \text{I-6}$$

On remplace l'équation I-6 dans l'équation I-4 :

$$\rho(r) = e \sum_{n,k} \psi_{n,k}^*(r) \psi_{n,k}(r) \quad \text{I-7}$$

Après calcul et utilisation de la transformée de Fourier on aboutit au résultat suivant :

$$\rho(G') = e \sum_{G'} |C_{n,G'}(k, G)|^2 \quad \text{I-8}$$

Où :

$C_{n,G'}(k, G)$: Les coefficients de Fourier des pseudo fonctions d'ondes de l'électron de valence $\psi_{nk}(r)$.

I.5. Propriétés optiques des semiconducteurs III-V

La matière est formée d'atomes, souvent regroupés par molécules. L'interaction entre la matière et une onde électromagnétique incidente met en jeu l'excitation des nuages électroniques des atomes. Une description rigoureuse de l'interaction entre le champ électromagnétique et les atomes ou molécules nécessite le formalisme de la mécanique quantique [16,17].

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur se manifeste selon trois processus distincts :

- un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement.
- un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée.

Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.

- un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteur [7].

La connaissance de l'indice de réfraction (n) des semi-conducteurs est indispensable pour des dispositifs tels que des cristaux photoniques, des guides d'ondes, des cellules et des détecteurs d'énergie solaire [18,19]. L'indice (n) est calculé en utilisant différents modèles et en tenant compte de l'effet du désordre.

(i) Modèle de Ravindra et Srivastava [20]

$$n^4 E_g = 108 \quad \text{I-9}$$

(ii) Modèle de Gupta et Ravindra [21]

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad \text{I-10}$$

(iii) Modèle de Hervé et Vandamme [22]

$$n = \left[1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{I-11}$$

(iv) Modèle de Reddy et Anjaneyulu [23]

$$E_g e^n = 36.3 \quad \text{I-12}$$

(v) Modèle de Ravindra [19]

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad \text{I-13}$$

(vi) Modèle de Reddy et Ahammed [24]

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \quad \text{I-14}$$

I.6. Propriétés diélectriques des semiconducteurs III-V

La constante diélectrique ou permittivité, par définition, relie linéairement la polarisation diélectrique et le champ macroscopique induit dans le matériau, c'est-à-dire que les excitations propre d'un cristal, soumis à un champ électrique \vec{E} , sont décrites par la fonction diélectrique complexe $\varepsilon(\omega, \vec{k})$, qui dépend de la fréquence ω et du vecteur d'onde \vec{k} . La relation entre le champ électrique et la polarisation diélectrique est donnée sous la forme:

$$\vec{P} = \varepsilon(\omega)\vec{E} \quad \text{I-15}$$

Où :

\vec{P} : Polarisation diélectrique, ou le moment dipolaire.

Cette fonction diélectrique a des conséquences importantes sur les propriétés physiques des solides, elle intervient dans de nombreux domaines, particulièrement, en optoélectronique, dans l'étude de la propagation des ondes électromagnétique, dans la détermination de l'indice de réfraction, la réflexion et l'absorption de la lumière [6].

Dans les domaines de l'infrarouge, du visible et de l'ultraviolet, le vecteur d'onde \vec{k} du rayonnement est très petit et peut être considéré comme nul, la constante diélectrique sera fonction uniquement de la fréquence, on parlera ainsi de la constante diélectrique statique (ε_s) qui correspond à l'équilibre thermodynamique et pour les hautes fréquences, on parlera de la constante diélectrique (ε_∞).

La constante diélectrique complexe est donnée par la relation de Kramers-Kronig de la forme [25] :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad \text{I-16}$$

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} \quad \text{I-17}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} \quad \text{I-18}$$

Où la partie imaginaire $\varepsilon_2(\omega)$ étant liée au phénomène d'absorption ou d'émission du champ électromagnétique par le matériau et est très petite devant la partie réelle $\varepsilon_1(\omega)$.

Notons que, la constante diélectrique est une grandeur tensorielle (la réponse du matériau peut dépendre de l'orientation des axes cristallographiques du matériau). Dans le cas d'un milieu isotrope ou un cristal cubique, la constante diélectrique $\varepsilon(\omega)$ se réduit à un scalaire [26].

Les deux grandeurs, la constante diélectrique $\varepsilon(\omega)$ et l'indice (n) sont liées par la relation [27-29] :

$$\varepsilon = n^2 \qquad \text{I-19}$$

I.7. Théorie des alliages des semiconducteurs

I.7.1. Introduction

La structure électronique des solides cristallins est basée sur l'hypothèse de la périodicité du cristal par translation du réseau primitif. Que devient la structure de bande si le cristal n'est plus périodique? Soit qu'il contient des impuretés occupant au hasard les sites du réseau où qu'il soit un alliage dont on peut faire varier la concentration relative de ses constituants, il peut être binaire, ternaire, quaternaire suivant qu'il renferme deux, trois ou quatre éléments, la symétrie de translation n'est plus parfaite et le désordre est primordial [6].

Les alliages semi-conducteurs ternaires III-V de la forme $A_x B_{1-x} C$, sont composé de molécules AC avec une fraction molaire (x) et des molécules BC avec une fraction $(1 - x)$ [30]. En raison de la variation de la largeur de bande, ces matériaux sont utilisés dans de nombreuses applications optoélectroniques [12].

Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optiques, électroniques, structurales, etc. ...) des alliages ternaires, telle que l'approximation du cristal cohérent (CPA) [31,32] et l'approche du cristal virtuel (VCA) [33].

Mais l'approche des pseudopotentiels empirique (E.P.M) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA) en tenant compte de l'effet du désordre, reste l'approche la plus simple et offre des résultats compatibles avec les données expérimentales [34,35].

I.7.2. L'approximation du cristal virtuel (VCA)

I.7.2.1. Cas d'un alliage ternaire

Un semi-conducteur ternaire $A_x^{III}B_{1-x}^{III}C^V$ est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations du à la composition x est inévitable. Le désordre peut être dû à la différence des potentiels intrinsèques des atomes A et B qui se substituent mutuellement sur les sites correspondant aux atomes du groupe III dans la blende. La différence entre les potentiels intrinsèques des substituants (A et B) se traduit par des distorsions locales et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenu dépendront de l'amplitude de ces distorsions.

Dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [36,37], on considère que ces distorsions sont suffisamment faibles. Pour préserver la structure de bande du cristal parfait, ce qui permet de définir une nouvelle constante de réseau et un nouveau potentiel cristallin moyen. Ce modèle prévoit une variation linéaire des principaux paramètres dans l'alliage [38].

$$V(x) = xV_{AC} + (1 - x)V_{BC} \quad \text{I-20}$$

I.7.2.2. Propriétés physiques

Les propriétés physiques de cet alliage peuvent être représentées par une simple interpolation analytique des propriétés de ses constituants binaires, plutôt que de traiter cet alliage comme un nouveau composant chimique avec ses propres caractéristiques [38]. Ces propriétés physiques sont notées par $F(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb}$, peuvent être liées linéairement à la concentration stœchiométrique x par la relation suivante:

$$\overline{F(x)}_{Al_xIn_{1-x}Sb} = xF_{AlSb} + (1 - x)F_{InSb} \quad \text{I-21}$$

Avec :

$$F(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb} = \overline{F(x)}_{Al_xIn_{1-x}Sb} + dx(1-x) \tag{I-22}$$

Où :

F : Propriété physique quelconque.

x : Fraction moléculaire (paramètre stœchiométrique).

d : Paramètre de courbure (bowing).

I.7.2.2.1. Constante du réseau de l'alliage ternaire

Expérimentalement, la constante du réseau $a(x)$ de l'alliage ternaire est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires de l'alliage. Cette constante suit la loi de Vegard [39].

$$a(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb} = \overline{a(x)}_{Al_xIn_{1-x}Sb} = xa_{AlSb} + (1-x)a_{InSb} \tag{I-23}$$

Où :

a_{AlSb} : Paramètre du réseau du composé binaire $AlSb$.

a_{InSb} : Paramètre du réseau du composé binaire $InSb$.

Dans ce cas le paramètre de courbure est nul.

La Figure.I.6 présente les différents paramètres du réseau en fonction de la bande interdite et la longueur d'onde pour quelques composés binaires.

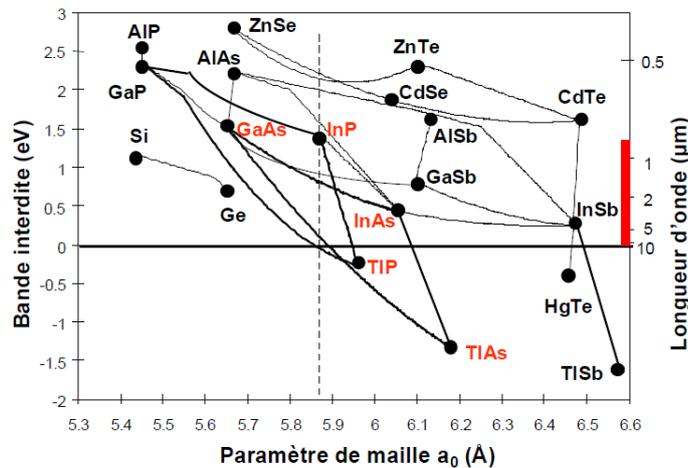


Figure.I.6 .Paramètre de réseau de quelques composés binaires.

I.7.2.2.2. Gap énergétique de l'alliage ternaire

Le gap énergétique $E_g(x)$ de l'alliage ternaire suit une dépendance quadratique, il est de la forme [18,40] :

$$E_g(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb} = xE_{AlSb} + (1-x)E_{InSb} + dx(1-x) \quad \text{I-24}$$

Avec :

E_{AlSb} : Gap du composé $AlSb$.

E_{InSb} : Gap du composé $InSb$.

d : Paramètre de courbure optique.

Le paramètre de courbure optique (d) pour des gaps d'énergie basse est généralement positif [41,42] sauf quelques exceptions pour quelques alliages où on le trouve négatif [43].

Quelques paramètres physiques des alliages changent de l'interpolation linéaire vers l'interpolation quadratique, des équations I-21 et I-22, on a:

$$F(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb} = xF_{AlSb} + (1-x)F_{InSb} + dx(1-x) \quad \text{I-25}$$

En développant l'équation I-25 on a une équation quadratique de la forme:

$$F(x)_{Al_xIn_{1-x}Sb} = A + Bx + Cx^2 \quad \text{I-26}$$

Où :

$$A = F_{InSb}, B = F_{AlSb} - F_{InSb} + d \text{ et } C = -d$$

Le paramètre de non linéarité (C) est appelé paramètre de courbure ou bowing. Sachant que la VCA néglige l'effet de désordre, ce paramètre est très différent de celui donné par l'expérience. Pour palier le de désaccord, le bowing est calculé différemment comme suit [44].

$$C_{exp} = C_i + C_e \quad \text{I-27}$$

Tels que le C_i est le bowing intrinsèque dû à la VCA et C_e est le bowing extrinsèque dû au désordre.

L'inconvénient de la VCA est qu'elle donne un paramètre de courbure du gap fondamental très différent de celui trouvé par l'expérience. Ce désaccord est dû au fait d'avoir négliger l'effet du désordre compositionnel.

I.7.3. L'approximation du cristal virtuel améliorée (VCAA)

La méthode du pseudopotentiel empirique EPM couplée à l'approximation du cristal virtuel VCA pour le calcul des structures de bande des alliages, donne de bon résultat, sauf que la VCA rend les paramètres du bowing du gap principal aussi faibles que ceux des résultats trouvés expérimentalement, pour palier à ce problème, on doit prendre en compte l'effet du désordre dans la VCA. Baldereschi et Maschke en 1975 [43], ont traité l'effet du désordre compositionnel comme une perturbation, mais leur approche de perturbation ne pouvait pas expliquer le paramètre de courbure.

Dans l'approximation du cristal virtuel améliorée VCAA, le potentiel dû au désordre compositionnel est ajouté au potentiel périodique du cristal, le pseudopotentiel du système s'écrit sous la forme [34] :

$$V(r) = V_{VCA}(r) + V_{dés}(r) \quad \text{I-28}$$

$V_{VCA}(r)$: Potentiel périodique du cristal virtuel.

$V_{dés}(r)$: Potentiel non périodique dû au désordre compositionnel.

En considérant tous les sites du cristal étudié, l'expression du potentiel de désordre $V_{dés}(r)$ s'écrit:

$$V_{dés}(r) = -P[x(1-x)]^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad \text{I-29}$$

P est le paramètre d'ajustement produisant le bowing.

Enfin en additionnant ce potentiel du désordre avec le potentiel périodique effectif du cristal, on aura l'expression finale du pseudopotentiel comme suit :

$$V(r) = V_{VCA}(r) - P[x(1-x)]^{1/2} \sum_j \Delta(r - R_j) \quad \text{I-30}$$

Le potentiel de l'alliage, calculé par la VCA auquel on ajoute le potentiel non-périodique du désordre, est donné par [34]:

$$V(r) = xV_{AlSb}(r) + (1-x)V_{InSb}(r) - P[x(1-x)]^{1/2} [[V_{InSb}(r) - V_{AlSb}(r)]] \quad \text{I-31}$$

Ce même potentiel peut s'écrire sous forme de séries de Fourier:

$$V(r) = \sum_G V(G)e^{iGr} \quad \text{I-32}$$

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

$$V(G) = xV_{AlSb}(G) + (1-x)V_{InSb}(G) - P[x(1-x)]^{1/2} [[V_{InSb}(G) - V_{AlSb}(G)]] \quad \text{I-33}$$

$V_{AlSb}(G)$, $V_{InSb}(G)$ sont respectivement les facteurs de formes des potentiels des composés *AlSb* et *InSb*.

I.8. Conclusion

La physique de l'état solide est largement consacrée à l'étude des cristaux et des électrons dans ces cristaux, qui ne sont autre que des réseaux périodiques tridimensionnels d'atomes, cependant il est important de connaître les propriétés structurales, électroniques optiques et diélectriques des semiconducteurs.

Les alliages sont des matériaux ayant une vaste utilisation dans l'industrie des nouvelles technologies, couvrant une gamme allant des alliages métalliques, mis au point dans le but de contrôler les propriétés mécaniques et magnétiques des systèmes, aux cristaux semi-conducteurs mixtes, où les propriétés électroniques sont ajustées par la teneur en un composant de l'alliage.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] S. L. Chuang, « Physics of Optoelectronics Devices », Ed Wiley, *New York* , (1995).
- [2] P.Y. Yu, M. Cardona, « Fundamentals of Semiconductors », Graduate Texts in Physics, Ed Springer-Verlag , Berlin Heidelberg , (2010).
- [3] T.L. Floyd « Electronique : Composants et systèmes d’application », Ed Reynald Goulet inc, (2004).
- [4] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, « Physique des solides », Ed EDP Science, France, (2002).
- [5] F. Lévy, « Physique et technologie des semiconducteurs », Ed PPUR presses polytechniques, (1995).
- [6] C. Kittel, « Physique de l’état solide », Ed Dunod, Paris,(1998).
- [7] H. Mathieu, H. Fanet «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», Ed Dunod, Paris, (2009).
- [8] J. Deferne, A. Gassener, « Le monde étrange des atomes », Ed La Nacelle, France, (1994).
- [9] D. Bordel, thèse Doctorat, Univ Lyon, (2007).
- [10] N. Bouarissa, R.N. West, H. Aourag, *Materials Chemistry and Physics*. 47 (1997) 23-30.
- [11] M.S. Al-Assiri, N. Bouarissa, *Superlattices and Microstructures*. 59 (2013) 144.
- [12] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285.
- [13] R. Omnès, « Comprendre la mécanique quantique », Ed EDP sciences, France (1999).
- [14] J. P. walter and M. L. Cohen, *Phys Rev. B* 4 (1971) 1877.
- [15] A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* 7 (1973) 5212.
- [16] G. Grynberg, A. Aspect, and C. Fabre, « Introduction aux lasers et à l’optique quantique », Ed Ellipses, Paris, (1997).
- [17] J.L. Coutaz « Optoélectronique » Ed EDP Sciences, France, (2008).
- [18] S. Adachi, *J, Appl. Phys.* 61 (1987) 4869.

- [19] N. M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [20] N. M. Ravindra, V. K. Srivastava, *Infrared Phys.* 19 (1979) 603.
- [21] V. P. Gupta, N. M. Ravindra, *Phys. Stat. Sol. B* 100 (1980) 715.
- [22] P. Hervé, L. K. J. Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [23] R. R. Reddy, S. Anjaneyulu, *Phys. Stat. Sol. B* 174 (1992) k91.
- [24] R. R. Reddy, Y. N. Ahammed, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825.
- [25] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, «*Electronic Structure and Optical properties of Semiconductors* », Ed Springer Series in Solide-State Sciences, Berlin, (1989).
- [26] Y. Farge, M. Fontana, «*Perturbations électroniques et vibrationnelles localisées dans les solides ioniques* ». Ed Masson, Paris, (1974).
- [27] C. F. Bohren, D. R. Huffman, «*Absorption and Scattering of light by small particles* », Ed Wiley, New-York, (1983).
- [28] N. W. Ashcroft, D. Mermin,«*Solid state physic s*», International Edition, Saunders College, Philadelphie, (1976).
- [29] M. Brousseau, «*Physique du solide* », Ed Masson, Paris, (1992).
- [30] N. Bouarissa, *Matter. Chem. Phys.* 72 (2001) 387.
- [31] A. B. Chen, A. Sher, *Phys. Rev. B* 19 (1979) 3057.
- [32] V. B. Gera, R. Gupta, K.T. Jain, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 9657.
- [33] M. Jaros, *Rep. Prog. Phys.* 48 (1985) 1091.
- [34] S. J. Lee, T. S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, *J. Phys. Condens. Matter* 2 (1990) 3253.
- [35] N. Bouarissa, *Superlatt. Microstruct.* 26 (1999) 279.
- [36] C. Nordheim, *Phys. K* 9 (1931) 607.
- [37] R. Parmenter, *Phys. Rev.* 97 (1955) 587.
- [38] J. E. Bernard and A. Zunger, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 3199.
- [39] L. Vegard, *Z. Phys.* 5 (1921) 17.

- [40] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Journal of applied physics. 89 (2001) 11.
- [41] D. Richardson, J. Phys.Solid Stat. Phys. 5 (1972) 27.
- [42] O. Madelung, «Phys of III-V compound », Ed Wiley, New-York (1964).
- [43] A. Baldereschi and K. Maschke, Solid Stat. Commun. 16 (1975) 99.
- [44] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B 1 (1970) 3351.

Chapitre II

METHODES DE CALCUL DES STRUCTURES DE BANDES ELECTRONIQUES



II.1. Introduction

Le génie de Planck et d'Einstein, précurseurs de la physique quantique, réside dans le fait qu'ils ont osé abandonner la physique classique, celle de Newton et de Maxwell, qui ne fonctionnent pas à l'extrême petitesse des dimensions atomiques, et de l'avoir remplacée par une physique aussi étrange que déroutante. Cette physique a permis la description de la structure des atomes et des molécules, ainsi que l'interprétation des phénomènes qui leurs sont liés individuellement, et ceci ne peut être fait qu'à travers la résolution de l'équation de Schrödinger.

II.2. L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin

Après les postulats de l'existence d'une onde associée à chaque particule et de l'expression de sa longueur d'onde. L'équation de Schrödinger constitue le troisième postulat fondamental de la mécanique quantique [1].

En 1926, guidé par les idées de L. De Broglie, Erwin Schrödinger a proposé une équation dynamique à l'état stationnaire d'un système quantique appelé équation de Schrödinger. Pour le cas d'un cristal, cette équation s'écrit sous la forme suivante:

$$\hat{H}(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots)\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) = E\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \quad \text{II-1}$$

Où :

\hat{H} : L'opérateur hamiltonien du cristal.

ψ : Fonction d'onde du cristal.

E : L'énergie totale du cristal.

r_i ($i \dots N_e$) représente les coordonnées des électrons, N_e est le nombre d'électrons dans le système.

R_i ($i \dots N_\alpha$) représente les coordonnées des noyaux, N_α est le nombre d'atomes dans le système.

Un cristal est une association de particules élémentaires, légères tels que les électrons et de particules élémentaires lourdes, tels que les noyaux, qui sont en interactions permanentes entre eux, sous l'action des forces électrostatiques attractives et répulsives. On définit l'Hamiltonien comme étant la somme de toutes les énergies cinétiques et potentielles présentent dans un cristal [2,3].

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} \quad \text{II-2}$$

Avec :

L'énergie cinétique des électrons :

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{T}_i = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad \text{II-3}$$

Où :

N_e : Nombre total des électrons.

m : Masse de l'électron.

L'énergie cinétique des noyaux.

$$\hat{T}_n = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{T}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i \quad \text{II-4}$$

Où :

N_α : Nombre total des noyaux.

M : Masse du noyau.

L'énergie d'interaction entre un électron i et électron j

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} \quad \text{II-5}$$

L'énergie d'interaction entre un noyau α et un noyau β

$$\hat{V}_{nn} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{V}_{\alpha\beta} \quad \text{II-6}$$

$Z_{\alpha\beta}$: charges des noyaux α et β .

L'énergie d'interaction entre un noyau α et un électron i

$$\hat{V}_{en} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{V}_{i\alpha} \quad \text{II-7}$$

En introduisant les équations II-3, II-4, II-5, II-6 et II-7 dans l'équation II-1, l'Hamiltonien aura la forme suivante :

$$(\hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn})\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) = E\psi(r_1, r_2 \dots R_1, R_2 \dots) \quad \text{II-8}$$

L'équation II-8, contient un grand nombre de particules et de ce fait il est difficile de résoudre une telle équation à N éléments, des approximations s'imposent pour simplifier le problème.

II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer

En 1929, Max Born et Julius Robert Oppenheimer [4] ont stipulé l'hypothèse de découplage de l'équation aux valeurs propres des noyaux de celle des électrons d'où l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme d'un système à deux équations indépendantes :

$$(\hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en})\psi_e(R, r) = E_e\psi_e(R, r) \quad \text{II-9}$$

$$(\hat{T}_n + \hat{V}_{nn})\psi_n(R) = E\psi_n(R) \quad \text{II-10}$$

En s'inspirant de l'idée de l'étude du mouvement de l'électron et du noyau, sachant que la masse d'un noyau est presque 1836 fois plus grande que la masse d'un électron, d'où on peut considérer le noyau comme immobile, ce qui rend sa vitesse presque négligeable et par conséquent son énergie cinétique \hat{T}_n nulle.

L'énergie de répulsion Coulombienne des noyaux entre eux \hat{V}_{nn} est considérée comme un terme constant, du fait qu'il ne dépend que de la distance des noyaux qui est traitée comme un paramètre constant dans l'approximation de Born-Oppenheimer, et par un choix conventionnel, \hat{V}_{nn} est considéré nul.

L'équation électronique de Schrödinger a la forme :

$$\hat{H}_e\psi_e(R, r) = E_e\psi_e(R, r) \quad \text{II-11}$$

Où :

E_e : L'énergie des électrons qui se déplacent dans le champ électrique créée par les noyaux fixes.

Dans l'Hamiltonien il ne reste que les termes électroniques :

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} \quad \text{II-12}$$

La fonction d'onde des électrons ψ_e dépend des coordonnées des électrons et celles des noyaux immobiles.

L'étude du mouvement des électrons, en fixant la position des noyaux est une bonne approximation, elle réduit ainsi un grand nombre de variables, mais la résolution de l'équation de Schrödinger reste toujours complexe à cause des interactions électrons-électrons.

Une deuxième approximation s'impose, d'elle-même, c'est l'approximation du champ autocohérent.

II.2.2. Approximation du champ autocohérent

II.2.2.1. Approximation de Hartree

Le modèle de Hartree se base sur une expression particulière des solutions, en effet, on va supposer que les électrons sont indépendants, ceci se traduit par [12] :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \dots \psi(r_n) \quad \text{II-13}$$

Où :

r_i : Position des électrons i avec $i=1 \dots n$.

Tenant compte de cette hypothèse, et pour contourner la complexité d'un système poly-électronique à un système mono-électronique, on considère que chaque électrons se déplace dans le champ moyen des autres électrons et noyaux.

L'équation de Schrödinger à une seule particule (électron) est donnée comme suit :

$$\hat{H}_i \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad \text{II-14}$$

Avec :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{ext}}(r) + V_i(r) \quad \text{II-15}$$

Où :

$V_{\text{ext}}(r)$: Potentiel d'interaction électron-noyau.

$V_i(r)$: Potentiel de Hartree pour le $i^{\text{ème}}$ électron, qui a la forme :

$$\widehat{V}_i(r) = \frac{-e \int \rho_i(r')}{|r - r'|} d^3r \quad \text{II-16}$$

La densité des électrons $\rho_i(r)$ étant donnée par :

$$\rho_i = -e \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} |\psi_j(r)|^2 \quad \text{II-17}$$

La somme est faite sur les N_e états mono-électroniques.

On remplace II-17 dans I-16 :

$$\widehat{V}_i(r) = e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r - r'|} d^3r \quad \text{II-18}$$

L'équation de Schrödinger aura la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r - r'|} d^3r + \widehat{V}_{\text{ext}}(r) \right] \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad \text{II-19}$$

L'équation II-19 est appelée équation à une particule de Hartree.

L'inconvénient de cette méthode, c'est qu'elle ne tient pas compte de l'antisymétrie de la fonction d'onde.

II.2.2.2. Approximation de Hartree-Fock

Pour pallier le problème de l'antisymétrie imposant à la fonction d'onde ψ de changer de signe lors de la permutation de deux électrons, l'approximation Hartree-Fock développe la fonction d'onde sous forme d'un déterminant de Slater qui vérifie

le principe de l'exclusion de Pauli [6].

$$\psi(r_1\sigma_1, \dots, r_{N_e}\sigma_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{bmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \dots & \psi(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \\ \psi_{N_e}(r_1\sigma_1) & \dots & \psi_{N_e}(r_{N_e}\sigma_{N_e}) \end{bmatrix} \quad \text{II-20}$$

Où :

σ_i : représente le spin

En injectant l'équation I-20 dans l'équation de Schrödinger on a :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N_e} \int \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r-r'|} d^3r - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \delta_{\sigma_i\sigma_j} e^2 \int \frac{|\psi_j^*(r)\psi_i(r)|}{|r-r'|} d^3r + \hat{V}_{\text{ext}}(r) \right] \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad \text{II-21}$$

Où :

$\delta_{\sigma_i\sigma_j}$: Symbole de Kronecker

L'équation II-21 représente l'équation de Hartree-Fock à une particule, où on voit apparaître dans L'Hamiltonien le terme de Hartree et le terme résultant de l'application du principe de l'exclusion de Pauli (terme d'échange), ce qui rend les calculs plus complexes.

II.2.2.3. Approximation de Hartree-Fock-Slater

Tenant compte du caractère non local du potentiel d'échange présent dans l'approximation de Hartree-Fock, en 1951, Slater [7] propose un potentiel d'échange local de la forme :

$$V(r) = -6 \alpha \left(\frac{3\rho(r)}{4\pi} \right)^{1/3} \quad \text{II-22}$$

Avec :

α : Paramètre sans dimension.

Malgré la simplicité du potentiel par rapport à celui de Hartree-Fock, la méthode ne conduit pas à des résultats satisfaisants.

II.3. Les méthodes de calcul de la structure de bande électronique

II.3.1. Méthodes de calcul des électrons libres

C'est un modèle développé par Arnold Sommerfeld [8], il considère que le potentiel dans l'équation de Schrödinger est nul, du fait que les électrons n'interagissent pas entre eux, les électrons sont libres, donc, tous les niveaux d'énergies leurs sont permis, ces niveaux forment une bande continue. L'énergie totale du système ne comprend que l'énergie cinétique des électrons, leur énergie potentielle est négligée. On se basant sur cette hypothèse, l'équation de Schrödinger d'une particule est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \quad \text{II-23}$$

La fonction d'onde satisfaisant une telle équation à la forme d'une onde progressive de la forme :

$$\psi_k = e^{ikr} \quad \text{II-24}$$

Cette approche permet d'expliquer les propriétés physiques des métaux, mais elle présente des limites pour la distinction entre isolants et semi-conducteurs.

II.3.2. Méthodes de calcul des électrons presque libres

Dans cette méthode, les électrons sont presque libres, ce qui revient à dire, qu'ils sont faiblement liés, donc, il suffit d'une faible énergie pour qu'ils se déplacent à la

bande de conduction. Ceci se traduit aussi par, l'existence d'un potentiel périodique du cristal qui est faible, et qui va être considéré comme perturbation périodique du réseau.

L'Hamiltonien aura la forme :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + W(r) \quad \text{II-25}$$

$W(r)$: Potentiel de perturbation périodique du cristal.

La différence entre la méthode des électrons libres et la méthode des électrons presque libres réside dans l'ajout d'un potentiel de perturbation dans l'Hamiltonien, donc, pour un traitement efficace, on utilise la théorie de perturbation du premier et second degré.

La théorie de perturbation permet de déterminer les corrections portées sur l'énergie $E^{(0)}$ et la fonction $\psi^{(0)}$ d'un système d'électrons libres sur lequel est introduite une perturbation [9].

$$E(k) = E^{(0)}(k) + E^{(1)}(k) + E^{(2)}(k) \quad \text{II-26}$$

$$\psi(r) = \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) + \psi^{(2)}(r) \quad \text{II-27}$$

Avec :

$$E^{(1)}(k) = \langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle \quad \text{II-28}$$

$$E^{(2)}(k) = \sum_{k \neq k'} \frac{|\langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad \text{II-29}$$

L'équation de Schrödinger d'une particule libre est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^{(0)}(r) = E^{(0)}\psi(r) \quad \text{II-30}$$

A l'approximation zéro, l'énergie et la fonction d'onde ont la forme :

$$E^{(0)}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{II-31}$$

$$\psi^{(0)}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \quad \text{II-32}$$

Où :

V : Volume total du cristal.

Les fonctions $\psi^{(0)}(r)$ sont orthonormées. Le potentiel périodique du cristal V(r) peut se mettre sous la forme d'une série de Fourier :

$$V(r) = \sum_G V(G) e^{iG \frac{2\pi r}{a}} \quad \text{II-33}$$

On remplace l'équation II-32 et II-33 dans II-28

$$E^{(1)}(k) = \int \psi_{k'}^{(0)} V(r) \psi_k^{(0)} dr = W_{kk'} \quad \text{II-34}$$

$$E^{(1)}(k) = \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq \frac{n\pi}{a} \\ \pm V_G & \text{pour } k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \quad \text{II-35}$$

Le même travail se fait pour l'équation II-29 :

$$E^{(2)}(k) = \sum_{k \neq k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad \text{II-36}$$

Ainsi l'énergie totale du système aura la forme :

$$E(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + W_{kk'} + \sum_{k \neq k'} \frac{|W_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad \text{II-37}$$

Et la correction apportée à l'état de la particule dans le cadre du traitement de la perturbation est donnée par :

$$\psi(r) = \psi_k^{(0)}(r) + \sum_{k \neq k'} \frac{|\langle \psi_{k'}^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \psi_k^{(0)}(r) \quad \text{II-38}$$

II.3.3. Méthodes de calcul des ondes planes

Pour être conforme avec la périodicité du réseau cristallin, on choisit une forme particulière de la fonction d'onde établie par Bloch :

$$\psi_k(r) = U_k(r) e^{ikr} \quad \text{II-39}$$

$$U_k(r) = \sum_G C_G e^{iGr} \quad \text{II-40}$$

Avec :

G : Vecteur du réseau réciproque défini par $\vec{G} \cdot \vec{R} = \frac{2\pi}{m}$

m : Entier naturel

De même le potentiel périodique du cristal $V(r)$ peut être décomposé en série de Fourier [10] :

$$V(r) = \sum_G V(G) e^{iGr} \quad \text{II-41}$$

En remplaçant les équations II-39 et II-41 dans l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad \text{II-42}$$

En multipliant par $e^{ik'r}$ et en intégrant sur d^3r on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} C(k')k'^2 + \sum_G C(k' - G)V(G) = E(k)C(k) \quad \text{II-43}$$

En supposant que les $V(G)$ sont connus, on peut calculer les $E(k)$ puis déterminer les $C(k')$.

II.3.4. Méthode de calcul des ondes planes augmentées

Pour pallier les problèmes des conditions aux limites de la méthode cellulaire aux frontières de la maille élémentaire, la méthode de calcul des ondes planes augmentées a été proposée. Sachant que le solide est constitué par un ensemble d'atomes et chaque atome est constitué par un cœur sphérique de rayon r_0 , où règne un potentiel sphérique et une région interstitielle où le potentiel est constant. Ce type de potentiel est appelé le potentiel de muffin-tin (nid d'abeille) [11,12] qui a la forme :

$$V(r) = \begin{cases} U(r - R) & \text{si } |r - R| < r_0 \\ U(r) = 0 & \text{si } |r - R| > r_0 \end{cases} \quad \text{II-44}$$

C'est sur cette base que Slater [11] propose $\psi_k(r)$ (l'état du système) comme superposition d'un nombre fini d'onde plane dans la région interstitielle et de fonction d'onde sphérique à l'intérieur, de telles fonctions sont appelées onde planes augmentées, elles sont continues aux limites de la sphère. La fonction d'onde à la forme :

$$\varphi_k(r) = \theta(r - r_0)Ae^{ikr} + \sum_n \theta(r_0 - r)\psi_n^a(r)A_n \quad \text{II-45}$$

L'équation I-45 est appelé fonction d'onde d'APW (Augmented Plane Wave).

Où la fonction heavy side est donnée par :

$$\theta(r - r_0) = \begin{cases} 1 & \text{si } r > r_0 \\ 0 & \text{si } r < r_0 \end{cases} \quad \text{II-46}$$

La forme d'onde $\psi_k(r)$ est:

$$\psi_k(r) = \sum_k C_k \varphi_{k+K'}(r) \quad \text{II-47}$$

Avec :

K : vecteur du réseau réciproque.

II.3.5. Méthodes de calcul des ondes planes orthogonales

Cette méthode a été proposée par Herring en 1940 [13]. En se basant sur le fait qu'approximer les fonctions d'ondes par des fonctions d'ondes planes, n'est pas une bonne solution, et du fait que dans la région du cœur, la fonction d'onde oscille rapidement, il propose des ondes planes orthogonales au niveau du cœur et qui ont la forme :

$$\psi_k(r) = e^{ikr} + \sum_C b_n \varphi_k^C(r) \quad \text{II-48}$$

Où :

C : Définit le cœur.

b_n : Constante calculée par l'orthogonalité de $\psi_k(r)$ avec chaque niveau du cœur.

$\varphi_k^C(r)$: Fonction d'onde atomique.

II.3.6. Méthodes des pseudopotentiels

La méthode du pseudopotentiel, comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel. L'effet d'orthogonalité aux états de cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur. Le pseudopotentiel est alors lentement variable et se prête bien à une approche du problème en termes de perturbation [14].

II.4. Conclusion

La théorie quantique des solides, a pour objet l'étude de leurs propriétés physiques à partir de leurs constituants microscopiques. Il s'agit donc de décrire et de prédire les propriétés d'un solide à partir de sa structure microscopique, et des interactions entre particules qui le composent. Dans ce chapitre on a présenté les approximations de base, en passant par la première approximation dite de Born-Oppenheimer qui consiste à séparer l'équation de Schrödinger en deux équations aux valeurs propre des électrons et des noyaux. Tenant compte du fait que les noyaux sont fixes vue leur masse élevée par rapport à celle des électrons.

Une deuxième approximation s'impose, c'est l'approximation du champ autocohérent, vu le grand nombre de particules à traiter (N électrons), cette approximation nous permet de simplifier le problème à un électron qui évolue dans un potentiel moyen résultant des autres électrons. Ensuite, on a exposé quelques méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger, telle que la méthode de l'électron libre, méthode des électrons presque libres et la résolution par la méthode des ondes planes augmentées et orthogonales.

Dans le chapitre suivant, on fera un gros zoom sur la méthode des pseudopotentiels empirique qui s'avère très efficace pour déterminer et étudier les propriétés électroniques des structures cristallines Zinc blende.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] J. Hladik, M Chrysos, P. E. Hladik, L. Ancarani, « Mécanique quantique : Atomes et noyaux Applications technologiques », Ed Dunod, Paris,(2009).
- [2] C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed Dunod, Paris, (2001).
- [3] D. J. Chadi, M. L. Cohen, Phys. Rev. B 8 (1973) 5747.
- [4] M. Born , J.R. Oppenheimer, Ann. Phys. 87 (1927) 457.
- [5] D.R.Hartree, Proc.Cambridge Phil. Soc. 24 (1928) 89.
- [6] J.A Pople, R.K. Nesbet, J. Chem. Phys. 22 (1954) 571.
- [7] J.C.Slater, Phys. Rev 81 (1951) 385.
- [8] A. Sommerfeld, Z. Phys. 47 (1928) 1.
- [9] S. Bounab, Thèse de Magister, Univ de Constantine, Algérie, (2002).
- [10] P. Kiréev, « La physique des semiconducteurs », Ed Mir. Moscou, (1975).
- [11] J. C. Slater Phys. Rev. 51 (1937) 846.
- [12] N. W . Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics, Ed Holt, Rinehart and Winston, Philadelphia, (1976).
- [13] C. Herring, Phys. Rev. 57 (1940) 1169.
- [14] H. Mathieu, H. Fanet, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», Ed Dunod, Paris, (2009).

Chapitre III

METHODES DES PSEUDOPOTENTIELS



III.1. Introduction

Au vu de ses succès dans la description et la prédiction des propriétés des matériaux, l'approche des pseudopotentiels est considérée comme une révolution dans la théorie des structures de bande.

Le concept de pseudopotentiel a été introduit dans les années 1930 par Fermi pour l'étude des niveaux atomiques [1], en 1940 Conyers Herring propose la méthode des ondes planes orthogonales [2]. La méthode permet de mieux comprendre la nature de structure de bande des matériaux semi-conducteurs 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 [3]. C'est par une reformulation de la méthode des ondes planes orthogonales d'Herring, qu'en 1959 Phillips et Kleinman développèrent la première approche formelle (non empirique) de la notion de pseudopotentiel [4].

III.2. Principe de la méthode des pseudopotentiels

Dès le XIX^{ème} siècle, les physiciens ont su démontrer qu'une grande partie des propriétés physique et chimiques des matériaux ne dépendent que du comportement des électrons de valence. En effet, les orbitales de cœur sont les plus basses en énergie, sont localisées près du noyau, sont très peu sensible à l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. En outre, elles sont difficiles à représenter sur une base d'ondes planes car elles possèdent généralement de fortes oscillations autour des noyaux. En revanche, les orbitales de valence sont peu localisées et s'étendent donc loin du noyau. Ce sont elles qui déterminent au premier ordre les propriétés physico-chimiques [5]. C'est sur cette propriété que se base l'approximation dite cœur gelé.

Cette méthode remplace l'effet des électrons du cœur par un pseudopotentiel effectif. Le système que l'on traite à présent n'est plus le système {noyau nu + électrons} mais {[noyau nu + électrons de cœur] + électrons de valence} qui est équivalente à {"ions" + électrons de valence}[5].

La méthode des ondes planes orthogonales est considérée comme l'ancêtre directe de la notion du pseudopotentiel. La méthode du pseudopotentiel de Phillips-Kleinman est la première à montrer que la condition d'orthogonalité dans la région de cœur entre les états de cœur et de valence agit comme potentiel répulsif qui tend à s'opposer au potentiel nucléaire attractif ressenti par les électrons de valence, ainsi, par effet d'annulation on obtient un potentiel faiblement répulsif ou pseudopotentiel [4,6]. Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres pour résoudre l'équation de Schrödinger.

L'avantage de cette approximation est que le nombre d'électrons apparaissant de manière explicite dans les calculs s'en trouve fortement réduit, seuls les électrons de valence sont pris en compte.

III.3. Théorie de Phillips et Kleinman

Cette théorie consiste donc à remplacer le terme de répulsion cœur-valence (qui est une interaction non locale) par un potentiel effectif local capable de prendre en compte la condition d'orthogonalité entre le cœur et la valence afin d'empêcher l'effondrement des orbitales de valence dans la région spatiale de cœur, mais sans explicitement l'imposer [7,8].

La fonction d'onde orthogonale est la somme d'une onde plane et les états atomiques occupés du cœur.

$$\psi_k(r) = \varphi_k^V(r) + \sum_C \mu_C \varphi_k^C(r) \quad \text{III-1}$$

La contrainte d'orthogonalité entre le cœur et la fonction d'onde est défini quant à elle par :

$$\langle \varphi_k^C | \psi_k(r) \rangle = 0 \quad \text{III-2}$$

La constante μ_C de l'équation III-1 est calculée par la condition d'orthogonalité [9].

$$\mu_C = -\langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle = - \int \varphi_k^{C*} e^{ikr} d^3r \quad \text{III-3}$$

On remplace μ_C dans l'équation III-1

$$\psi_k(r) = \varphi_k^V(r) - \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) \quad \text{III-4}$$

La fonction $\psi_k(r)$ est solution de l'équation de Schrödinger.

$$\hat{H}_{PK} \psi(r) = E \psi(r) \quad \text{III-5}$$

Où :

\hat{H}_{PK} : Hamiltonien de Phillips-Kleinman dont l'expression sera explicitée plus loin.

En remplaçant l'équation III-4 dans l'équation III-5 :

$$\hat{H}_{PK} \varphi_k^V(r) - \hat{H}_{PK} \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) = E_k \left[\varphi_k^V(r) - \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) \right] \quad \text{III-6}$$

Si on applique l'Hamiltonien \hat{H}_{PK} sur une fonction de valence et une fonction de cœur, on peut écrire les équations aux valeurs propres suivantes :

$$\hat{H}_{PK} | \varphi_k^V(r) \rangle = E_V | \varphi_k^V(r) \rangle \quad \text{III-7}$$

$$\hat{H}_{PK} | \varphi_k^C(r) \rangle = E_C | \varphi_k^C(r) \rangle \quad \text{III-8}$$

Où E_V et E_C sont les énergies de valence et de cœur respectivement

Ainsi, il en découle que :

$$\hat{H}_{PK} \varphi_k^V(r) - E_k \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) = E_k \varphi_k^V(r) - E_k \sum_C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) \quad \text{III-9}$$

$$\hat{H}_{PK}\varphi_k^V(r) - \sum_C E_k^C \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) + \sum_C E_k \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-10}$$

$$\hat{H}_{PK}\varphi_k^V(r) + \sum_C (E_k - E_k^C) \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-11}$$

On pose :

$$\sum_C (E_k - E_k^C) \langle \varphi_k^C | \varphi_k^V \rangle \varphi_k^C(r) = V_R \varphi_k^V(r) \quad \text{III-12}$$

Où :

V_R : Potentiel répulsif positif

$$\hat{H}_{PK}\varphi_k^V(r) + V_R \varphi_k^V(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-13}$$

Ainsi l'équation III-12 aura la forme :

$$(\hat{H}_{PK} + V_R)\varphi_k^V(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-14}$$

Avec :

$$\hat{H}_{PK} = -\frac{p^2}{2m} + V_C \quad \text{III-15}$$

Où :

V_C : Potentiel attractif du cœur.

D'où l'équation III-14 s'écrit comme suit :

$$\left(-\frac{p^2}{2m} + V_C(r) + V_R(r) \right) \varphi_k^V(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-16}$$

On pose $V_{PS}(r) = V_C + V_R$ qui représente le pseudopotentiel, l'équation III-16 sera reformulée de la manière suivante :

$$\left[-\frac{p^2}{2m} + V_{PS}(r) \right] \varphi_k^V(r) = E_k \varphi_k^V(r) \quad \text{III-17}$$

En posant, $V_{PS}(r) = V_C + V_R$, comme étant la somme du potentiel ionique du cœur V_C et du potentiel répulsif positif V_R , cette sommation des deux quantités l'une positive et l'autre négative nous donne un faible potentiel d'où l'appellation du pseudopotentiel, cette approche réduit au maximum les calculs en outils informatique.

La résolution de l'équation de Schrödinger III-17 sera traitée par la méthode des électrons presque libres, du fait que le pseudopotentiel $V_{PS}(r)$ sera considéré comme une perturbation du système.

III.4. Modèle de potentiel

D'après l'équation III-17 l'Hamiltonien de Phillips-Kleinman d'un électron dans un cristal est une sommation de son énergie cinétique et de son pseudopotentiel.

$$\hat{H}_{PK} = -\frac{p^2}{2m} + V_{PS}(r) \quad \text{III-18}$$

Plusieurs forme de potentiel ont été proposé on a le modèle de Heine Abarenkov, le modèle d'Ashcroft, le modèle de Shaw et le modèle de Hallers. On va uniquement présenter deux modèles, celui d' Heine-Abarenkov et d'Ashcroft.

III.4.1. Modèle de potentiel de Heine-Abarenkov

Heine et Abarenkov ont choisi un rayon de $R_M > R_C$ (rayon du cœur ionique) au delà duquel le potentiel est purement Coulombien. A l'intérieur de la sphère de rayon R_M , il est supposé constant. L'expression du modèle de potentiel de Heine et Abarenkov pour l'ion libre comprend deux termes [10], un terme local de la forme :

$$V_{PS}^L(r) \begin{cases} 0 & r < R_M \\ -\frac{Ze}{r} & r > R_M \end{cases} \quad \text{III-19}$$

Où :

Z : Nombre d'électrons de valence.

Et un terme non local ayant pour forme

$$V_{PS}^{NL}(r) \begin{cases} -\sum_{l=0}^{\infty} A_l(r, E) f_l(r) P_l & < R_M \\ 0 & r > R_M \end{cases} \quad \text{III-20}$$

Où :

$A_l(r, E)$: Energie des états profonds.

P_l : Opérateur de projection qui donne la composante au nombre quantique l , dans l'espace des harmoniques sphériques.

$f_l(r)$: Fonction qui représente l'effet de l'état du cœur possédant plusieurs formes telle que la forme gaussienne, carré et la forme d'Ashcroft. Les paramètres $A_l(r, E)$ doivent être ajustés de façon à permettre au modèle de potentiel d'avoir le même spectre d'énergie que le vrai potentiel. Ceci est réalisé en appliquant la méthode du défaut quantique [11].

III.4.2. Modèle de potentiel d'Ashcroft

Ashcroft [12] a repris le modèle de potentiel de Heine-Abarenkov avec une forme plus simple. Son modèle, pour lequel l'interaction est purement Coulombienne à l'extérieur du cœur et nulle à l'intérieur, son modèle possède un seul paramètre le rayon du cœur R_C .

$$V_{PS}(r) \begin{cases} 0 & r < R_C \\ -\frac{Ze}{r} & r > R_C \end{cases} \quad \text{III-21}$$

Le modèle de potentiel de Heine-Abarenkov est ainsi simplifié par Ashcroft, il considère que toutes constantes A_l à l'intérieur du cœur ionique sont nulles, cependant c'est un modèle local et ne dépend pas de l'énergie.

III. 5. Méthode empirique du pseudopotentiel (EPM)

Les pseudopotentiels sont parfois qualifiés d'empiriques, ce qui veut dire qu'ils ne sont pas obtenus par calcul mais paramétrés pour reproduire aux mieux des résultats expérimentaux de références [13]. L'approche empirique du pseudo potentiel, est une méthode qui se base, pour le calcul de la structure de bande, sur l'ajustement théorique des paramètres du pseudo potentiel, appelé les facteurs de forme $V^S(G)$ et $V^A(G)$. Les valeurs de $V(G)$ des éléments sont classifiées et représentées graphiquement dans l'article de Cohen et Heine [14]. Ces derniers seront paramétrés pour reproduire au mieux les résultats expérimentaux.

Le concept de pseudo potentiel empirique fût utilisé pour la première fois pour le calcul des niveaux énergétiques des métaux alcalins [15,16]. Mais l'approche a englobé avec succès une douzaine de semi-conducteurs de structure Diamant et Zinc blende, tels que le silicium et le germanium [3]. Il existe deux approximations Empiriques, locales et non locales.

III.5.1. Approximation Empirique locale

Cette approximation a été largement utilisée depuis son introduction par Chelikowsky et Cohen [17,18]. L'Hamiltonien total du cristal peut être écrit comme une sommation des Hamiltoniens local et non local, en plus de l'Hamiltonien spin-orbit.

$$\hat{H}_{PK} = \hat{H}_{PK}^L + \hat{H}_{PK}^{NL} + \hat{H}_{PK}^{SP} \quad \text{III-22}$$

Où l'Hamiltonien local \hat{H}_{PK}^L vérifie l'équation de Schrödinger à un électron de valence.

L'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\hat{H}_{PK}^L \psi_k(r) = E_k \psi(r) \quad \text{III-23}$$

Où :

$$\hat{H}_{PK}^L = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{PS}(r) \quad \text{II-24}$$

L'équation II-23 aura la forme:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{PS}(r) \right] \psi_k(r) = E_k \psi(r) \quad \text{III-25}$$

Avec :

V_{PS} : Pseudopotentiel périodique, donc il satisfait la relation $V_{PS}(r) = V_{PS}(r + R)$

R : Vecteur du réseau direct.

Selon le théorème de Bloch [19] qui donne les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique. La fonction d'onde de Bloch est de la forme d'un produit d'un facteur périodique $U_i(r)$ par une onde plane.

$$\psi_k(r) = U_i(r)e^{ikr} \quad \text{III-26}$$

Où :

$U_i(r)$: Fonction périodique qui a la périodicité du réseau cristallin et qui a la forme :

$$U_i(r) = \sum_G U_{k,G} e^{iGr} \quad \text{III-27}$$

Où :

k : Vecteur d'onde.

G : Vecteur du réseau réciproque.

En remplaçant l'équation III-27 dans l'équation III-26, la fonction d'onde s'écrit comme suit :

$$\psi_k(r) = \sum_G U_{k,G} e^{i(k+G)r} = \sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} \quad \text{III-28}$$

On substitue l'équation III-28 dans l'équation III-25 :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left[\sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} \right] + V_{PS}(r) \sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} = E_k \sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} \quad \text{III-29}$$

En développant le 1^{er} terme de l'équation III-29, on aura :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_G U_{k+G} [\nabla^2 e^{i(k+G)r}] = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_G U_{k+G} [|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 e^{i(k+G)r}] \quad \text{III-30}$$

En remplace l'équation III-30 dans l'équation III-29 :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} e^{i(k+G)r} + V_{PS}(r) \sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} = E_k \sum_G U_{k+G} e^{i(k+G)r} \quad \text{III-31}$$

En multipliant les deux côtés de l'équation III-31 par $e^{-i(k+G)r}$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} e^{i(G-G')r} + V_{PS}(r) \sum_G U_{k+G} e^{i(G-G')r} = E_k \sum_G U_{k+G} e^{i(G-G')r} \quad \text{III-32}$$

En intégrant sur tout le volume du cristal, le premier terme à l'extrême gauche de l'équation III-32 s'écrit:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} e^{i(G-G')r} d^3r = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(G-G')r} d^3r \quad \text{III-33}$$

On passe à la transformée de Fourier :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(G-G')r} d^3r = (2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} \delta(G-G') \quad \text{III-34}$$

$$(2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m} \sum_G |k+G|^2 U_{k+G} \delta(G-G') = (2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m} |k+G'|^2 U_{k+G'} \quad \text{III-35}$$

Le deuxième terme à gauche de l'équation III-32 après intégration sur tout le volume du cristal :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V_{PS}(r) \sum_G U_{k+G} e^{i(G-G')r} d^3r = \sum_G U_{k+G} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{PS}(r) e^{i(G-G')r} d^3r \quad \text{I-36}$$

On passe à la transformée de Fourier :

$$\sum_G U_{k+G} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{PS}(r) e^{i(G-G')r} d^3r = (2\pi)^3 \sum_G U_{k+G} V_{PS}(G-G') \quad \text{III-37}$$

On intègre maintenant le second terme de l'équation III-32 sur tout le volume du cristal et par application de la transformée de Fourier :

$$E_k \sum_G U_{k+G} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(G-G')r} d^3r = (2\pi)^3 E_k \sum_G U_{k+G} \delta(G-G') \quad \text{III-38}$$

$$(2\pi)^3 E_k \sum_G U_{k+G} \delta(G-G') = (2\pi)^3 E_k U_{k+G'} \quad \text{III-39}$$

En substituant les équations III-35, III-37 et III-39 dans l'équation III-32

$$\frac{\hbar^2}{2m} |k+G'|^2 U_{k+G'} + \sum_G U_{k+G} V_{PS}(G-G') = E_k U_{k+G'} \quad \text{III-40}$$

On multiplie par $\sum_G \delta(G-G')$ le premier terme à gauche de l'équation III-40 et le terme à droite de la même équation :

$$\sum_G \delta(G-G') \frac{\hbar^2}{2m} |k+G'|^2 U_{k+G'} + \sum_G U_{k+G} V_{PS}(G-G') = \sum_G \delta(G-G') E_k U_{k+G'} \quad \text{III-41}$$

Où :

$$\sum_G \delta(G-G') = \begin{cases} 0 & \text{si } G \neq G' \\ N & \text{si } G = G' \end{cases} \quad \text{III-42}$$

Avec :

N : Nombre total de cellule dans le volume V

$$\sum_G \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |k+G'|^2 - E_k \right\} \delta(G-G') + V_{PS}(G-G') \right] U_{k+G'} = 0 \quad \text{III-43}$$

L'équation III-43 est une équation linéaire homogène, qui admet une solution non triviale si le déterminant de l'équation séculaire est nul :

$$\text{Det} \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}'|^2 - E_{\mathbf{k}} \right) \delta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_{\text{PS}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] = 0 \quad \text{III-44}$$

La périodicité du cristal permet d'écrire le terme $V_{\text{PS}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ dans l'équation III-44 sous la forme de la transformée de Fourier :

$$V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \frac{1}{V} \int_V V_{\text{PS}}(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} d^3r \quad \text{III-45}$$

Dans l'approximation locale, le potentiel $V_{\text{PS}}(\mathbf{r})$ est représenté par une superposition linéaire de potentiels atomiques :

$$V_{\text{PS}}(\mathbf{r}) = \sum_n^m \sum_i^l V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{T}_i) \quad \text{III-46}$$

Avec :

m : Nombre de maille élémentaire dans le solide.

l : Nombre d'atomes par maille élémentaire.

\mathbf{R}_n : Vecteur de translation dans le réseau réel.

\mathbf{T}_i : Vecteur de position liant deux atomes dans la maille élémentaire.

En substituant l'équation III-45 dans l'équation III-44 :

$$V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \frac{1}{V} \int_V \sum_{m,l} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{T}_i) e^{-i(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} d^3r \quad \text{III-47}$$

On pose $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{T}_i$

$$V(G - G') = \frac{1}{V} \int_V \sum_{m,l} V_a(r') e^{-i(G-G')(r'+R_n+T_i)} d^3r' \quad \text{III-48}$$

$$V(G - G') = \frac{1}{V} \sum_{m,l} e^{-i(G-G')R_n} e^{-i(G-G')T_i} \int_V V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-49}$$

$$V(G - G') = \frac{1}{V} \sum_m e^{-i(G-G')R_n} \sum_l e^{-i(G-G')T_i} \int_V V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-50}$$

Or l'intégrale sur V est équivalente à une intégrale sur Ω qui est Volume de la maille élémentaire de Wigner-Seitz (W.S) et qui contient toute l'information physique sur le système :

$$\int_V V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' = \int_{\Omega} V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-51}$$

Sachant que :

$$\sum_m e^{-i(G-G')R_n} = \sum_m 1 = N_{cell} \quad \text{III-52}$$

Où :

N_{cell} : Nombre de cellule dans le volume V .

$$V(G - G') = \frac{N_{cell}}{V} \sum_l e^{-i(G-G')T_i} \int_{\Omega} V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-53}$$

$$V(G - G') = \frac{N_{cell}\Omega}{V} \sum_l e^{-i(G-G')T_i} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-54}$$

$$V(G - G') = \frac{1}{N} \sum_l e^{-i(G-G')T_i} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-55}$$

Finalement on a :

$$V(G - G') \approx S(G - G')V_a(G - G') \quad \text{III-56}$$

Où $V_a(G - G')$: Facteur de forme atomique, qui représente la transformée de Fourier du potentiel atomique à l'intérieur de la cellule W.S.

$S(G - G')$: Facteur de structure qui ne dépend uniquement que de l'emplacement des ions dans la cellule W.S. On a donc:

$$V_a(G - G') = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_a(r') e^{-i(G-G')r'} d^3r' \quad \text{III-57}$$

$$S(G - G') = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(G-G')T_i} \quad \text{III-58}$$

Selon Cohen et Bergstresser [19, 20], les facteurs de forme sont déterminés à partir des gaps optiques expérimentaux, d'où le caractère empirique de l'approche.

Appliquons les équations III-57 et III-58 à la structure Diamant ou Zinc-blende qui possède deux atomes par motif. Considérant pour cela les notations suivantes :

Ω_a : Volume atomique.

N : Nombre de maille élémentaire.

$\Omega = 2 N\Omega_a$: Volume totale du cristal.

a_0 : Paramètre de réseau.

On a :

$$V(G - G') = V_{GG',1} e^{-i(G-G')T_1} + V_{GG',2} e^{-i(G-G')T_2} \quad \text{III-59}$$

T_1, T_2 : Position des deux atomes présents dans la maille élémentaire pour la structure Diamant ou Zinc-Blende, les deux atomes sont identiques, d'où $T_1 = -T_2 = T$

$$T_1 = T = \frac{a_0}{8} (1,1,1) \text{ et } T_2 = -T = -\frac{a_0}{8} (1,1,1)$$

L'équation III-59 s'écrit sous la forme :

$$V(G - G') = V_{GG',1} e^{-i(G-G')T} + V_{GG',2} e^{i(G-G')T} \quad \text{III-60}$$

$$V(G - G') = V^S(G - G') \text{Cos} [(G - G')T] + i V^A(G - G') \text{Sin} [(G - G')T] \quad \text{III-61}$$

$$V(G - G') = V^S(G - G') S^S(G - G') + i V^A(G - G') S^A(G - G') \quad \text{III-62}$$

Avec les facteurs de structure :

$$S^S(G - G') = \text{Cos} [(G - G')T] \quad \text{III-63}$$

$$S^A(G - G') = \text{Sin} [(G - G')T] \quad \text{III-64}$$

Les facteurs de forme symétrique et antisymétrique :

$$V_{|G-G'|}^S = \frac{1}{2} (V_{GG',1} + V_{GG',2}) \quad \text{III-65}$$

$$V_{|G-G'|}^A = \frac{1}{2} (V_{GG',1} - V_{GG',2}) \quad \text{III-66}$$

Le pseudopotentiel des deux ions par maille :

$$V_{GG',i} = \frac{2}{\Omega} \int_{\Omega} V_i(r) e^{-i(G-G')r} d^3r \quad \text{II-67}$$

Où :

$i=1$ et 2 : sont l'anion et le cation pour la structure Zinc-blende ou Diamant.

On substitue l'équation III-62 dans l'équation III-43 :

$$\sum_G \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |k + G'|^2 - E_k \right\} \delta_{GG'} + V_{GG'}^S S_{GG'}^S + i V_{GG'}^A S_{GG'}^A \right] U_{k+G'} = 0 \quad \text{III-68}$$

L'équation III-68 est une équation linéaire homogène écrite en fonction des facteurs de forme et facteurs de structure, admet des solutions si le déterminant est nul.

$$\text{Det} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |k + G'|^2 - E_k \right\} \delta(G - G') + V_{GG'}^S S_{GG'}^S + i V_{GG'}^A S_{GG'}^A \right] = 0 \quad \text{III-69}$$

Dans l'approche du pseudopotentiel local, on ne peut pas connaître les informations sur les états de la région du cœur, cependant, on peut se baser sur une interpolation des facteurs de forme symétrique et antisymétrique et les comparer avec les données expérimentales afin d'obtenir une structure de bande des électrons de valence exacte.

Le potentiel atomique possède une symétrie sphérique ce qui rend les facteurs de forme dépendant de la magnitude (portée) de G [21]. Sachant que le potentiel s'annule pour des grandes valeurs de G , l'équation séculaire II-69 converge à partir des valeurs de

$$|G| < |G'| = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^{1/2} \sqrt{11} \quad \text{III-70}$$

Pour satisfaire cette condition, on a besoin de trois facteurs de forme symétriques $V^S(G)$ et de trois facteurs de forme antisymétrique $V^A(G)$

$$\begin{cases} V^S(111) = V_3^S \\ V^S(220) = V_8^S \\ V^S(311) = V_{11}^S \end{cases} \quad \text{III-71}$$

$$\begin{cases} V^A(111) = V_3^A \\ V^A(200) = V_4^A \\ V^A(311) = V_{11}^A \end{cases} \quad \text{III-72}$$

Les facteurs de forme symétrique V^S , s'obtiennent à partir des structures monoatomiques telles que le Ge, Si, etc.....d'après la méthode de Heine-Abarenkov [22], Tandis que les facteurs de forme antisymétrique se déterminent expérimentalement d'après Cohen et Bergstresser[19,20]

La Figure.III.1 ci-dessous décrit les démarches de la procédure de l'approche du pseudopotentiel empirique local [23].

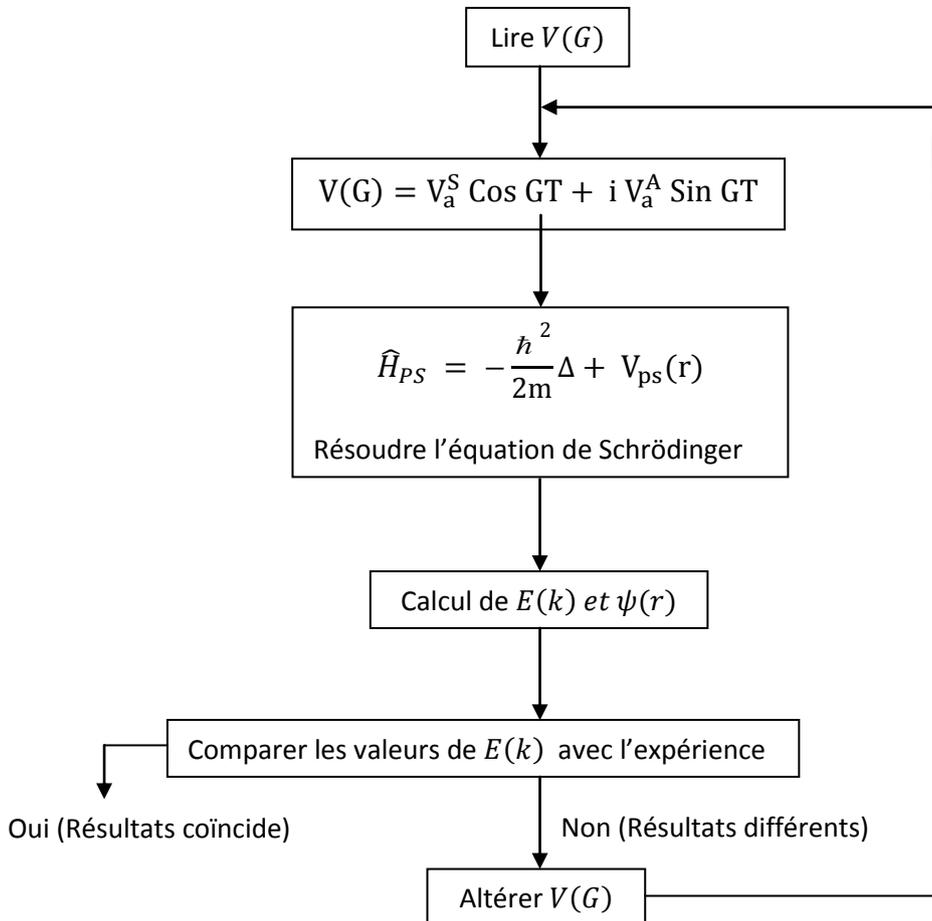


Figure.III.1. L'approche du pseudopotentiel empirique local

L'approximation du pseudopotentiel empirique local se base sur le bon choix des facteurs de forme $V(G)$ de la structure Zinc-blende à étudier et dont on connaît le paramètre de réseau. On injecte ces paramètres $V(G)$ dans l'équation de Schrödinger, les potentiels construits et après résolution de l'équation séculaire par la méthode des électrons presque libres on obtient les valeurs propres des énergies E_k , les coefficients des fonctions d'onde μ_k et les fonctions d'ondes ψ_k .

Ces valeurs sont comparées avec ceux de l'expérience si un grand écart se présente, les facteurs de forme sont modifiés et le processus est répété jusqu'à la convergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées.

III.6. Conclusion

Lorsque la molécule que l'on étudie contient des atomes lourds, le nombre d'électrons peut devenir très élevé et la résolution de l'équation de Schrödinger s'entrouve alourdie. Par ailleurs, il est bien connu depuis le XIXe siècle que les propriétés chimiques des atomes et des molécules proviennent des électrons les plus externes ou électrons de valence, les électrons les plus internes ou électrons de cœur étant peu impliqués.

Dans le but d'alléger les calculs, il est donc possible d'éviter le traitement explicite des électrons de cœur, en les remplaçant par un potentiel effectif agissant sur les électrons de valence. Un tel potentiel est appelé pseudopotentiel. Cette idée fut introduite pour la première fois en chimie quantique en 1959 par Phillips et Kleinmann et s'est surtout développée à partir des années 70. Dans ce chapitre, le calcul de structures électroniques par la méthode des pseudopotentiels empiriques (EPM) a été abordé en équations analytiques détaillées.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] E. Fermi, *Nuovo Cimento*. 11 (1934) 157.
- [2] W.C. Herring , *Phys. Rev.* 57(1940) 1169.
- [3] F. Bassani, *Phys. Rev.* 108 (1957) 263.
- [4] J.C. Phillips, L. Kleinman, *Phys. Rev.* 287 (1959) 116.
- [5] N. Richard, « Actinides et terres rares sous pression : approche pseudopotentiel », Rapport CEA, France, (2002).
- [6] E. Antoncik , *J. Phys. Chem. Solids*. 10 (1959) 314.
- [7] Ludovic Castro, thèse de doctorat, univ Toulouse, (2012).
- [8] J. C. Phillips, *Phys. Rev.* 112 (1958) 685.
- [9] J. Kim, thèse de doctorat, univ USA, (2011).
- [10] N. Gargour, thèse de doctorat, univ Metz, (1990).
- [11] F. S. Ham, *Solid State Physics* 1 (1955) 127.
- [12] N. W. Ashcroft, *Phys. Lett.* 23 (1966) 48.
- [13] N. Bouarissa, *Philo. Mag. B* 80 (2000) 1743.
- [14] M. L. Cohen, T. K. Bergstresser, *Phys. Rev.* 141 (1966) 789.
- [15] H. Hellman, *The Journal of Chemical Physics*. 3 (1935) 61.
- [16] H. Hellmann, W. Kassatotschkin , *Acta Physicochim.* 5 (1925) 23.
- [17] J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen, *Physical Review B* 10. 12 (1974) 5095.
- [18] J.R. Chelikowsky, M. L. Cohen, *Physical Review B* 14. 2 (1976) 556.
- [19] E. P. Wigner, F. Seitz, *Phys. Rev* 43 (1933) 804.
- [20] M. L. Cohen, T. Bergstresser, *Phys Rev.* 164 (1976) 1069.
- [21] J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen, *Physical Review B* 10. 12 (1974) 5095.
- [22] I. V. Abarenkov, V. Heine, *Phil. Mag.* 13 (1965) 529.
- [23] N. Bouarissa, *Materials Chemistry and Physics*. 124 (2010) 336.

Chapitre IV

LE POSITRON DANS LA MATIERE



IV.1. Introduction

Le positon ou positron, antiparticule de l'électron, a été prévu par la théorie de Paul Adrien Maurice Dirac dès 1930 [1]. Il possède les mêmes caractéristiques que l'électron, excepté les signes opposés de sa charge et de son moment magnétique. Il fut mis en évidence vers 1932 par Carl David Anderson[2] au California Institute of technology, il faisait des recherches sur des rayons cosmiques, il observa dans une chambre de Wilson des traces qui semblaient correspondre à des particules proches des électrons, mais de charge opposée et de masse beaucoup plus faible que celle du proton. Cette découverte confirmait la théorie relativiste de Dirac.

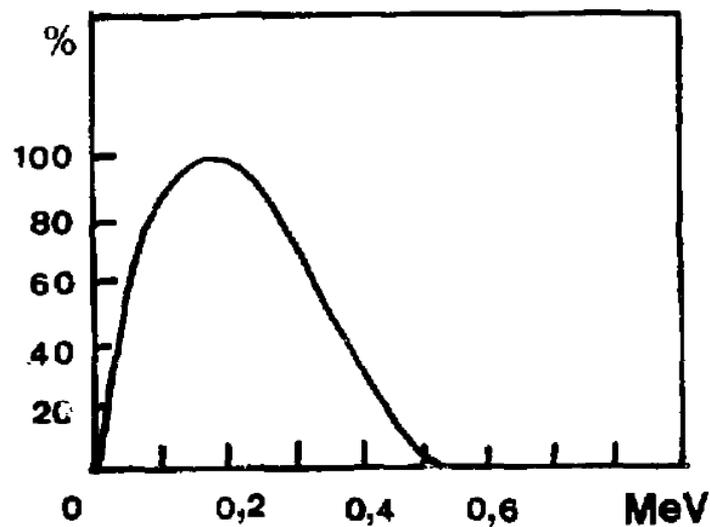
Le positron, comme l'électron est une particule stable dans le vide, mais son interaction avec un milieu contenant des électrons conduit rapidement à son annihilation, c'est-à-dire que leur masse est convertie en énergie sous forme de deux photons gamma. La durée d'existence du positron est extrêmement brève à cause de la forte densité électronique.

IV.2. Les Sources de positrons

Les sources de positons utilisées pour étudier les solides proviennent généralement de sources radioactives ou radio-isotopes présentant un spectre de rayonnement β^+ continu illustré dans la Figure.IV.1. Il existe un grand nombre d'émetteurs β^+ dont seulement une dizaine environ est utilisable dans des expériences de positons. Le Tableau.VI.1 indique les caractéristiques des principaux émetteurs β^+ utilisés [3].

Tableau.VI.1. Principaux émetteurs β^+ utilisables [4].

Radionucléides	Période	% β^+	Energie maximale (MeV)	Energie principales raies γ (MeV)
$^{22}_{11}\text{Na}$	2,6 ans	90,5 %	0,546	1,28
$^{64}_{29}\text{Cu}$	12,7 heures	19 %	0,657	
$^{58}_{27}\text{Co}$	70,8 jours	15 %	0,474	0,811
$^{57}_{28}\text{Ni}$	36 heures	40 %	0,845	1,38
$^{44}_{22}\text{Ti}$ $^{44}_{21}\text{Se}$	48 ans	95 %	1,470	1,16
$^{65}_{32}\text{Ge}$ $^{68}_{31}\text{Ga}$	288 jours	90 %	1,889	

Figure.IV.1. Spectre en énergie des positrons émis par le Sodium ^{22}Na [4].

Les positons émis par les radio-isotopes ont un spectre d'énergie cinétique distribué entre 0 et une énergie maximale inférieure au MeV, de telle sorte que le positon pénètre suffisamment dans la matière pour permettre une étude en massif [5].

Vers les années soixante, le positon n'intéressait pratiquement que les physiciens nucléaires. A partir de cette date, on remarqua que les caractéristiques d'annihilation du positon étaient modifiées suivant l'état du matériau dans lequel il pénétrait. Dès lors, de nombreuses expériences montrèrent l'intérêt du positon pour l'étude de la matière condensée.

Afin de bien saisir la nature des renseignements apportés par le positon sur les propriétés des solides nous allons d'abord décrire son ralentissement dans la matière puis examiner les divers processus d'annihilation [4].

IV.3. Interaction des positrons avec la matière

Les positons émis par les sources radioactives ont des énergies moyennes de l'ordre de 0.3 MeV. Quand les positons pénètrent dans la matière avec ces énergies, différents processus vont se produire parmi ceux-ci leur interaction avec les électrons et les noyaux constituant le solide.

IV.3.1. Interaction des positrons avec les électrons

Dans la matière, le positon cède son énergie cinétique essentiellement par collisions élastique avec des électrons (excitation ou ionisation) ou des phonons [6] pour parvenir à un état thermalisé. Ces collisions de positrons rapides avec les électrons du solide se manifestent sous forme d'excitation ou d'ionisation suivant l'énergie transférée aux électrons au cours de la collision.

Les excitations électroniques peuvent être sous forme de production de paire électron-trou où d'excitation de plasmon collective des électrons de valence [7,8].

Un état lié instable entre un positron et un électron se forme, c'est le positronium (Ps), l'atome de positronium est neutre parce que la charge du positron (+e) est identique à celle du proton, le positronium est semblable à l'atome d'hydrogène [9].

Etant instable, l'atome de positronium se désintègre. Sa désintégration se traduit par l'annihilation entre le positron et l'électron qui est accompagnée de l'émission de photons. Le positronium peut se former sous deux états de spin différents, on appelle para-positronium l'état où les spins de l'électron et du positron sont antiparallèles et ortho-positronium, l'état où les spins de l'électron et du positron sont parallèles, la Figure.IV.2 schématise les deux états du positronium [10].

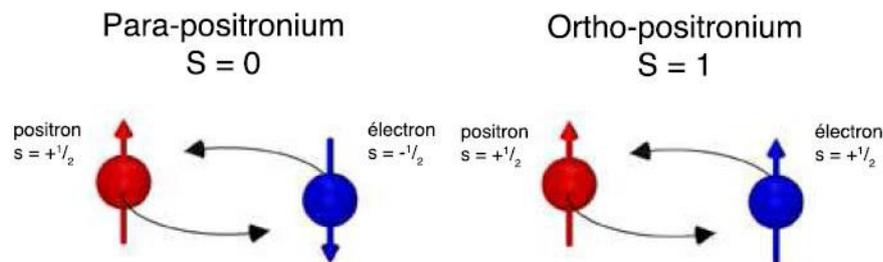


Figure.IV.2. Schéma des deux états d'un positronium : para-positronium et ortho-positronium [10].

IV.3.2. Interaction des positrons avec les noyaux

L'interaction d'un positron avec un noyau, provoque sa perte d'énergie soit, sous forme d'une émission radiative ou par création de phonon ou par déplacement atomique. Lors de cette collision avec le noyau, sa vitesse change rapidement le long de sa trajectoire, à cause de la répulsion électrostatique entre le noyau et le positron. Ce dernier émet un rayonnement électromagnétique appelé rayonnement de freinage ou Bremsstrahlung [11].

L'interaction du positron avec le noyau, donne naissance aux phonons, qui correspondent aux excitations des modes de vibrations du réseau ou bien on peut avoir des déplacements atomiques qui correspondent aux déplacements ou aux recules que subit l'atome par suite, à une absorption d'une quantité d'énergie.

Le processus de Bremsstrahlung est dominant, si l'énergie de radiation des positrons est comprise entre 1 MeV et 10 MeV, au dessous de 0.5 MeV on a des ionisations et excitations électroniques qui persistent jusqu'à 20 eV, et pour atteindre la thermalisation complète l'énergie du positron est de l'ordre de quelques meV [6]. Le temps de thermalisation total est de l'ordre de $\tau_{th} = 10^{-11}s$, un temps très petit, comparé avec la durée de vie du positron dans la matière qui est supérieur à $\tau_T = 10^{-10}s$.

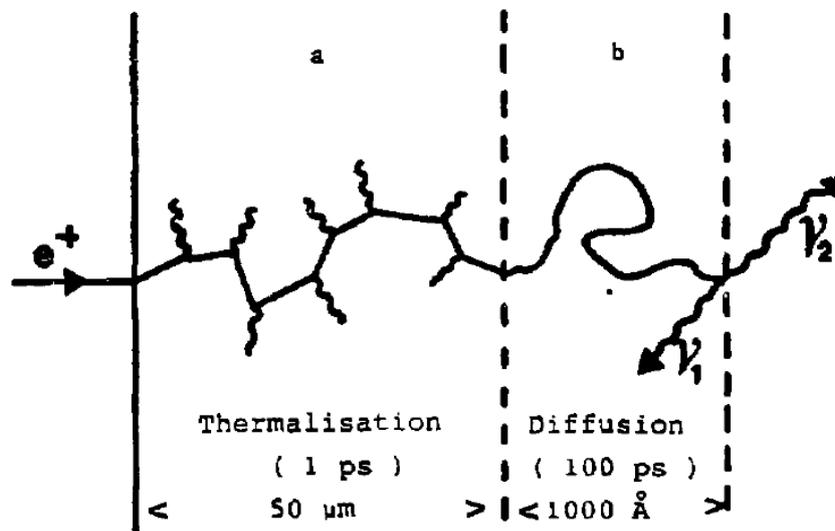


Figure.IV.3. Comportement du positron dans la matière [4].

IV.3.3. Annihilation du positron

Les propriétés électroniques des métaux sont en grande partie gouvernées par leurs électrons de conduction. Les quelques études dans le domaine des semi-conducteurs ont montré que la technique de l'annihilation du positron constitue un moyen quasi unique pour exploiter avec profit les propriétés des métaux.

Lorsqu'un positron et un électron se rencontrent, l'annihilation se produit quand le positron est complètement ralenti suite aux collisions qu'il subit dans la matière, suivant la structure électronique du milieu où le positron évolue, les paires positron-électron peuvent former soit des états non liés soit des états liés selon la structure électronique du milieu (métal, semiconducteur, isolant...).

Les paires liées forment un atome hydrogénoïde, appelé positonium, Toute leur énergie de masse ($E=mc^2$) est transformée en radiation électromagnétique.

Deux rayons gamma sont émis, ils portent l'empreinte de la vitesse de l'électron annihilé. Leur distribution angulaire permet de reconstituer la distribution de vitesse des électrons de conduction en intensité et en direction [5].

L'annihilation dans le cas de l'état lié, le positonium existe dans deux états de spin:

- 1- l'état singulet ou para-positonium dans lequel l'électron et le positon ont leur spin antiparallèle.
- 2- l'état triplet ou ortho-positonium pour lequel les spins de l'électron et du positon sont parallèles.

La conservation du spin implique que le para-positonium s'annihile avec émission d'un nombre pair de gammas et l'ortho-positonium d'un nombre impair. Le processus d'auto-annihilation à deux gammas est le plus probable pour le para-positonium alors que pour l'ortho-positonium, c'est le processus d'auto-annihilation à trois gammas. Ce processus ayant une section efficace plus faible que le processus à deux gammas, l'ortho-positonium sera plus stable que le para-positonium.

Dans le vide, les taux d'auto-annihilation sont respectivement de $8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ pour le para-positonium et de $7.04 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ pour l'ortho-positonium.

On étudie l'annihilation du positon à partir des rayons gamma émis au moment de l'annihilation de la paire positon-électron. Trois distributions caractérisent cette annihilation:

- 1- la distribution du temps de vie du positon dans le milieu
- 2- la distribution de l'énergie des gammas d'annihilation
- 3- la distribution spatiale des directions d'émission des gammas d'annihilation.

IV.4. La corrélation angulaire de l'annihilation des positrons

L'annihilation d'une paire électron-positon dans l'état singulet se traduit par l'émission de deux photons gamma .En appliquant le principe de la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement nous pouvons écrire les relations suivantes :

$$\frac{p^2}{2m_0} + 2m_0c^2 = \hbar \omega_1 + \hbar \omega_2 \quad \text{IV-1}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}_1 + \hbar \vec{k}_2 \quad \text{IV-2}$$

Où p désigne la quantité de mouvement de la paire positon-électron et $\hbar k_i$ et $\hbar \omega_i$ le quadrivecteur impulsion-énergie du photon i .

D'après les relations IV-1 et IV-2, si la paire électron-positon est au repos au moment de l'annihilation ($\vec{p} = \vec{0}$), les deux photons sont émis en sens opposé avec une énergie exactement de 511 keV (m_0c^2).

Cependant si la paire électron-positon possède une quantité de mouvement non nulle, les directions d'émission des deux photons s'écartent d'un angle θ et leurs énergies seront différentes d'une quantité ΔE .

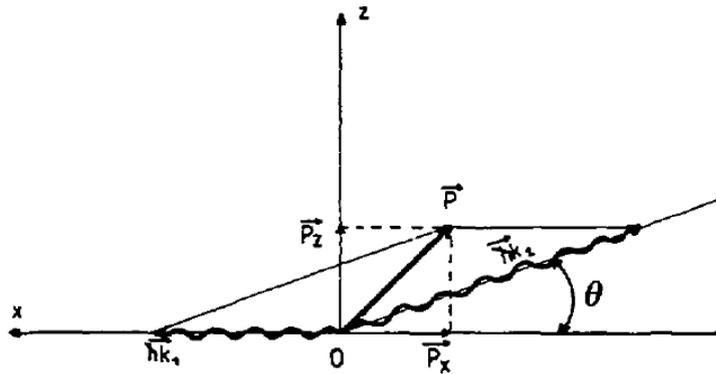


Figure.IV.4. Annihilation d'une paire électron-positron de quantité de mouvement \vec{P} [4].

Dans ce système d'axes, si l'on remarque qu'en général $p < m_0c$ et que θ est petit, les relations IV-1 et IV-2 permettent d'écrire :

$$\Delta E = 1/2 P_x C \quad \text{IV-4}$$

$$\theta = \frac{P_z}{m_0 c} \quad \text{IV-3}$$

La mesure de θ ou de ΔE permet donc d'avoir accès à une projection de la quantité de mouvement de la paire électron-positon. Si l'on admet que le positon ne s'annihile pas qu'après thermalisation (cas le plus fréquent) la mesure de ces paramètres fournit donc une information sur la quantité de mouvement des électrons [4].

IV.5. La méthode de la particule indépendante

Lors de l'interaction du positron avec la matière, il peut prendre différents états énergétiques, l'ensemble de ces états distincts constituent ce qu'on appelle structure de bande positronique qui leur correspond des fonctions d'ondes positroniques. La fonction d'onde positronique est calculée par la méthode de la particule indépendante (IPM).

Le potentiel total $V_p(r)$ exprime plusieurs termes. On a un potentiel Coulombien répulsif dû aux ions atomiques, un potentiel coulombien attractif dû aux électrons du solide, un potentiel de corrélation dû à l'interaction entre l'électron et le positron et un potentiel d'échange dû à l'interaction du positron avec les autres positrons qui se trouve dans le solide.

Le potentiel positronique est purement coulombien [12] et peut être exprimé comme suit :

$$V_p(r) = V_i(r) + V_c(r) + V_{e-p}(r) + V_{p-p}(r) \quad \text{IV-5}$$

Où :

$V_i(r)$: Potentiel du cœur

$V_c(r)$: Potentiel attractif de Hartree.

$V_{e-p}(r)$: Potentiel de corrélation électron-positron.

$V_{p-p}(r)$: Potentiel d'échange positron-positron.

La durée de vie du positron est courte, on supposera qu'il n'y a qu'un seul positron, à la fois présent dans le matériau c.à.d, qu'il n'y a pas d'interaction positron-positron et par conséquent le terme d'échange $V_{p-p}(r)$ disparaît. D'autre part le potentiel de corrélation électron - positron qui est un terme correctif additionnel supplémentaire est une fonction qui varie lentement avec la densité de charge électronique.

Il est généralement plat (constant) dans la région interstitielle donc il n'est pas considéré dans nos calculs. En plus, il est toujours négligeable devant les autres termes du potentiel total où le potentiel de Hartree est dominant. Donc, le potentiel positronique est purement coulombien et il s'écrit [13] :

$$V_p(r) = V_i(r) + V_c(r) \quad \text{IV-6}$$

Le potentiel $V_p(r)$ vu par le positron étant périodique, donc ayant la périodicité du cristal, il peut être exprimé comme suit [14] :

$$V_i(r) = \sum_{\alpha, R_j} \sum_{R_n} V_i^\alpha (r - R_n - R_j^\alpha) \quad \text{IV-7}$$

Avec :

V_i^α : Potentiel atomique de l'atome i situé dans la $n^{\text{ième}}$ cellule.

R_n : Ensemble des vecteurs de réseau de bravais.

R_j^α : Vecteur non primitif avec une base de deux atomes.

Dans l'approximation du cœur ponctuel (point core), la charge nucléaire Z_α de chaque atome α , dans une structure zincblende, est supposée concentrée au centre de l'atome.

$$V_i^\alpha(r) = \frac{Z_\alpha e}{r} \quad \text{IV-8}$$

Avec :

Z_α : Nombre des électrons de valence.

D'autre part, le potentiel électron-positron, est exprimé en terme de densité de charge par [15] :

$$V_c(r) = e \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} d^3 r' \quad \text{IV-9}$$

Où :

$\rho(r')$: Densité de charge électronique à la position r'

Sachant que $\rho(r')$ peut s'écrire sous la forme :

$$\rho(r') = -e \sum_i |\psi_i(r)|^2 \quad \text{IV-10}$$

Sachant que $V(r)$ et $\rho(r)$ sont périodiques, leurs coefficients de Fourier correspondant sont donc donnés par :

$$V(G) = \frac{1}{\Omega} \int V(r) e^{iGr} d^3r \quad \text{IV-11}$$

$$\rho(G) = \frac{1}{\Omega} \int \rho(r) e^{iGr} d^3r \quad \text{IV-12}$$

Où :

Ω : Volume de la cellule unitaire

Ceci nous mène aux expressions transformées suivantes:

$$V(G) = 8\pi \frac{\rho(G)}{G^2} \quad \text{IV-12}$$

Les composantes de Fourier du potentiel, équation I-11 sont exprimées en terme de la densité de charge. Cette dernière est calculée en utilisant la méthode des pseudopotentiels empirique. Même chose pour le potentiel ionique, on peut l'exprimer en fonction de la densité de charge nucléaire au centre de chaque cellule (potentiel du cœur).

$$\rho(G) = \frac{Z}{\Omega} \quad \text{IV-13}$$

Où :

Ω : Volume de la cellule unitaire.

Les composantes de Fourier de la densité de charge totale peuvent être écrites comme suit :

$$\rho(G) = -\frac{1}{\Omega} \left(Z - \int_{\Omega} |\rho^2(r)| \cos(Gr) d^3r \right) \quad \text{IV-14}$$

Avec le potentiel divergeant dans la région du cœur, nous devons avoir dans cette région plusieurs ondes planes pour que la fonction d'onde converge. Cependant la situation est rendue plus simple du fait que le positron à cause de sa charge positive est repoussé de la région du cœur ionique vers les régions interstitielles. Ce fort potentiel répulsif senti par le positron conduit à des faibles fonctions d'ondes. Cette dernière s'annihile ainsi, dans la région du cœur.

Cette formule de la fonction d'onde du positron qui ne possède pas d'oscillations dans la région du cœur peut être représentée en termes d'un nombre faible d'ondes planes et la fonction d'onde positronique s'écrit alors, comme suit :

$$\psi_+(r) = \left(\frac{1}{\Omega}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}r} \quad \text{IV-15}$$

Où :

Ω : Volume du cristal.

Les coefficients $A(\mathbf{G})$ sont obtenus par la résolution de l'équation séculaire suivante

$$\sum_{\mathbf{G}'} \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{G}^2}{2m} - E \right) \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] A(\mathbf{G}') = 0 \quad \text{IV-16}$$

IV.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'antiparticule de l'électron et son comportement dans la matière suites aux différentes collisions. Le positron est utilisé comme une sonde pour explorer le cristal en massif et à la surface. Une étude en équations analytiques de la méthode de la particule indépendante a été présentée en détail.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] P. A. M. Dirac. Proc. Camb. Phil. Soc. 26 (1930) 261.
- [2] C. D. Anderson, Science 76 (1932) 238.
- [3] C.M. Lederer, V.S.Shirley,A., « Table of Isotopes », Ed Wiley, New York, (1978).
- [4] B. Geffroy, « Caractérisation des défauts natifs dans HgTe, CdTe et $Hg_{1-x}Cd_xTe$ par annihilation de positons », thèse d'ingénieur C.N.A.M. paris, (1987).
- [5] M. Stucky, « Caractérisation des défauts lacunaires dans l'arséniure de gallium Par annihilation de positons », Thèse Doctorat, Orsay, (1987).
- [6] P. R. Wallace, Phys. Rev. 100. 2 (1955) 738.
- [7] R. Paulin, Inst. Nat. Sci and Tec. Nu-Saclay- France.
- [8] S. Berko, « Momentum Distribution » Ed. by R. N. Silver and P. E. Sokol, (1989).
- [9] Luc. Valentin, « Physique subatomique », Tome I, Ed Herman, (1975).
- [10] W. Gillard, « Modélisation de l'émission d'annihilation des positrons Galactiques », thèse Doctorat,Toulouse, (2008)
- [11] D. Blanc, « Physique nucléaire », Ed Masson, (1980).
- [12] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Solids. 61 (2000) 109.
- [13] N. Bouarissa, Philo. Mag. B 80 (2000) 1743.
- [14] N. Bouarissa, R. N. West, H. Aourag, Phys stat sol. 188 (1995) 723.
- [15] N. W . Aschroft, N. D. Mermin, « Solid State Physics », Ed Holt, Philadelphia, (1976).

Chapitre V

RESULTATS ET DISCUSSIONS



V.1. Introduction

L'industrie de la microélectronique est une technologie qui évolue le plus rapidement dans l'histoire des technologies. Les chercheurs exploitent de nouvelles techniques afin de répondre à la demande (sans cesse) croissante de nouveaux produits. La plus part de ces matériaux sont obtenus par alliage, ils pourraient à priori couvrir une large gamme de composition [1].

Les composés III-V constituent une famille d'alliages formés en proportion stœchiométrique d'éléments des colonnes III et V du tableau de Mendeleïev. Leur structure cristalline est de type Zinc-blende avec un paramètre de maille qui dépend de la composition de l'alliage considéré.

Notre étude porte sur le système de matériau antimoniures correspondant aux matériaux AlSb et InSb, ainsi que leurs alliages ternaires $Al_xIn_{1-x}Sb$ de paramètre de maille compris entre 6.1 Å et 6.49 Å. Ce système, qui s'est rapidement révélé, essentiel pour la réalisation de composants optoélectroniques fonctionnant dans le moyen infrarouge, suscite un intérêt croissant pour ses applications en électronique. Cette filière moins connue que les filières classiques (GaAs ou InP), est caractérisée par des matériaux à très faible largeur de bande interdite, une très faible masse effective des électrons, qui engendre une plus grande mobilité des porteurs [2].

V.2. Etude des propriétés électroniques

La méthode de calcul utilisée pour les états électroniques est celle des pseudopotentiels. Cette dernière a été couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) dans le traitement des alliages semi-conducteurs ternaires à structure Zinc-blende. L'effet du désordre compositionnel a été pris en considération par l'introduction d'un potentiel effective (VCA amélioré).

La première partie de cette étude portera sur la détermination des propriétés électroniques, optiques et diélectriques des alliages semi-conducteurs ternaires $Al_x In_{1-x} Sb$, à savoir: la structure de bandes, les gaps d'énergies, la densité de charge électroniques, la masse effective des électrons, l'indice de réfraction et la constante diélectrique de haute fréquence. Le pseudopotentiel empirique du cristal est défini comme étant une superposition linéaire des potentiels atomiques de la forme [3,4]:

$$V_{ps}(r) = V_{ps}^L(r) + V_{ps}^{NL}(r) \quad \text{V-1}$$

Avec :

$V_{ps}^L(r)$: Partie locale du pseudopotentiel.

$V_{ps}^{NL}(r)$: Partie non locale du pseudopotentiel.

La partie non locale du pseudopotentiel est négligée, le pseudopotentiel est donné en fonction des paramètres du pseudopotentiel $V(G)$, appelés aussi facteurs de forme, et qui ne sont autre que la Transformée de Fourier du potentiel atomique à l'intérieur de la cellule Wigner-Seitz.

$$V_{ps}(r) = V_{ps}^L(r) = \sum_G V(G) e^{iGr} \quad \text{V-2}$$

Où :

$V(G)$: Facteur de forme

Les paramètres du pseudopotentiel empirique $V(G)$ sont tirés de la littérature ensuite déterminés par la méthode des moindres carrée non linéaire [5], dans laquelle tous les paramètres sont optimisés simultanément sous un critère bien défini de la minimisation de la moyenne de la racine carrée de l'écart de gap qu'on note (rms).

La méthode des moindres carrées non linéaire nécessite que l'écart (rms) des gaps d'énergies calculés par la méthode des pseudopotentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement soit définie par [6]:

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

Où :

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

E_{ij}^{exp} :L'énergie mesurée entre le l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$ au vecteur dans les m paires choisies (i, j).

E_{ij}^{cal} :L'énergie calculée entre l'état i avec $k = k_i$ et l'état j avec $k = k_j$ au vecteur dans les m paires choisies (i, j).

n : Nombre des paramètres du pseudopotentiel empirique.

Les valeurs des facteurs de forme prisent au départ sont améliorées ou modifiées par itérations jusqu'à minimiser le δ [6]. Les facteurs de forme des composés binaires semiconducteurs *InSb* et *AlSb* sont ajustés et illustrés dans le Tableau.V.1, ainsi que leurs paramètres de réseau.

Tableau.V.1. Les facteurs de formes symétriques (V_s) et antisymétriques (V_A) ajustés en (Ryd) des composés binaires semi-conducteurs *InSb* et *AlSb* et leur paramètre de réseau a (Å).

Composant Binaire	Les facteurs de forme						a (Å)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
InSb	-0.201294	0.01	0.028338	0.064495	0.03	0.015	6.49
AlSb	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544	6.1355

En injectant les paramètres pseudopotentiels dans le code EPM et dont les valeurs sont mentionnées dans le Tableau.V.1, on trouve les gaps d'énergies illustrés au Tableau.V.2 et qui sont en très bon accord avec l'expérience rapportée par la référence [7,8]:

Tableau.V.2.Comparaison entre les gaps d'énergies calculés et observés dans les composés binaires semi-conducteurs InSb et AlSb.

Composant binaire	E_{Γ}^{Γ} (eV)	E_{X}^{Γ} (eV)	E_{L}^{Γ} (eV)
InSb	0.18 ^{a,c)}	1.63 ^{a,c)}	0.93 ^{a,c)}
AlSb	2.30 ^{b,c)}	1.615 ^{b,c)}	2.211 ^{b,c)}

^aRef[7], ^bRef[8] et ^cRef[Nos calculs].

Le mélange homogène des semiconducteurs binaire est une nouvelle technique pour former des alliages, dont les propriétés sont obtenues en ajustant les propriétés des composants binaires [9].

Ces nouveaux matériaux couvrent une large gamme de longueur d'onde. Le paramètre de réseau de l'alliage semiconducteur $Al_x In_{1-x} Sb$, varie avec la concentration de l'Aluminium, cela a un effet important sur la structure de l'alliage étudiée.

$$a_{Al_x In_{1-x} Sb} = x a_{AlSb} + (1 - x) a_{InSb} \quad V-5$$

La constante du réseau de l'alliage binaire suit la loi de Vegard [10], les valeurs sont présentées au Tableau.V.3.

Tableau.V.3. Paramètres de réseau de l'alliage semiconducteur $Al_x In_{1-x} Sb$.

x	a(A°)
0	6.49
0.1	6.45455
0.2	6.4191
0.3	6.38365
0.4	6.3482
0.5	6.31275
0.6	6.2773
0.7	6.24185
0.8	6.2064
0.9	6.17095
1	6.1355

Les facteurs de forme symétriques et antisymétriques sont donnés par la relation [11-12] :

$$V_{alloy} = (1 - x)V_{InSb}(G) + xV_{AlSb}(G) - p[x(1 - x)]^{\frac{1}{2}}(V_{AlSb}(G) - V_{InSb}(G)) \quad V-6$$

Avec p : Paramètre ajustable qui simule l'effet de désordre.

V.2.1. Structure de bandes électronique

La connaissance des propriétés électroniques des matériaux semiconducteurs est vitale pour le développement de futurs dispositifs électroniques et optoélectroniques. La dynamique des porteurs de charge, qui se traduit par les propriétés électroniques est un facteur déterminant pour certaines applications requérant des conditions particulières.

Les figures. (V.1-V.2) représentent les structures de bandes d'énergies des composés binaires $InSb$ et $AlSb$ respectivement. La structure de bande de l'alliage $Al_x In_{1-x} Sb$ est calculée aux points de hautes symétries dans la zone de Brillouin et le long des principales lignes de symétries, et ceci pour quelques valeurs de x . Vu la similitude de ces structures pour différentes valeurs de x , seule la structure de bande électronique de l'alliage $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$ est

représentée dans la figure.V.3. Et pour mieux voir l'effet de désordre sur cette structure, on a utilisés dans nos calculs la méthode de la VCA avec et sans l'effet du désordre.

Pour pouvoir interpréter les Figures.V.1 et V.2 qui illustrent les structures de bandes des alliages binaires *InSb* et *AlSb* respectivement, on note que la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence.

Dans la Figure.V.1 on constate que le maximum de la bande de valence est au point Γ et que le minimum de la bande de conduction est aussi au point Γ , d'où le composé binaire *InSb* est un semiconducteur à bande interdite directe, l'écart relevé entre le minimum et le maximum vaut 0.18 eV, et ceci coïncide avec la valeur reporté dans la référence [7].

Par contre dans la Figure.V.2, on remarque que *AlSb* est à bande interdit indirecte. Ce comportement indirect est associé à la vallée *X* dont le minimum se situe à 1.62 eV du maximum de la bande de valence, cette valeur coïncide aussi avec la valeur trouvée dans la référence [8].

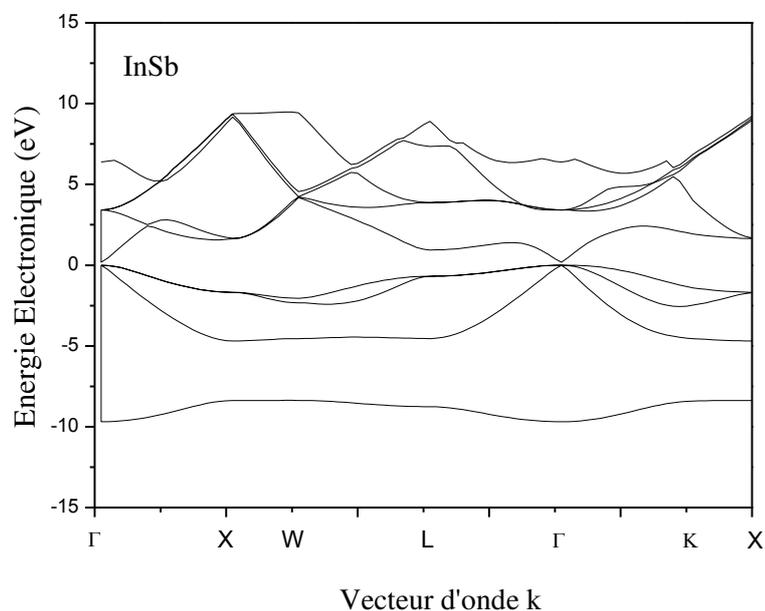


Figure.V.1. Structure de bande électronique du composé binaire *InSb*.

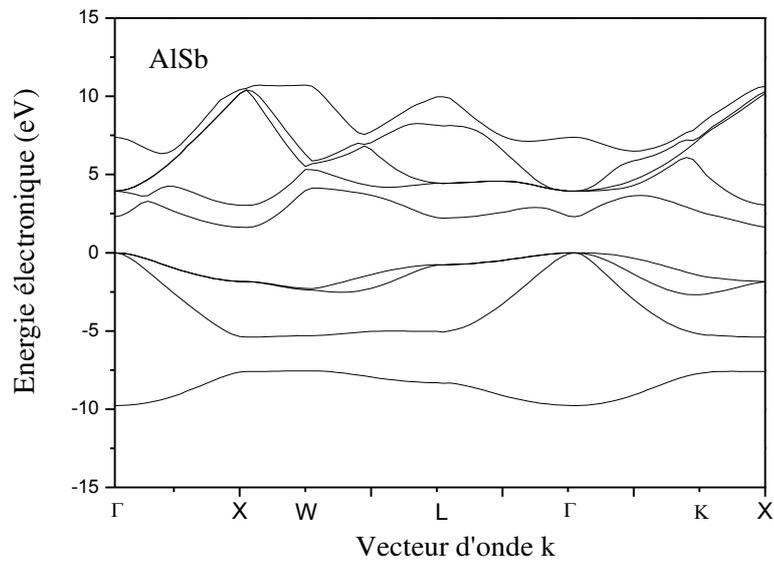


Figure.V.2. Structure de bande électronique du composé binaire AlSb.

La structure de bande d'énergie de l'alliage ternaire $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$, est schématisée sur la Figure.V.3, où le comportement du gap d'énergie est direct, et il est associé à la vallée Γ , dont le minimum se situe à 1.21eV du maximum de la bande de valence.

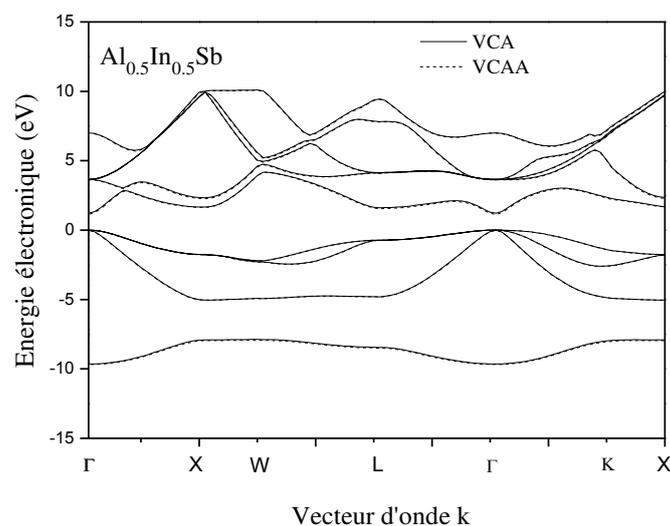


Figure.V.3. Structure de bande électronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$.

L'état le plus bas en énergie de la première bande de conduction est au point Γ , les fonctions d'ondes exhibent en ce point le degré de localisation le plus large avec les états S . De plus, on voit clairement la présence de quatre bandes de valence distinctes, la plus basse des bandes de valence présente la forme habituelle pour les matériaux Zinc-blende [12]. La largeur de cette bande de valence est de 9.65 eV, on remarque aussi, que ces bandes sont moins dispersives que les bandes de conduction, ceci revient au fait que les électrons de conduction sont délocalisés, le même résultat a été trouvé, pour la structure électronique de l'alliage Zinc-blende $Ga_{0.5}In_{0.5}N$ [13] avec des bandes de valence moins dispersives. Cette dispersion des bandes est due à la différence des gaps énergétiques qui est liée à la différence d'ionicté, et aussi au caractère cationique S de la première bande de conduction.

On remarque à partir de ces spectres énergétiques, qu'il y a un gap entre la première et la deuxième bande de valence au point X , ce gap est relié à la différence des potentiels des cations et anions. Ce gap «antisymétrique » a été proposé comme une mesure qualitative de l'ionicté du cristal ce qui confirme la proposition de Chelikowsky et *al.*[14] ainsi que les résultats trouvés par Bouarissa et *al.* [15].

L'effet de désordre, quoique présent reste quand même négligeable et sans aucun effet sur la structure de bande d'énergie de notre alliage ternaire au point $x = 0.5$.

V.2.2. Le gap d'énergie

Comme les énergies de transition entre le maximum de la bande de valence et les trois minima de la bande de conduction sont des caractéristiques essentielles de la structure de bande, on étudiera la dépendance en x de ces gaps d'énergies directs et indirects. Notre étude se fera dans les deux cas, avec et sans l'effet de désordre.

La Figure.V.4 illustre la variation de l'énergie de gap direct E_{Γ}^{Γ} en fonction de x , et ceci en utilisant les deux méthodes, VCA et VCA améliorée. On observe que dans les deux cas, le gap direct E_{Γ}^{Γ} augmente d'une façon monotone avec la concentration de l'Aluminium.

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés sur les deux courbes nous donne les expressions analytiques de la forme:

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 0.11x^2 + 2.02x + 0.176 \quad \text{VCA} \quad \text{V-7}$$

$$E_{\Gamma}^{\Gamma}(x) = 0.43x^2 + 1.68x + 0.169 \quad \text{VCAA} \quad \text{V-8}$$

Ces expressions analytiques ont la forme générale suivante :

$$E(x) = cx^2 + bx + a \quad \text{V-9}$$

Où c représente le terme quadratique, appelé aussi le bowing optique du gap énergétique.

Toutefois, on remarque que le bowing optique dans les deux équations est différent. L'utilisation de la VCA seule, c'est-à-dire on a un facteur de désordre nul ($p=0$), nous donne un bowing optique (c) égale à 0.11eV, c'est une valeur complètement en désaccord avec la valeur expérimentale qui est de 0.43eV trouvé par certains résultats rapportés par Isomura et al [16].

Par contre quand on utilise la VCA améliorée, c'est-à-dire on tient compte de l'effet du désordre comme un potentiel effectif dans le potentiel total du cristal ($p \neq 0$), un très bon accord est trouvé avec le bowing expérimental qui est de 0.43eV pour un facteur de désordre $p = 0.075$. La faible valeur de p suggère que l'effet du désordre compositionnel sur l'énergie de gap direct E_{Γ}^{Γ} dans le cas de notre alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$ n'est pas aussi important comparé à d'autres alliages semiconducteurs ternaires III-V [12,17] et les cristaux quasi-binaires [18].

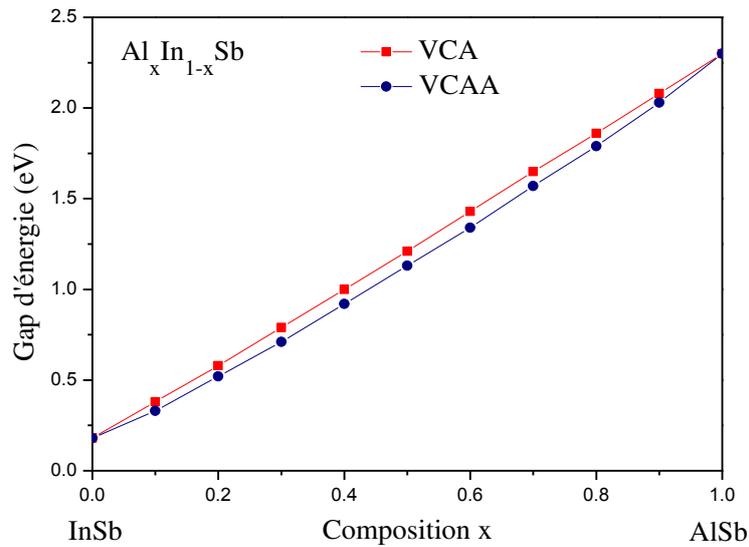


Figure.V.4. Variation du gap direct d'énergie E_F^Γ en fonction de la composition x avec et sans désordre de l'alliage $Al_x In_{1-x} Sb$.

Le paramètre de courbure expérimental est une sommation de deux contributions :

$$b_{exp} = b_1 + b_2 \quad \text{V-10}$$

b_1 : Bowing du à l'effet structural, qui est calculé par la VCA

b_2 : Bowing du à l'effet du désordre, qui est calculé par la VCAA

Dans notre cas $b_1 = 0.11$ et $b_{exp} = 0.43$, on peut déduire la valeur de $b_2 = 0.32$, on constate que l'effet de désordre est de 0.32 qui est supérieur à l'effet structural qui de 0.11.

La Figure.V.5 présente la variation du gap indirect d'énergie E_X^Γ en fonction de la composition x avec et sans effet du désordre. Remarquons qu'en partant de $InSb$ ($x = 0$) vers $AlSb$ ($x = 1$), dans les deux cas, on a une variation qui n'est pas monotone, elle est très faible et pas aussi importante que celle présentée dans la Figure.V.4. La raison pourrait être due au fait que les parents binaires, à savoir: $InSb$ et $AlSb$ sont très proches dans leurs paramètres du réseau. $a(InSb) = 6.49\text{\AA}$ et $a(AlSb) = 6.1355\text{\AA}$.

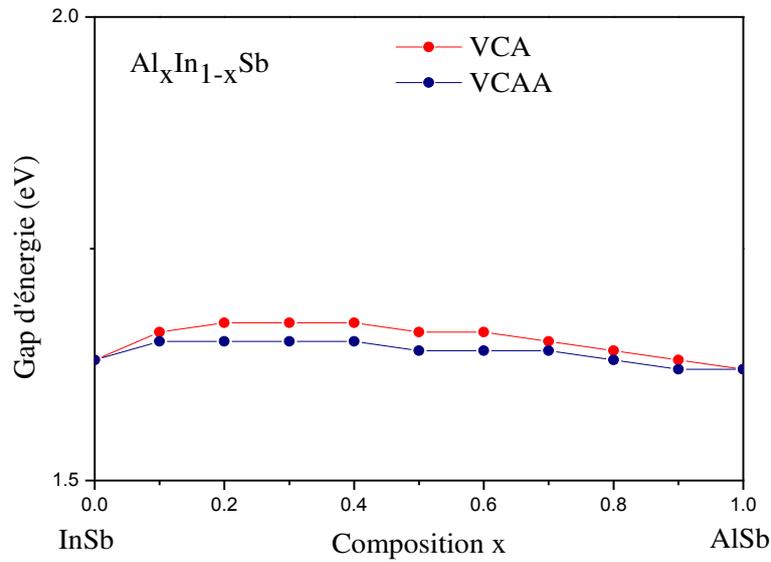


Figure.V.5. Variation du gap indirect d'énergie $E_X^\Gamma(x)$ en fonction de la composition x avec et sans désordre de l'alliage $Al_xIn_{1-x}Sb$.

Les courbes sont interpolées par les deux équations de la forme :

$$E_X^\Gamma(x) = 0.15x^2 + 0.12x + 1.64 \quad \text{VCA} \quad \text{V-11}$$

$$E_X^\Gamma(x) = -0.08x^2 + 0.05x + 1.64 \quad \text{VCAA} \quad \text{V-12}$$

En utilisant la VCA améliorée, le paramètre de bowing (C), pour le gap indirect d'énergie, est égal à -0.08 eV.

Les variations des gaps d'énergies direct E_V^Γ et indirects $E_X^\Gamma(x)$ et $E_L^\Gamma(x)$ en fonction de la composition x , avec et sans effet de désordre de l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$, sont illustrées sur les Figures.(V.6-V.7).

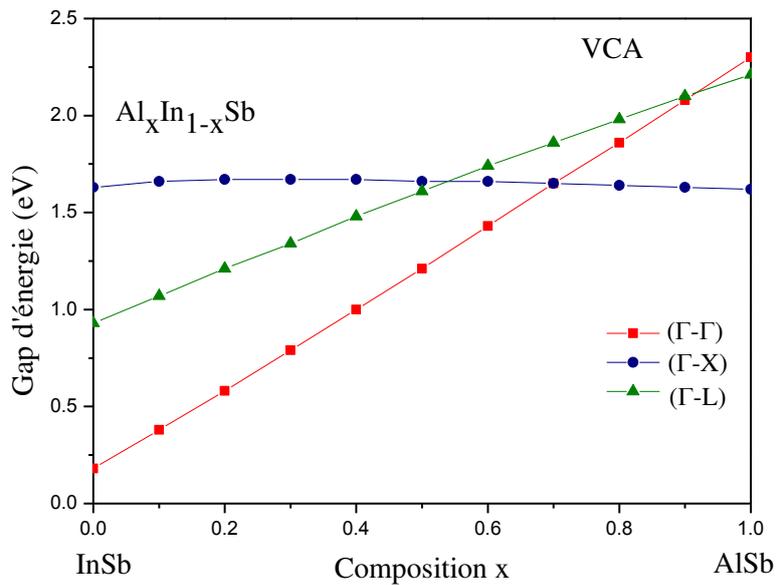


Figure.V.6. Variation des gaps d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} en fonction de la composition x sans désordre de l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

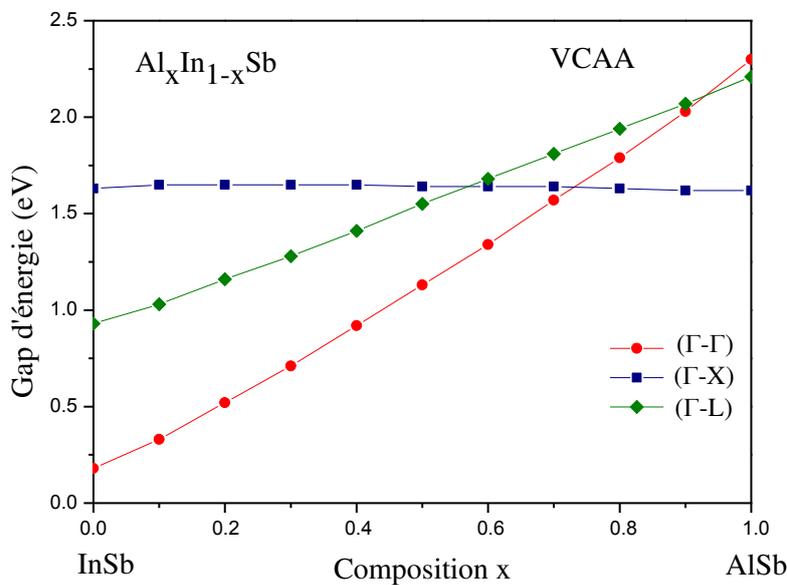


Figure.V.7. Variation des gaps d'énergie direct E_{Γ}^{Γ} et indirects E_{X}^{Γ} et E_{L}^{Γ} en fonction de la composition x avec désordre de l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

On remarque que dans les trois cas, et en passant du composé binaire *InSb* au composé *AlSb* les énergies de gaps direct $E_{\Gamma}^{\Gamma}(x)$ et indirects $E_{X}^{\Gamma}(x)$ et $E_{L}^{\Gamma}(x)$ ne présentent pas le même comportement en fonction de la variation de la composition x .

Nos résultats montrent qu'il existe une transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_X^{Γ} pour $x = 0.7$ quand on utilise la VCA ($p = 0$), ceci est visible sur la figure. V.6. Par contre, quand on utilise la VCAA ($p = 0.075$), la transition des gaps se fait à $x = 0.73$ sur la Figure.V.7, et qui correspond à une énergie de gap de 1.65eV dans les deux cas. Ceci nous indique que l'effet du désordre de la composition x n'a pas d'incidence significative sur la valeur de x qui correspond à la transition des gaps direct E_{Γ}^{Γ} , et indirects E_X^{Γ} et E_L^{Γ} pour l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

Selon notre étude, on peut conclure que l'absorption optiques des gaps dans $Al_xIn_{1-x}Sb$ est directe pour des compositions x qui varient entre $0 \leq x < 0.73$ et indirecte pour $0.73 < x \leq 1$.

V.2.3. La masse effective des électrons

La connaissance de la structure de bande électronique nous a permis de déterminer la masse effective des électrons, qui est un paramètre important dans les propriétés de transfert des semi-conducteurs. Suivant l'approche utilisée par Bouarissa [19] la masse effective de l'électron a été déterminée dans la première bande de conduction au point Γ .

Nos résultats ont montré que la masse effective des électrons pour $InSb$ est de $0.03 m_0$ et pour $AlSb$ est de $0.13 m_0$, où m_0 est la masse de l'électron libre. Nos valeurs sont raisonnables avec les valeurs expérimentales qui sont $0.013 m_0$ [20] et $0.14 m_0$ [20] rapporté par Adachi pour les composés binaires $InSb$ et $AlSb$ respectivement.

La Figure.V.8 illustre la variation de la masse effective de l'électron en fonction de la fraction molaire x , en tenant compte de l'effet du désordre. L'expression analytique de l'équation d'interpolation quadratique, en utilisant la méthode des moindres carrés est :

$$\frac{m_e^*(\Gamma)}{m_0} = -0.0015x^2 + 0.085x + 0.027 \quad \text{V-13}$$

Au fur et à mesure que la concentration de l'Aluminium augmente, c'est-à-dire, en partant de $InSb$ ($x = 0$) à $AlSb$ ($x = 1$), la variation de la masse effective des électrons au

point Γ , qui croit presque linéairement, d'après l'équation d'interpolation, on a un paramètre de courbure très faible égal à (-0.0015). On peut déduire que la mobilité des électrons peut diminuer avec l'augmentation de la composition x .

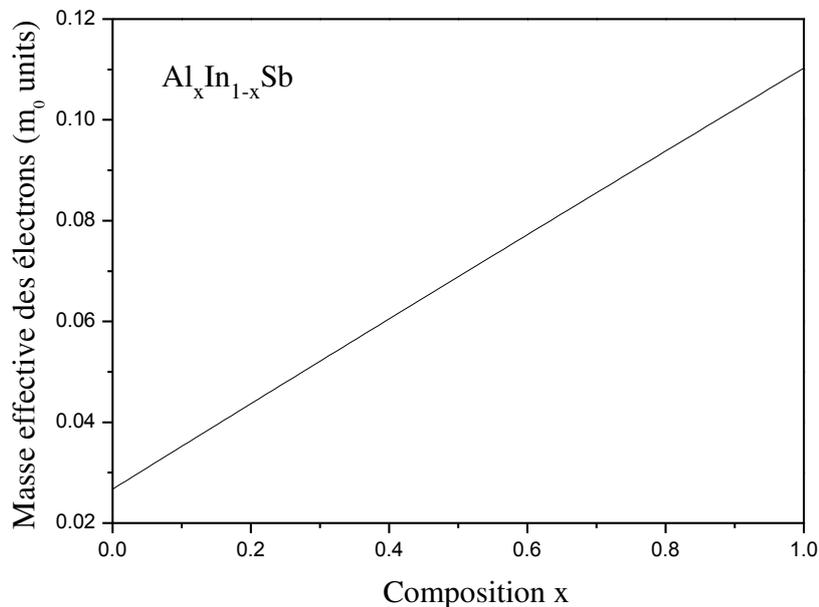


Figure.V.8. La variation de la masse effective de l'électron dans $Al_x In_{1-x} Sb$ en fonction de la fraction molaire.

V.2.4. Densité de charge électronique

L'investigation sur la densité de charge dans les matériaux semi-conducteurs, est une autre caractéristique qui est très importante et nous procure des informations utiles sur les types de liaisons chimiques ainsi que les impuretés interstitielles dans ces matériaux [21-22].

Cette caractéristique découle de la structure de bande. A cet égard, la densité totale de charge électronique de la bande de valence est calculée le long de la direction $[1\ 1\ 1]$ en utilisant les deux points de Chadi et Cohen [23], avec $k_1 = (2\pi / a) (3/4, 1/4, 1/4)$ et $k_2 = (2\pi / a) (1/4, 1/4, 1/4)$, où a est la constante du réseau, et les fonctions d'ondes sont obtenues à partir de la structure de bande tout en prenant compte de l'effet du désordre compositionnel.

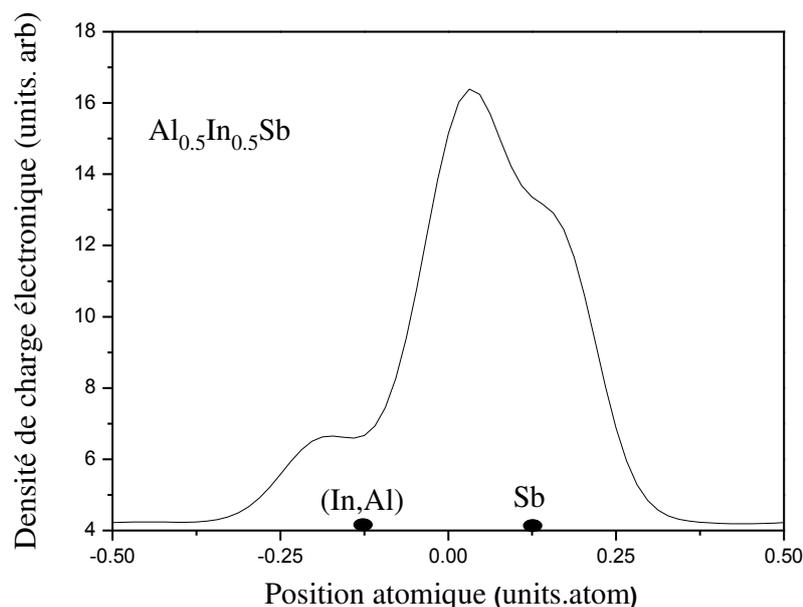


Figure.V.9. Densité totale de charges électroniques de la bande de valence selon la direction [1 1 1] au deux points de Chadi et Cohen de l'alliage ternaire $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$.

Nos résultats, pour l'alliage $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$, sont présentés sur la figure.V.9. On remarque que la distribution de charge d'électrons est essentiellement localisée dans la région interatomique et sur les sites atomiques qui sont occupés par les cations (Al, In) et l'anion (Sb).

La densité est plus décalée vers l'anion que vers le cation. Ceci est dû aux liaisons partiellement covalente et ionique qui caractérisent les semiconducteurs III-V. En effet, la valeur maximale de la répartition de la charge des électrons de valence nous donne généralement des informations sur la principale contribution des liaisons chimiques, dans ce cas elle est située près du site atomique occupé par l'anion. On remarque qu'il y a seulement une petite quantité de charges dans les zones interstitielles.

La densité de charge d'électron calculée le long de la direction [1 1 1] de la première bande de conduction au point Γ de l'alliage $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ en utilisant les fonctions d'ondes provenant de la structure de bande obtenues, et la VCAA, est tracée sur la Figure.V.10.

On notera que la majorité de la charge électronique est localisée sur les sites de l'anion et du cation où elle atteint son maximum à l'anion (Sb).

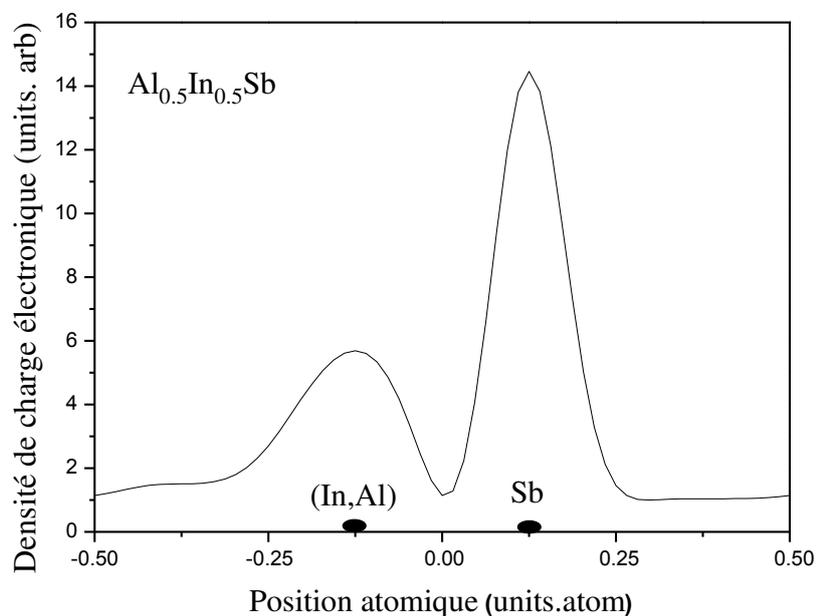


Figure.V.10. Densité totale de charges électroniques de la première bande de conduction selon la direction [1 1 1] de l'alliage ternaire $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$.

Le site occupé par le cation (Al, In) semble être moins entouré par la densité de charge électronique que celle occupée par l'anion. Le minimum de la densité de charge de l'électron de conduction semble approximativement à mi-chemin le long de la liaison. Ceci suggère que la distribution de charge de la première bande de conduction est anti liante et à caractère cationique.

Les mêmes remarques ont été rapportées pour les alliages ternaires semi-conducteurs III-V [17]. Une quantité de charge se trouve dans les régions interstitielles, mais qui n'est pas répartie équitablement entre les régions les plus proches des sites du cation et de l'anion.

V.3. Etude des propriétés optiques

V.3.1. Indice de réfraction

La connaissance de l'indice de réfraction(n) des semi-conducteurs est indispensable pour des dispositifs tels que les cristaux photoniques, les guides d'ondes, les cellules solaires et les détecteurs [7,24]. En tenant compte de l'effet du désordre, on calcule l'indice (n) selon différents modèles pour les semiconducteurs $InSb$, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$, et $AlSb$, les résultats sont dans le Tableau.V.4.

Tableau.V.4. Indice de réfraction (n) des semiconducteurs $InSb$, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et $AlSb$ en utilisant différents modèles.

Material	n calculated from						Expt.
	Moss model	Gupta et Ravindra	Hervé et Vandamme	Reddy et Anjaneyulu	Ravindra	Reddy et Ahammed	
InSb	4.95	3.97	3.93	5.31	4.01		4.0 25]
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	3.13	3.38	3.16	3.47	3.20	3.77	
AlSb	2.86	3.08	2.89	3.11	2.78	3.33	3.2327 [26]

D'après la comparaison des valeurs calculées et des données expérimentales rapportées dans les références [25,26], On peut dire que, pour $InSb$, la valeur de (n) déterminé en utilisant le modèle Ravindra [24] est en meilleur accord avec l'expérience [25] que celles calculées à partir des autres modèles. Cependant, pour le composé final $AlSb$, il semble que la valeur de (n) obtenue à partir du modèle Reddy et Anjaneyulu [27] est plus proche de la valeur expérimentale [26] que celles obtenues à partir des autres modèles.

Le modèle de Reddy et Anjaneyulu a déjà validé ses bons résultats par rapport à l'expérience pour les semi-conducteurs III-V [28] en comparaison à d'autres modèles. Néanmoins, lors de la comparaison entre les valeurs de (n) calculées pour $InSb$ et $AlSb$, on

note que le modèle Gupta et Ravindra est le plus approprié à choisir parmi les autres modèles.

D'autre part, il convient de noter que la relation empirique de Reddy et Ahammed [29] n'est pas valide pour InSb et $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ pour $x = 0.1$ ainsi que pour les matériaux infrarouges avec énergie inférieure à 0,365 eV.

La variation de l'indice de réfraction (n) en fonction de la composition x , calculée à partir des différents modèles, est tracée sur la *Figure.V.11*. On constate que pour tous les modèles étudiés, (n) décroît avec la concentration de l'Aluminium. Le comportement des courbes est monotone. Généralement c'est un trait commun pour la plupart des Semi-conducteurs III-V [30-31], où l'énergie minimale correspond à la plus grande valeur de n . La diminution ou l'augmentation de l'indice de réfraction est directement lié à la valeur du gap en fonction de x . Il diminue quand le gap augmente et vice versa.

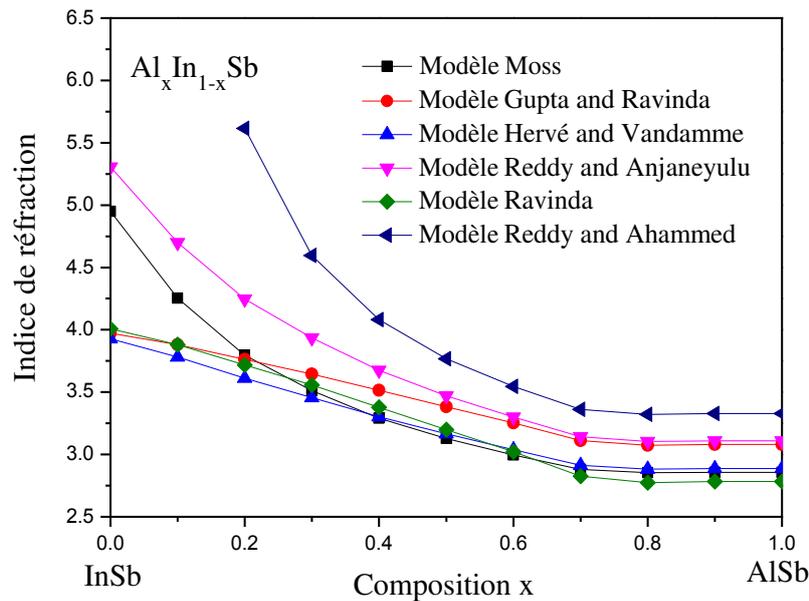


Figure.V.11. La variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.

V.4. Etude des propriétés diélectriques

V.4.1. Constante diélectrique de haute fréquence

La connaissance de (n) nous permet de calculer la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} qui est considérée comme un paramètre crucial dans la conception des dispositifs optiques. A cet effet, la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} sera calculée à partir de l'expression suivante :

$$\epsilon_{\infty} = n^2 \quad \text{V-14}$$

Après avoir opté pour le modèle de Gupta et Ravindra [32] pour le calcul de l'indice de réfraction (n), les valeurs de la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} pour *InSb* et *AlSb* sont 15.76 et 9.49, respectivement. Comparés aux valeurs de l'expérience qui sont de 15.3 (pour *InSb*) et 9.88 (pour *AlSb*) citées dans la Réf. [20], nos résultats semblent concorder à 4% avec ceux de la Réf. [20].

En raison de l'absence de données concernant la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} pour $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ dans la littérature, notre résultat servira comme référence pour des investigations futures. La variation de la constante diélectrique de haute fréquence ϵ_{∞} en fonction de la concentration de l'Aluminium des alliages ternaires $Al_xIn_{1-x}Sb$ est tracée dans la Figure.V.12.

On notera qu'en augmentant la concentration de l'Aluminium, ϵ_{∞} diminue de façon monotone. La tendance de ϵ_{∞} est opposée à celle x et qualitativement semblable à celle de (n). Ceci est un résultat attendu car ϵ_{∞} est obtenue à partir de l'équation V-14. Le comportement de ϵ_{∞} par rapport à x indique que dès qu'on procède de *InSb* ($x = 0$) vers *AlSb* ($x = 1$), l'alliage ternaire d'intérêt ($0 < x < 1$) devient progressivement un bon isolant électrique.

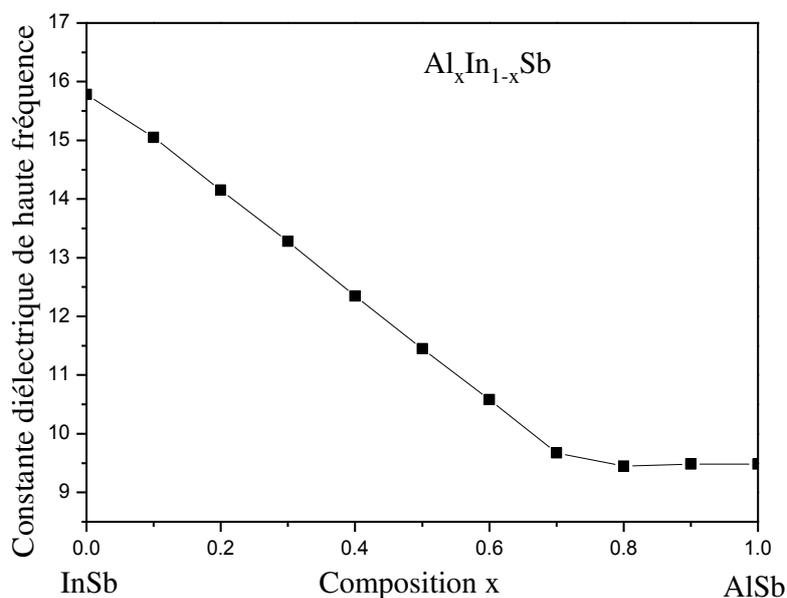


Figure.V.12. La variation de la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $\text{Al}_x \text{In}_{1-x} \text{Sb}$.

V.5. Etude des propriétés positroniques

Pour mieux comprendre les propriétés électroniques de l'alliage $\text{Al}_x \text{In}_{1-x} \text{Sb}$, on envoie un faisceau de positron, la fonction d'onde du positron est calculée en utilisant l'approximation de la particule indépendante. Donc une fraction du faisceau sera rétrodiffusé et une partie pénètre dans le semi-conducteur, il y'aura des collisions élastiques (changement de direction sans perte d'énergie) et des collisions inélastiques (changement de direction avec perte d'énergie). L'énergie diminue suite aux collisions inélastiques au fur et à mesure, jusqu'à thermalisation, d'où le positron aura les mêmes caractéristiques du milieu (même température et même énergie). Quand l'équilibre thermique est atteint on a annihilation.

Les photons gamma nous renseignent sur les propriétés de la structure électronique du semi-conducteur sondé par un faisceau de positron. Les coefficients de Fourier de la densité de charge des électrons de valence, avec et sans l'effet du désordre compositionnel, qui sont

utilisés dans le calcul pour générer les fonctions d'ondes du positron, pour InSb, AlSb et $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ sont énumérés dans le Tableau.V.5.

Tableau.V.5. Les coefficients de Fourier de la densité de charge des électrons de valence pour InSb, AlSb et $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ en utilisant la VCA.

Material	Fourier Coefficient ($e\Omega^{-1}$)						
	000	111	220	311	222	400	331
<i>InSb</i>	8.000	-0.555	0.004	-0.060	-0.244	0.027	-0.003
	0.000	0.162	0.017	-0.002	0.000	0.000	0.000
<i>Al_{0.5}In_{0.5}Sb</i>	8.000	-0.537	-0.003	-0.053	-0.219	0.023	-0.001
	0.000	0.221	0.029	-0.001	0.000	0.000	0.000
<i>AlSb</i>	8.000	-0.511	-0.010	-0.038	-0.173	0.019	0.002
	0.000	0.321	0.051	0.002	0.000	0.000	0.000

V.5.1. Structure de bande positronique

La structure de bandes des positrons de l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$ dans la phase Zinc-blende, calculée aux points de haute symétrie dans la zone de Brillouin et le long des principales lignes de symétrie de la zone de Brillouin, et vu la similarité de ces structures on présente uniquement le spectre énergétique pour $x=0.5$ sur la Figure.V.13.

On remarque qu'il y'a une similitude qualitative entre la structure positronique et celle des électrons. Néanmoins, La structure positronique ne présente pas de bande interdite entre la quatrième et la cinquième bande au point Γ de la zone de Brillouin. Ce qui signifie que pour le positron toutes les bandes sont des bandes de conduction, d'où l'alliage est vu comme un métal.

Il est intéressant de noter la présence d'un gap énergétique entre la première et la deuxième bande de valence au point X, cet écart est également présent dans la structure de bandes électroniques, et il est lié à la différence des potentiels des cations et anions, et il

représente une mesure qualitative de l'ionicité du cristal. On voit que l'effet de désordre est négligeable sur la structure positronique.

La ressemblance entre les deux structures de bandes est attribuée d'une part aux états que prend le positron dans les sites interstitiels dû au phénomène de répulsion par les cœurs ioniques et d'une autre part à la nature de leurs potentiels. Celui du positron est positif et électrostatique à cause de sa charge et l'absence du terme d'échange, tandis que celui de l'électron est électrostatique mais négatif en tenant compte de sa charge.

Cependant, le potentiel électronique utilisé dans nos calculs est aussi positif puisque nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel. Ainsi, le positron voit la même symétrie que l'électron au sein de la matière. La structure de bandes du positron est presque semblable à celle d'une particule libre. Chose intéressante à voir sur la Figure V.13, est que l'état énergétique le plus bas du positron est au point Γ à $k = 0$ où le positron est totalement thermalisé, il est en équilibre thermique avec le milieu où il se trouve. Cette énergie de thermalisation représente le potentiel chimique μ^+ du positron.

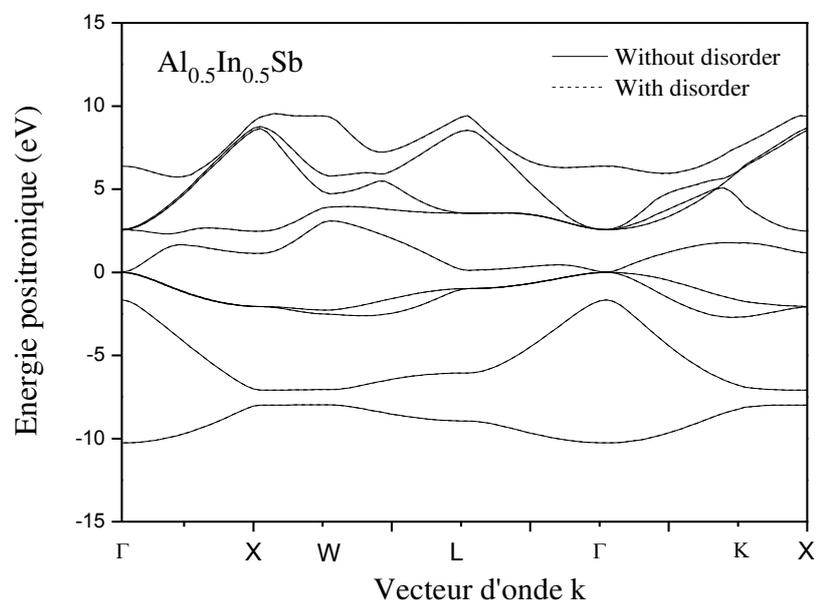


Figure.V.13. Structure de bande positronique de l'alliage ternaire $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$

V.5.2. Le potentiel chimique μ^+

La Figure.V.14 ci dessous présente la variation du potentiel chimique μ^+ en fonction de la composition x . Ce potentiel représente la plus basse énergie de structure de bande positronique, c'est l'énergie de thermalisation. Le potentiel chimique des positons calculés pour les matériaux semi-conducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb* sont présentés au Tableau.V.6.

Tableau.V.6. Le potentiel chimique des positons calculés pour les matériaux semi-conducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb*.

Materiau	$\mu_+(eV)$
InSb	-7.43 ^a
Al _{0.5} In _{0.5} Sb	-7.36 ^a
AlSb	-7.31 ^a

^a Nos calculs

En raison d'absence des données théoriques et expérimentales concernant l'énergie de thermalisation de notre alliage, ces résultats serviront comme référence pour des recherches futures.

Une interpolation quadratique par la méthode des moindres carrés des données présentées sur la Figure.V.14 est présentée sous la forme polynomiale suivante:

$$\mu_+(x) = -0.08x^2 + 0.19x - 7.44 \quad \text{V-15}$$

En partant de *InSb* ($x = 0$) vers *AlSb* ($x = 1$), On constate une variation monotonique du potentiel chimique du positron μ^+ en fonction de la concentration x , cependant, d'après l'équation V-15 on remarque un très faible paramètre de courbure (-0.08eV) comparé à celui du potentiel chimique de l'électron μ^- égal à (0.511eV).

Cette augmentation du potentiel chimique μ^+ , quand on part de *InSb* à *AlSb* est en accord avec la durée de vie du positron dans le massif dans ce type d'alliage *Al_xIn_{1-x}Sb*. Sachant que la thermalisation du positron est au voisinage du minimum de la plus basse bande d'énergie au point $k = 0$.

Au point $x = 0$ le potentiel μ^+ est égale à -7.43eV, cette valeur est au dessous de celle du potentiel chimique au point $x = 1$ qui est de l'ordre à -7.31 eV. C'est-à-dire le positron atteindra l'équilibre thermique dans l'échantillon AlSb avant celui de InSb. Ceci est du au fait

que InSb est plus métallique que l'AlSb, vu leurs énergies de gaps de 0.18eV et 1.62eV respectivement.

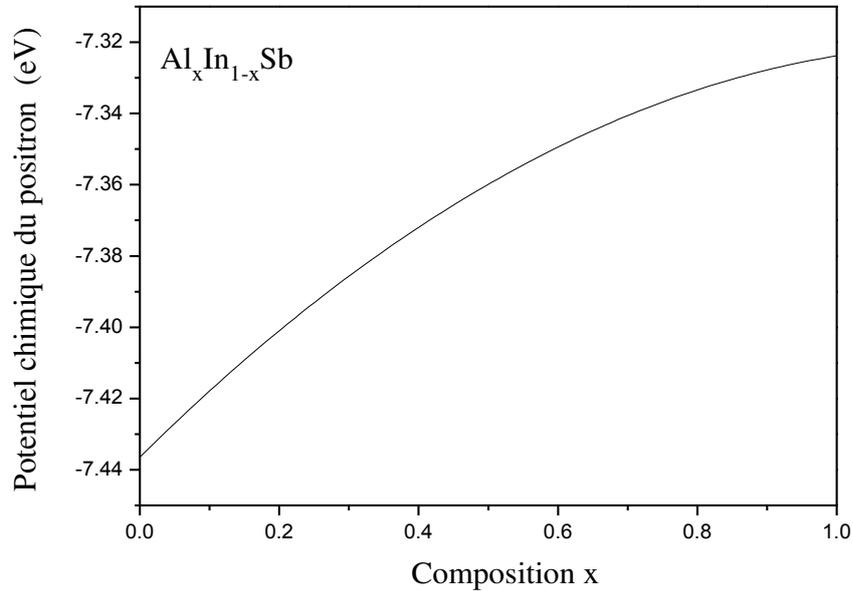


Figure.V.14. La variation du potentiel chimique du positron de l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x} Sb$.

V.5.3. Affinité positronique

L'affinité du positron indiquée par A_+ est une caractéristique de base pour les matériaux, son rôle important intervient dans la compréhension du piégeage des positrons aux interfaces et aux précipités [33]. L'affinité positronique A_+ peut être obtenue facilement en utilisant la relation [34].

$$A_+ = \mu_- + \mu_+ \quad \text{V-16}$$

Où

μ_- : Potentiel chimique de l'électron égal à $E_g/2$

L'affinité positronique est calculée pour les matériaux semi-conducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb* et dont les valeurs sont énumérées au Tableau.V.7.

Tableau.V.7. L'affinité positronique calculés pour les matériaux semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.

Materiau	A^+ (eV)
InSb	-7.52 ^a
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	-7.92 ^a
AlSb	-8.12 ^a

^a Nos calculs

La Figure.V.15 représente l'affinité du positron en fonction de la composition x de l'alliage ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$. On constate que A_+ décroît d'une façon monotone. Notre résultat est interpolé quadratiquement par la méthode des moindres carrés et qui correspond à l'expression suivante :

$$A_+(x) = 0.43x^2 - 1.13x - 7.48 \quad \text{V-17}$$

Le terme quadratique de l'équation V-17 est le bowing optique de l'affinité positronique. Il indique que le comportement non-linéaire de A_+ par rapport à la composition x

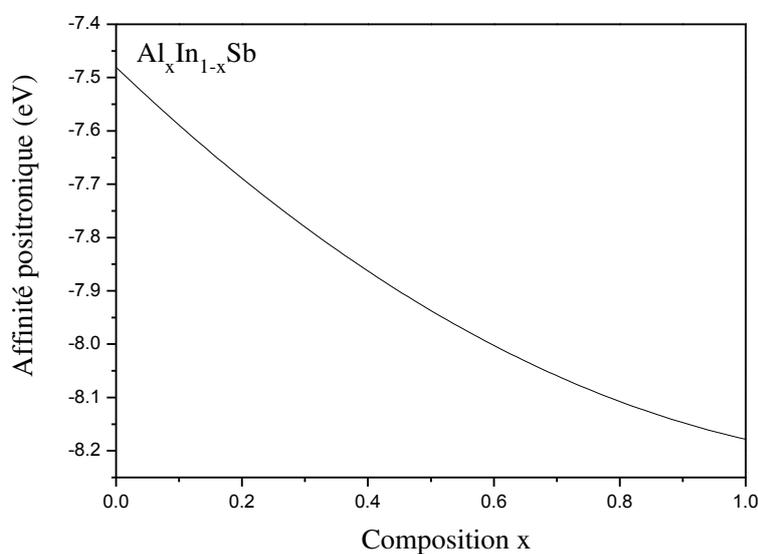


Figure.V.15. La variation de l'affinité positronique dans l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x} Sb$ en fonction de la fraction molaire x .

Pour enrichir cette étude, on calcule l'affinité positronique pour les hétérostructures formées par des matériaux distincts M_1 et M_2 en contact, les potentiels chimiques d'électrons s'alignent mutuellement, et ainsi la différence entre les niveaux de positron peut donner la différence entre les affinités du positron dans M_1 et M_2 comme suit [35].

$$\Delta A_+^{M_1, M_2} = A_+^{M_1} - A_+^{M_2} \quad \text{V-18}$$

En utilisant les valeurs de A_+ dans le Tableau V.6, l'affinité du positron aux différentes hétérostructures formées par les matériaux semiconducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb* a été calculé. Par exemple, *InSb* et *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* en contact (hétérostructure *InSb/Al_{0.5}In_{0.5}Sb*), le positron favorise *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* avec une différence d'affinité de 0.40 eV. D'autre part, pour *InSb* et *AlSb* en contact (hétérostructure *InSb/AlSb*), le positron favorise *AlSb* avec une différence d'affinité de 0,60eV, alors qu'il favorise *AlSb* avec une différence d'affinité de -0,20eV pour l'hétérostructure *AlSb/Al_{0.5}In_{0.5}Sb*. Il est à noter que si M_2 est un précipité, la relation $\Delta A_+^{M_1, M_2} > 0$ est une condition nécessaire pour le piégeage des positrons dans ce précipité.

V.5.4. Les masses effectives des positrons

La structure de bande positronique permet la détermination de la masse effective des positrons, qui est un paramètre important dans les propriétés de transfert des semi-conducteurs. Suivant l'approche utilisée par Bouarissa [19] la masse effective du positron est déterminée au minimum de la plus basse bande en énergie, cette grandeur est notée m_b^* . Nos résultats ont montré que la masse effective du positron est de $1.03 m_0$ pour *InSb* et de $1.29 m_0$ pour *AlSb*, où m_0 est la masse du positron libre. Une masse effective égale à $m_b^* = 1.5m_0$, rapportée dans la littérature. Cette valeur est considérée comme un compromis entre plusieurs travaux théoriques et expérimentaux [35].

Par rapport aux valeurs que nous avons obtenues, il semble que nos résultats sont inférieurs à cette valeur. Ce désaccord dans les résultats a été expliqué par Panda et collaborateurs, est dû à la négligence de la contribution des interactions du positron-phonon et positron-Plasmon.

Tenant compte de l'effet de désordre, la Figure.V.16 illustre la variation de la masse effective de l'électron en fonction de la concentration de l'Aluminium dans l'alliage ternaire semiconducteur $Al_x In_{1-x} Sb$ dans la phase Zinc-blende, en tenant compte de l'effet du désordre. L'expression analytique de l'équation d'interpolation quadratique, en utilisant la méthode des moindres carrés est

$$\frac{m_b^* (\Gamma)}{m_0} = -0.0016x^2 + 0.282x + 1.034 \quad \text{V-19}$$

Comme pour l'électron, on voit clairement sur la courbe, que la variation de la masse effective des électrons au point Γ en fonction de la concentration de l'Aluminium croît presque linéairement, et cela se confirme par l'équation d'interpolation, qui présente un paramètre de courbure très faible égal à (-0.0016). Ce comportement suggère que la mobilité des positrons peut diminuer avec l'augmentation de la concentration de l'Aluminium.

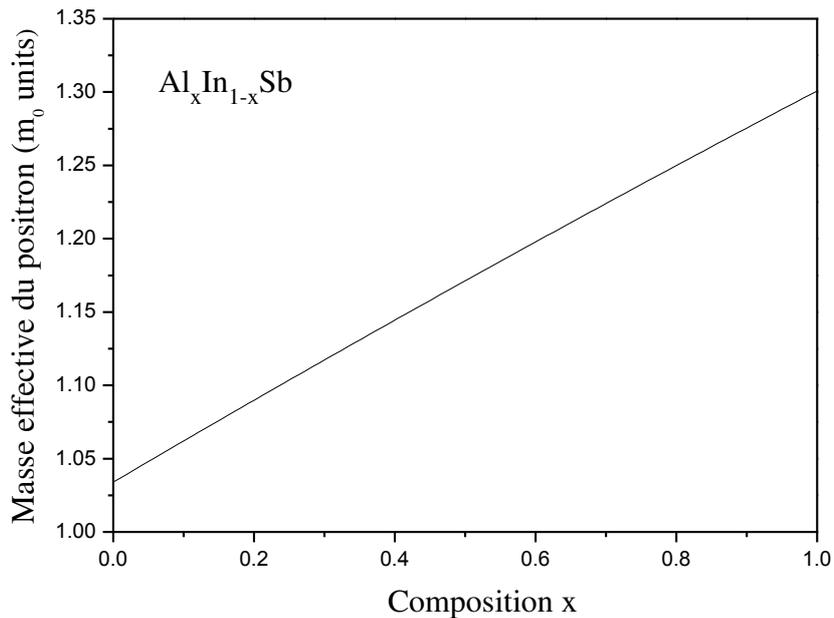


Figure.V.16. La variation la masse effective du positron dans l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$.

V.5.5. Densité de charge positronique

L'étude de la densité de charge électronique dans les semi-conducteurs est d'un intérêt fondamental aux chercheurs dans la physique de la matière condensée, car elle nous donne un aperçu qualitatif des tendances des liaisons chimiques dans les matériaux [21]. À cet égard, la densité de charge positronique a été calculé en utilisant les fonctions d'onde dérivant des structures de bandes positroniques.

La Figure.V.17 représente la densité de charge positronique calculée le long de la direction [111] pour l'alliage $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ au point de haute symétrie Γ . On voit une forte distribution de charge autour de l'anion dans la région interstitielle qu'autours du cation, cela est du au fait que la répulsion du positron par les ions+vers les régions interstitielles (les régions interatomiques) sont vides.

Le positron a tendance à être repoussé par la cellule contenant un ion de taille importante et par conséquent à être attirés par la cellule avec une grande densité d'électrons. Il semble que la densité de charge de positrons dans la région interstitielle la plus proche de l'anion est plus importante que celui de la région la plus proche au interstitiel cation suggérant ainsi que le positron a une affinité pour le premier.

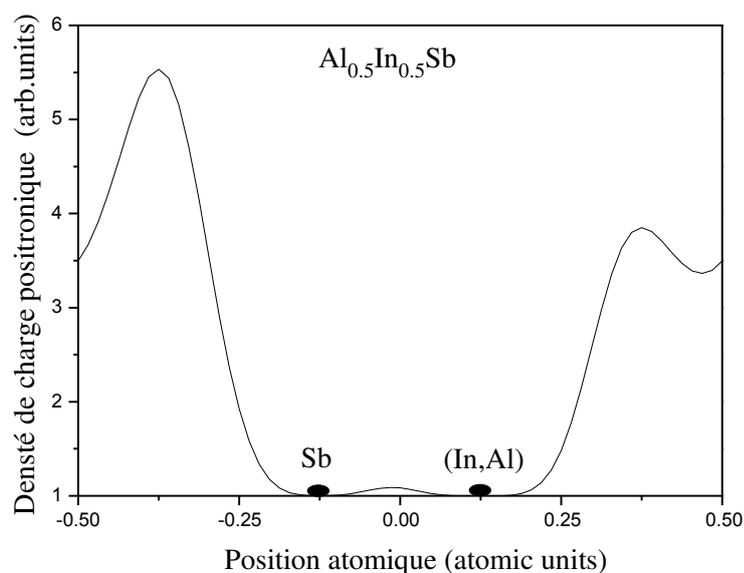


Figure.V.17. Densité de charges positroniques selon la direction [1 1 1] de l'alliage ternaire $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$.

V.5.6. La durée de vie du positron :

Un des paramètres les plus importants dans les études d'annihilation de positron est la durée de vie du positron notée τ et qui est calculé selon la relation proposée par Siethoff [37].

$$\tau = c a^{3/2} \quad \text{V-20}$$

Avec :

$$c = 543.8 \text{ Ps/nm.}$$

a : paramètre de maille.

Cette relation repose sur la durée de vie du positron et le volume atomique des semiconducteurs tétraédriques et ses résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux [37]. Selon nos calculs, la durée de vie du positron est de 284 et 261 ps pour InSb et AlSb respectivement. En absence de données expérimentales et théoriques, nos calculs qui restent seulement prédictifs, peuvent servir de référence a des travaux futurs.

Néanmoins, en se basant sur des données expérimentales, la vie du positron, pour le GaAs est de 232 ps, valeur citée par Puska et al [38]. Sachant que le paramètre de réseau du GaAs est de 5.653°A . Une valeur inférieure au paramètre de réseau de AlSb qui est de 6.1355°A et de celle de InSb qui est de 6.49°A . Suite à ces données, on s'attend à ce que la durée de vie du positron pour InSb soit plus grande que celle de AlSb qui est automatiquement plus grande que celle du GaAs. Ce dernier est en accord avec nos résultats.

La Figure V.18 nous montre un comportement presque linéaire de la durée du positron en fonction de la concentration de l'Aluminium dans l'alliage semiconducteur ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$, On note que la durée de vie du positron de InSb est supérieur à celle de AlSb. Comme l'ionicté de InSb est $fi = 0.321$, où fi présente la fraction ionique qui mesure le pourcentage d'ionicté d'une liaison compris entre 0 et 1, est supérieur à celle de AlSb ($fi = 0.250$), selon l'échelle d'ionicté de Phillips [39]. On peut conclure que la durée de vie du positron dépend de l'ionicté du cristal.

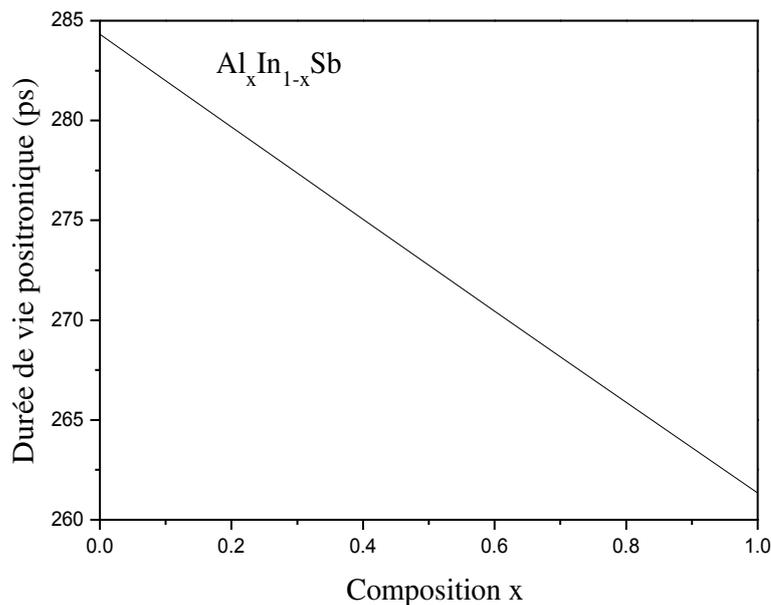


Figure.V.18. Durée de vie positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$.

V.5.7. Constantes Élastiques

Les propriétés élastiques des matériaux sont liées à plusieurs propriétés fondamentales de l'état du solide, telles que les potentiels interatomiques, et sont associées avec les ondes longitudinales des photons acoustiques, ainsi il est important de déterminer les constantes élastiques de notre matériau.

Pour cela les constantes élastiques tels que C_{11} , C_{12} et C_{44} de l'alliage semiconducteur ternaire $Al_x In_{1-x} Sb$, sont calculées en utilisant la même approche utilisée par Bouarissa [40] pour le calcul de C_{11} et C_{12} et le modèle du champ des valences rapporté dans les références [41,42] pour le calcul de C_{44} .

Nos résultats, sont illustrés dans le Tableau.V.8 et qui semblent en bon accord avec les résultats rapportés par la littérature [20]. Pour les matériaux semiconducteurs InSb, et AlSb et par manque de référence expérimentales et théoriques, le résultats pour $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$ demeure une prédiction.

Tableau.V.8. Constantes élastiques et leurs moyenne $\langle C_{ii} \rangle$ des alliages InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ and AlSb.

Matériau	Constantes élastiques ($10^{11} dyn/cm^2$)			
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\langle C_{ii} \rangle$
InSb	6.26 ^a	2.71 ^a	2.526 ^a	7.011 ^a
	6.608 ^b	3.531 ^b	3.027 ^b	
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	8.073 ^a	3.471 ^a	3.267 ^a	9.039 ^a
AlSb	9.766 ^a	4.188 ^a	3.956 ^a	10.933 ^a
	8.769 ^b	4.341 ^b	4.076 ^b	

^a This work

^b Experimental data reported in Ref. [20].

La Figure.V.19 présente la variation des constantes élastiques en fonction de la concentration de l'Aluminium. L'expression analytique des courbes obtenues par interpolation quadratique sont :

$$C_{11}(x) = -0.25x^2 + 3.78x + 6.24 \quad V-21$$

$$C_{12}(x) = -0.092x^2 + 1.58x + 2.70 \quad V-22$$

$$C_{44}(x) = -0.11x^2 + 1.55x + 2.52 \quad V-23$$

On observe que lorsqu'on augmente la concentration de l'aluminium, les constantes C_{11} , et C_{12} croient non linéairement alors que la courbe C_{44} croient presque linéairement. Toutes ces constantes varient d'une façon monotone et présentent un comportement qualitatif. On note aussi que le taux de variation est plus important dans la courbe C_{11} .

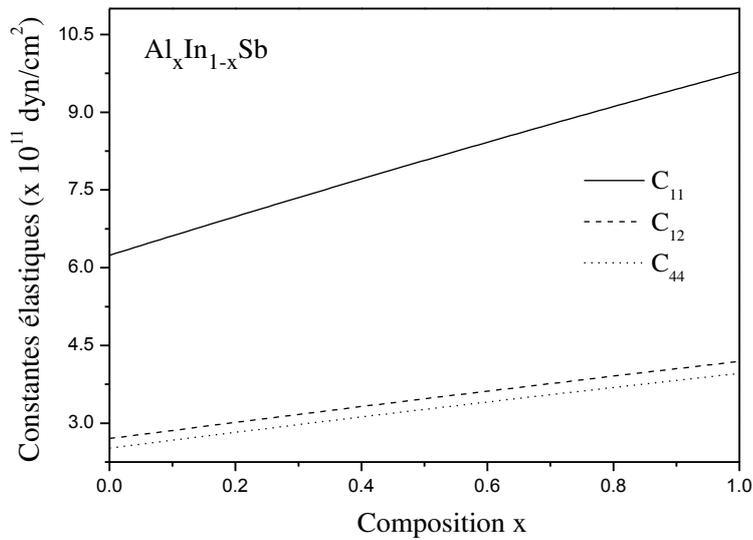


Figure.V.19. La variation des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de l'alliage semiconducteur ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

La connaissance des constantes élastiques rend possible la détermination de la moyenne des constantes $\langle C_{ii} \rangle$ selon l'approximation de Boev et al [35]. En effet $\langle C_{ii} \rangle$ est la constante élastique associée avec les ondes longitudinales, et c'est la moyenne de la propagation à travers les différentes directions. Cette dernière a été calculée en utilisant l'expression de l'approximation [35].

$$\langle C_{ii} \rangle \approx 1/2 (C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) \quad \text{V-24}$$

Les résultats présentés au Tableau.V.7 ne sont qu'une prédiction et peuvent servir de référence pour de futures études. La variation de $\langle C_{ii} \rangle$ en fonction la concentration de l'Aluminium pour l'alliage ternaire semiconducteur dans la phase blende-zinc $Al_xIn_{1-x}Sb$ est reportée sur la Figure.V.20.

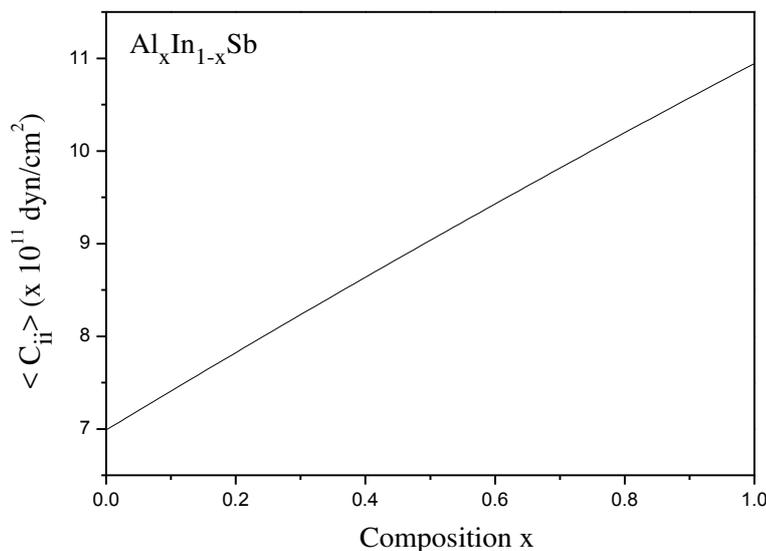


Figure.V.20. La variation de la moyenne des constantes élastiques $\langle C_{ii} \rangle$ de l'alliage semiconducteur ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

L'expression analytique de la courbe obtenue par interpolation quadratique est:

$$\langle C_{ii} \rangle(x) = -0.28x^2 + 4.23x + 6.99 \quad \text{V-25}$$

A noter que lorsqu'on passe de $InSb$ ($x = 0$) à $AlSb$ ($x = 1$), $\langle C_{ii} \rangle$ augmente de façon monotone à partir de $7.011 \cdot 10^{11}$ jusqu'à $10.933 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$.

V.5.8. Potentiel de déformation du positron

Une autre caractéristique intéressante à étudier, c'est le potentiel de déformation E_d^+ qui est calculé à partir de la relation [35] :

$$E_d^+ = V_0 \frac{dA_+}{dV} \quad \text{V-26}$$

Où :

V_0 : Volume initial du cristal à une pression $P = 0$.

V : Volume du cristal à une pression $P \neq 0$.

La dérivée de l'affinité positronique par rapport au volume est obtenue à partir du calcul de la structure de bande électronique et positronique avec la méthode des pseudopotentiels couplée avec l'approximation de la particule indépendante pour différentes constantes de réseau sous des pressions différentes.

Le paramètre réseau est une fonction qui dépend de la pression et qui est calculée à partir de l'équation d'état de Murnaghan. Les valeurs du module de compressibilité (B_0) à l'équilibre (Pression nulle), ainsi que sa première dérivée par rapport à la pression (B'_0), des composants binaires *AlSb* et *InSb* respectivement [20], utilisées dans notre calcul sont :

$$B_0 = 4.56 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2, B'_0 = 4.899 \text{ et } B_0 = 5.82 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2, B'_0 = 4.55.$$

La dérivée des facteurs de forme pseudopotentiels par rapport à la pression, dont on a besoin pour cette étude, est obtenue empiriquement par ajustement de premier ordre du coefficient de la pression de la première bande interdite aux points de haute symétrie Γ , X et L de la zone de Brillouin, des composants binaires *AlSb* et *InSb* respectivement sont [43] :

$$\frac{dE_{\Gamma\Gamma}}{dp} = 17.6, \frac{dE_{\Gamma X}}{dp} = 2.7, \frac{dE_{\Gamma L}}{dp} = 8.3 \text{ (} \times 10^{-3} \text{ eV/kbar)}.$$

$$\frac{dE_{\Gamma\Gamma}}{dp} = 10, \frac{dE_{\Gamma X}}{dp} = -1.5, \frac{dE_{\Gamma L}}{dp} = 6.4 \text{ (} \times 10^{-3} \text{ eV/kbar)}.$$

Le Tableau.V.9 présente les paramètres pseudopotentiels ou les facteurs de formes, ajustés à différentes pression, allant de 0 kbar à 20kbar, des composants binaires *AlSb* et *InSb* respectivement. Sur le Tableau.V.10 on présente le potentiel de déformation calculé pour les matériaux semiconducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb*. Ces résultats ne sont qu'une prédiction, vu l'absence de références théoriques ou expérimentales.

Tableau.V.9. Paramètres pseudopotentiels de la structure Zinc-blende
^{a)}InSb et ^{b)}AlSb à différentes pressions jusqu'à 20 Kbar.

a) InSb

Pseudopotential parameters	P = 0 Kbar	P = 5 Kbar	P = 10 Kbar	P = 15 Kbar	P = 20 Kbar
$V_s(3)$ (Ry)	-0.201294	-0.201109	-0.200967	-0.200878	-0.200727
$V_s(8)$ (Ry)	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
$V_s(11)$ (Ry)	0.028338	0.030451	0.031422	0.034612	0.036643
$V_A(3)$ (Ry)	0.064495	0.063882	0.063319	0.062763	0.062233
$V_A(4)$ (Ry)	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
$V_A(11)$ (Ry)	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015
Lattice Constant (at. Units)	12.2684	12.2248	12.1835	12.1443	12.1070

b) AlSb

Pseudopotential parameters	P = 0 Kbar	P = 5 Kbar	P = 10 Kbar	P = 15 Kbar	P = 20 Kbar
$V_s(3)$ (Ry)	-0.225597	-0.223732	-0.221471	-0.219438	-0.217605
$V_s(8)$ (Ry)	0.028086	0.025325	0.021853	0.018512	0.015273
$V_s(11)$ (Ry)	0.062230	0.065721	0.069888	0.073990	0.078050
$V_A(3)$ (Ry)	0.007109	0.007109	0.007109	0.007109	0.007109
$V_A(4)$ (Ry)	0.058960	0.058960	0.058960	0.058960	0.058960
$V_A(11)$ (Ry)	0.004544	0.004544	0.004544	0.004544	0.004544
a (Unités atm)	11.5983	11.5658	11.5345	11.5045	11.4755

Tableau.V. 10. Potentiel de déformation calculé pour les matériaux semiconducteurs InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ et AlSb.

Material	E_d^+ (eV)
InSb	3.88 ^a
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	3.57 ^a
AlSb	3.28 ^a

^a Nos calculs

La variation du potentiel de déformation Ed^+ en fonction de la concentration de l'Aluminium pour l'alliage ternaire semiconducteur est schématisée sur la Figure.V.21 .

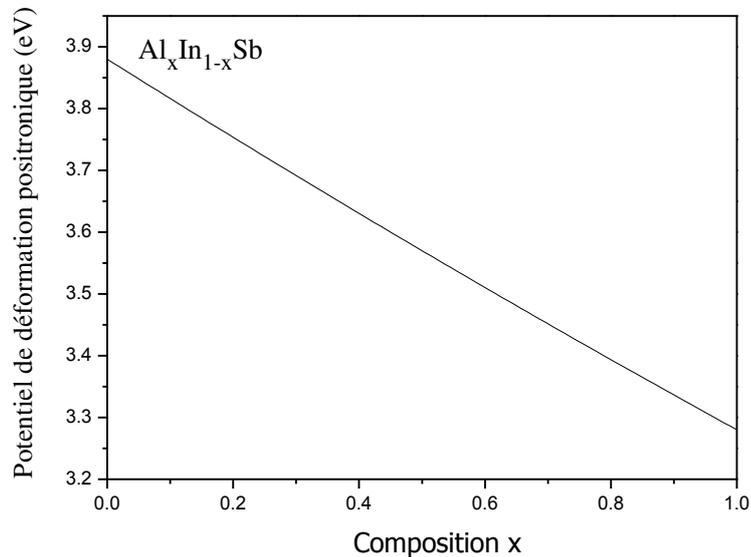


Figure.V.21. Potentiel de déformation positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$.

L'expression analytique de l'interpolation quadratique de la courbe est donnée par l'équation V-10.

$$E_d^+ = +0.04x^2 - 0.64x + 3.88 \quad \text{V-27}$$

On observe que quand on augmente la concentration de l'Aluminium en allant de $InSb$ ($x = 0$) à $AlSb$ ($x = 1$), le potentiel de déformation Ed^+ diminue d'une façon monotone, et présente un comportement presque linéaire, et ceci se confirme par l'équation V-10, qui présente un paramètre de courbure très faible égal à 0.04 eV.

V.5.9. Constante de diffusion du positron

A partir de la théorie du potentiel de déformation, on peut avoir la constante de diffusion du positron D_+ , qui est due à la diffusion élastique des phonons qui s'écrit sous la forme [35] :

$$D_+ = \left[\frac{8\pi}{9} \right]^{1/2} \frac{\hbar^4 \langle C_{ii} \rangle}{m_+^{*5/2} (K_B T)^{1/2} E_d^{+2}} \quad \text{V-28}$$

Où :

m_+^* : Masse effective du positron.

T : Température absolue.

$\langle C_{ii} \rangle$: Constante élastique.

La masse effective du positron a été calculée selon l'approche utilisée par Bouarissa [19]. Nos résultats concernant la constante de diffusion, pour les matériaux semiconducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb*, sont énumérés sur le Tableau. V.11.

Tableau.V.11. Constante de diffusion calculée pour les matériaux semiconducteurs *InSb*, *Al_{0.5}In_{0.5}Sb* et *AlSb*.

Material	D_+ (cm ² /s)
InSb	6.86 ^a
Al _{0.5} In _{0.5} Sb	7.29 ^a
AlSb	8.53 ^a

^a Nos calculs

Ces résultats ne sont qu'une prédiction, vu l'absence de références théoriques ou expérimentales. La variation de la constante de diffusion en fonction de la concentration de l'Aluminium est illustrée sur la Figure.V.22.

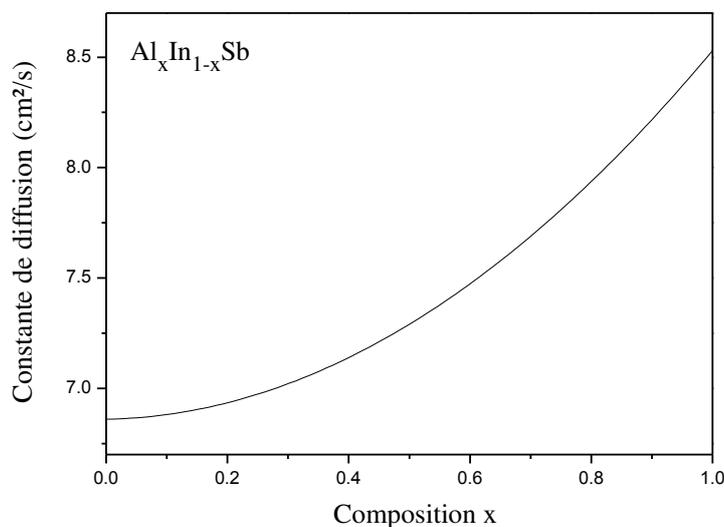


Figure.V.22. Constante de diffusion positronique de l'alliage ternaire $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$.

L'expression analytique de l'interpolation quadratique de la courbe est donnée par l'équation V-29.

$$D_+(x) = 1.62x^2 + 0.05x + 6.86 \quad \text{V-29}$$

En augmentant la concentration de l'Aluminium et en allant de $InSb$ ($x = 0$) à $AlSb$ ($x = 1$), la constante de diffusion du positron D_+ augmente d'une façon monotone, présentant un comportement non linéaire avec un large paramètre de courbure égal à 1.62. En se basant sur cette tendance de l'énergie de la bande interdite, et celle de la constante de diffusion du positron dans les alliages semi-conducteurs ternaires $Al_xIn_{1-x}Sb$, on peut conclure que la constante de diffusion du positron suit la même tendance que celle de l'énergie de bande interdite.

V.6. Conclusion

Dans ce chapitre, on a fait une étude théorique sur les propriétés électroniques, optiques, diélectriques et positroniques de l'alliage semi-conducteur ternaire III-V à base d'antimoniure cristallisant dans la phase Zinc-blende à savoir : $Al_xIn_{1-x}Sb$. Ces alliages semiconducteurs ternaires III-V. La méthode de calcul utilisée pour les états électroniques est celle des

pseudopotentiels. Cette dernière a été couplée à l'approximation du cristal virtuel (VCA) dans le traitement des alliages. Par contre pour l'étude des états positroniques, la méthode des pseudopotentiels a été combinée avec le modèle de la particule indépendante.

Nos résultats montrent une transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_{X}^{Γ} au point $x = 0.7$. Les structures de bandes, les densités de charges, les masses effectives, l'indice de réfraction (n), la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_{∞}) ont été étudiés en fonction de la concentration de l'Aluminium. D'autres caractéristiques ont fait l'objet de cette étude, telles que les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , ainsi que leurs moyennes $\langle C_{ii} \rangle$, le potentiel chimique positrons μ^+ , l'affinité positronique A^+ , le potentiel de déformation Ed^+ , et la constante de diffusion du positron D_+ . Nos résultats sont en très bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques, sauf que par manque de références théoriques ou expérimentales, d'autres résultats restent prédictifs ou peuvent servir de référence pour les recherches futures.

Références bibliographiques



Références bibliographiques

- [1] F. Lévy, « Physique et technologie des semiconducteurs », Ed PPUR presses polytechniques, (1995).
- [2] C. Kittel, « Physique de l'état solide, Ed Dunod, Paris, (2001).
- [3] [T. Kobayasi, H. Nara, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7.
- [4] N. Bouarissa, H. Aourag, Mater. Sci. Eng. B 34 (1995) 58.
- [5] A. Bechiri, N. Bouarissa, Superlattices Microstruct. 39 (2006) 478.
- [6] N. Bouarissa, H. Aourag, Infrared Physics & Technology 36 (1995) 973.
- [7] S. Adachi, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869.
- [8] C. Alibert, A. Joullié, A.M. Joullié, C. Ance, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946.
- [9] P. Harrison, « Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics », Ed Wiley, New York,(2000).
- [10] L. Vegard, Z. Phys. 5 (1921) 17.
- [11] S.J.Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, J. Phys. Condens. Matter, 2 (1990)3253.
- [12] N. Bouarissa, Phys. Lett. A 245 (1998) 285.
- [13] K. Kassali, N. Bouarissa, Solide-State Electronics. 44 (2000) 501.
- [14] J.R. Chelikowsky, T. J. Wagner A. Tin, J.H. Weaver, Phys. Rev. B40 (1989) 9644.
- [15] N. Bouarissa, R. N. West, H. Aourag, Phys. Stat. Sol. 188 (1995) 723.
- [16] S. Isomura, F.G.D. Prat, J.C. Woolley, Phys. Status Solidi A 65 (1974) 213.
- [17] N. Bouarissa, Mater. Chem. Phys. 124 (2010) 336.
- [18] N. Bouarissa, Eur. Phys. J. B 32 (2003) 139.
- [19] N. Bouarissa, J. Phys. Chem. Solids 67 (2006) 1440.
- [20] S. Adachi, « Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors », Ed Wiley, New York, (2005).
- [21] S. L. Richardson, M. L. Cohen, S. G. Louie, J. R. Chelikowsky, Phys. Rev. B 33 (1986) 1177.
- [22] N. Bouarissa, Eur. Phys. J. B 26 (2002) 153.
- [23] D. J. Chadi, M. L. Cohen, Phys. Rev. B 8 (1973) 5747.

- [24] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21.
- [25] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol. 2, World Scientific, Singapore, (1999).
- [26] M.J. Weber, *Handbook of Optical Materials*, Springer, Berlin, (2003).
- [27] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, *Phys. Status Solidi B* 174 (1992) k91.
- [28] M.S. Al-Assiri, N. Bouarissa, *Superlatt. Microstruct.* 59 (2013) 144.
- [29] R.R. Reddy, Y.N. Ahammed, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825.
- [30] N. Bouarissa, M. Boucenna, *Phys. Scr.* 79 (2009) 015701.
- [31] N. Bouarissa, *Mater. Lett.* 60 (2006) 2974.
- [32] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, *Phys. Status Solidi B* 100 (1980) 715.
- [33] J. Kuriplach, M. Sob, G. Brauer, W. Anward, E.M. Nicht, P. G. Coleman, N. Wagner, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 1948.
- [34] M.J. Puska, P. Lanki, R.M. Nieminen, *J. Phys. Condens. Matter* 1 (1989) 6081.
- [35] O.V. Boev, M.J. puska, R.M. Nieminen, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 7786.
- [36] H. Siethoff, *phys. Stat. Sol. (b)* 205 (1998) R3.
- [37] N. Bouarissa, *philos. Meg. B* 80 (2000) 1743.
- [38] M.J. Puska, S. Mäkinen, M. Manninen, R.M. Nieminen, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 7666.
- [39] J. C. Phillips, « *Bands and Bands in semiconductors* », Ed Academic, New York, (1973).
- [40] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 100 (2006) 41.
- [41] W.A. Harrison, « *Electronic structure and the properties of solids*, Freeman », Ed Freeman, New York, (1980).
- [42] L. Hannachi, N. Bouarissa, *Physica B* 404 (2009) 3650.
- [43] Y.F. Tsay, S.S. Mitra, B. Bendow, *Phys. Rev. B* 10 (1974) 1476.

Conclusion générale



Conclusion générale

Cette thèse a été conçue dans le but d'élaborer une étude théorique sur les propriétés électroniques structurales, optiques, diélectriques et positroniques dans le massif, à la surface et au voisinage de la surface de l'alliage ternaire semi-conducteur $Al_x In_{1-x} Sb$ dans la phase Zinc-blende, en se basant sur la méthode du pseudopotentiel empirique local. Pour modéliser le potentiel de l'alliage nous avons fait appel à l'approximation du cristal virtuel (VCA). Les états positroniques sont déterminés en utilisant la méthode des pseudopotentiels combinée au modèle de la particule indépendante.

La méthode des pseudopotentiels, est un outil de calcul puissant en physique du solide. Cette approche permet avec une grande facilité et un temps de calculs raisonnable par rapport à d'autres méthodes, d'obtenir par simulations informatique, les propriétés physiques des différents matériaux.

L'étude a été faite sur les composés binaires $InSb$ et $AlSb$, ainsi que sur l'alliage ternaire $Al_x In_{1-x} Sb$ au point $x = 0.5$. Les énergies de gap direct E_{Γ}^{Γ} et indirect E_X^{Γ} calculées par la méthode des pseudopotentiels pour les différents semiconducteurs cités, coïncident parfaitement avec les valeurs expérimentales et théoriques de la littérature rapportées par S. Adachi. On note qu'une transition du gap direct E_{Γ}^{Γ} au gap indirect E_X^{Γ} a été décelée au point $x = 0.7$ en utilisant uniquement la VCA, et au point $x = 0.73$ quand on utilise la VCA améliorée. Ces deux valeurs correspondent à une énergie de bande interdite de l'ordre de $1.65 eV$. On note aussi que le paramètre de courbure coïncide avec le bowing expérimental qui est de l'ordre de $0.43 eV$ pour un facteur de désordre égal à $p = 0.075$. Ceci nous confirme que l'effet de désordre sur ce type d'alliage est très faible.

En outre, d'après les tracés des structures de bandes électroniques des composés binaires parents $InSb$ et $AlSb$ et de l'alliage $Al_{0.5} In_{0.5} Sb$, on remarque clairement que l'effet du désordre est très faible et que les quatre bandes de valence sont moins dispersives que les quatre bandes de conduction et cela est dû à délocalisation des électrons de conduction dans leurs orbitales.

D'autres propriétés électroniques ont été calculées à partir de la structure de bandes électroniques telle que la masse effective des électrons des composés binaires *InSb* et *AlSb* qui est égale à $0.03 m_0$ et $0.13 m_0$ respectivement. Ces valeurs sont en bon accord avec les valeurs rapporté par S. Adachi. En augmentant la concentration de l'Aluminium on déduit que la mobilité des électrons diminue.

La densité de charge et l'ionicté sont deux grandeurs fondamentales dans la compréhension des liaisons chimiques dans les semiconducteurs, la densité a été tracée aux deux points de Chadi et à la première bande de conduction selon la direction $[1\ 1\ 1]$ au point Γ de la zone de Brillouin, on a remarqué que la distribution des charges n'est pas équitablement répartie dans la région inter-atomique, on peut conclure que les liaisons sont partiellement covalentes et ioniques.

La variation de l'indice de réfraction (n) en fonction de la concentration de l'Aluminium pour différents modèles a été clairement présentée. En comparant nos résultats à ceux de la littérature, on remarque que le modèle de Gupta et Ravindra donne un très bon accord, et ceci nous a permis de conclure que la diminution ou l'augmentation de l'indice de réfraction est étroitement lié à la valeur du gap énergétique.

La connaissance de l'indice de réfraction nous a permis de déterminer la constante diélectrique de haute fréquence (ϵ_∞), qui est une valeur cruciale dans la conception des dispositifs optoélectroniques. La variation de (ϵ_∞) en fonction de la concentration de l'Aluminium nous a donné un comportement décroissant et monotone. Néanmoins en absence de la référence expérimentale ou théorique, nos résultats restent prédictifs.

Dans le but de déterminer et de comprendre les propriétés électriques de l'alliage $Al_x In_{1-x} Sb$ on envoie un faisceau de positron, qui représente une sonde particulièrement importante pour l'étude des massifs et les surfaces des semiconducteurs. Les fonctions d'ondes des positrons sont calculées à partir de la méthode des pseudopotentiels couplée à la méthode de la particule indépendante. On établit une ressemblance qualitative de la structure de bandes électronique avec celle des positrons, cette dernière ne présente pas de bande interdite, c'est-à-dire, que toutes les bandes sont conductrices. On note que l'effet du désordre est très faible.

La bande d'énergie la plus basse représente le potentiel chimique du positron μ^+ , appelée aussi énergie de thermalisation, sa variation en fonction du désordre compositionnel (x), nous montre que le positron a atteint l'équilibre thermique dans l'échantillon AlSb avant celui de InSb, ceci est dû au fait que *InSb* est plus métallique que *AlSb*. Cette thermalisation est en accord avec la durée de vie du positron dans le massif.

L'affinité positronique A^+ , qui est un caractère relatif à la compréhension du piégeage des positrons aux interfaces et aux précipités. On remarque qu'elle a un comportement décroissant et monotone en fonction de la concentration de l'Aluminium. Pour enrichir cette étude, on a calculé l'affinité positronique pour les hétérostructures suivantes : *InSb/Al_{0.5}In_{0.5}Sb*, *InSb/AlSb* et *AlSb/Al_{0.5}In_{0.5}Sb*. D'après les résultats obtenus, on a conclu que le positron a une préférence pour les précipités, c'est-à-dire que le piégeage du positron se fait surtout dans les précipités.

La masse effective est un autre paramètre essentiel pour les phénomènes de transport dans les semiconducteurs. Nos résultats donnent une masse de $1.03 m_0$ pour InSb et de $1.29 m_0$ pour AlSb. Comparés aux résultats rapportés par la littérature, nos valeurs semblent inférieures. Ce désaccord a été expliqué par Panda et Collaborateurs. On note que plus la concentration de l'aluminium augmente, plus la masse effective du positron croît linéairement, d'où la mobilité des positrons diminue.

La densité de charges positronique est calculée le long de la direction [1 1 1] au point Γ de la zone de Brillouin, on remarque que le positron a tendance à être repoussé par l'atome dont la taille est importante et attiré par l'atome avec la plus grande densité d'électronique.

Après calcul, la durée de vie du positron est de $284 ps$ et $261 ps$ pour *InSb* et *AlSb* respectivement. Elle présente un comportement non linéaire avec la variation de l'effet du désordre. Cette grandeur est proportionnelle à l'ionocité du matériau. Nos résultats restent prédictifs et peuvent servir comme référence.

D'autres propriétés physiques sont déterminées telles que les constantes élastiques qui traduisent la réaction des matériaux à une pression donnée. Ces propriétés dépendent étroitement des forces de liaisons qui existent entre les atomes constituant le matériau. Les résultats des constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} , ainsi

que leurs moyenne $\langle C_{ii} \rangle$ pour les composés binaires $InSb$ et $AlSb$ sont en bon accord avec les valeurs citées en littérature.

La variation du potentiel de déformation Ed^+ en fonction de la concentration de l'Aluminium pour l'alliage ternaire semiconducteur $Al_xIn_{1-x}Sb$ croit d'une façon monotone et presque linéairement avec un paramètre de courbure très faible de l'ordre de 0.04 eV.

la constante de diffusion du positron D_+ , qui est dûe à la collision élastique des phonons, augmente d'une façon monotone et présente un comportement non linéaire en fonction du désordre compositionnel, avec un large paramètre de courbure égal à 1.62.

La mise en œuvre de dispositifs à semiconducteurs dans différents domaines d'applications impose une connaissance précise et exacte des propriétés électroniques, structurales, optiques, et diélectriques. Les différents résultats établis dans le cadre de nos calculs est un point de départ intéressant pour optimiser la conception de ces composants. En retour la quantification des performances de ces composants servira de base pour corriger les imperfections des modèles de calculs utilisés et de palier les lacunes pour une meilleure optimisation.

Notre perspective à court terme est de calculer l'annihilation dans le semiconducteur ternaire $Al_xIn_{1-x}Sb$.

Annexes





Energy gaps, charge distribution and optical properties of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys



Nour El-Houda Fares^a, Nadir Bouarissa^{b,*}

^aMaterials and Electronic Systems Laboratory, University of Bordj-Bou-Arréridj, 34000 Bordj-Bou-Arréridj, Algeria

^bLaboratory of Materials Physics and its Applications, University of M'sila, 28000 M'sila, Algeria

HIGHLIGHTS

- Band structure of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys has been investigated.
- Optical properties of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys have been reported.
- Effects of disorder on electronic and optical properties in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ have been examined.
- Mid-infrared inter band cascade lasers applications and other antimonide device structures.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 23 January 2015

Keywords:

Energy gaps
Charge densities
Optical properties
 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$
Disorder effect

ABSTRACT

The electronic and optical properties of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys have been investigated using a pseudopotential approach within the virtual crystal approximation. The effect of alloy disorder on the studied properties has been examined and found to be weak. The extent of the direct-to-indirect band gap transition is found to occur at $x = 0.73$. Our results agree well with those reported in the literature. Trends in bonding and ionicity are discussed by means of the electron charge distribution. The present study may be a useful information for mid-infrared inter band cascade lasers applications and other antimonide device structures.

© 2015 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ III–V ternary semiconductor alloys are important materials for optoelectronic applications. These alloys can be derived from binary compounds InSb and AlSb. The subscript x refers to the alloy composition which describes the proportion of the Al added. InSb quantum well based devices are usually grown on GaAs (001) and Si (001) substrates [1–4]. For both substrates, ternary semiconductor alloys $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ with $x = 0.1$ – 0.2 is usually the material of choice for buffer and barrier layers of InSb quantum wells, presumably due to its reasonably large band-gap (0.35–0.54 eV) [4,5] and small lattice mismatch (0.5–1.1%) with respect to InSb. Very recently, Zhang et al. [6] have proposed a material design for InAsSb quantum well with AlInSb barrier.

InSb/AlInSb quantum well heterostructures are therefore of significant interest in several fields. These include high speed electronics [2,7], quantum and spintronic applications [7,8] and ballistic transport devices [7,9]. Besides, AlInSb provides a convenient

strain-compensating barrier material for mid-infrared inter band cascade lasers [10] and other antimonide device structures. Mid-infrared light-emitting diodes are the subject of much research and have great potential in such applications as gas sensing and free-space quantum communications [11,12]. Some of the high brightness light-emitting diodes at the wavelengths range $\lambda = 3$ – $10 \mu\text{m}$ that have been recently reported [13], were fabricated from $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$, where the peak emission wavelength can be tailored by varying the Al concentration.

The optical properties of semiconductors provide an important tool for studying energy band structure, impurity levels, excitons, localized defects, lattice vibrations, and certain magnetic excitations. Indeed, optical experiments provide a good way of examining the properties of semiconductors. Particularly measuring the absorption coefficient for various energies gives information about the band gaps of the material of interest. Knowledge of these band-gaps is extremely important for understanding the electrical properties of a semiconductor, and is therefore of great practical interest.

The present contribution deals with a theoretical investigation of the electronic structure and optical properties of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$

* Corresponding author.

E-mail address: n_bouarissa@yahoo.fr (N. Bouarissa).

ternary semiconductor alloys. The calculations are performed using the empirical pseudopotential method (EPM) under the virtual crystal approximation (VCA) that takes into account the effect of compositional disorder. Features such as energy band-gaps, valence and conduction charge distributions, refractive index and high-frequency dielectric constant have been determined within a whole alloy composition range. The effect of the alloy disorder on direct and indirect energy band-gaps has been examined and discussed. Moreover, trends in chemical bonding and ionicity of the crystal are discussed by means of electronic charge distributions. Besides the refractive index has been calculated using several models, all of which are directly related to the fundamental energy band gap.

The paper is organized as follows. In Section 1, a brief introduction is given. The computational approach used in the calculation is described in Section 2. Section 3 is devoted to the presentation and discussion of the obtained results. Finally, Section 4 summarizes the conclusions of the present study.

2. Computational details

The present calculations are primarily based on the EPM [14], where the electronic structure can be described using a nearly-free electron model and weak potentials. For this purpose, the pseudopotential Hamiltonian can be written as,

$$H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + V_p(r) \quad (1)$$

where $V_p(r)$ is the smoothly-varying potential that can be expanded into a Fourier series over the reciprocal lattice. Thus, knowing the Fourier transform of atomic pseudopotentials for a given G (where G is a reciprocal lattice vector) shell, it is quite straight forward to generate the pseudopotential matrix elements in the basis of plane waves.

The eigenfunctions $\phi_{n,k}$ within the time-independent Schrödinger equation

$$H\phi_{n,k} = E_{n,k}\phi_{n,k} \quad (2)$$

are expanded in terms of a linear combination of plane waves. The solution to the energy eigenvalues and corresponding eigenvectors can then be found by diagonalizing the Hamiltonian matrix. This eigenvalue problem is a standard mathematical problem, and is easily handled, save for highly complex systems. The pseudo-wave functions are obtained at each iteration using all the plane waves with the reciprocal lattice vector k_q satisfying $\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)[|k + k_q|^2 - |k|^2] \leq E_{\max}$. A choice of $E_{\max} = 14\text{--}22$ in units of $\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$ turns out to be practical. In the present work, we have adopted an $E_{\max} = 14$. Typically, for common semiconductors a few hundred plane waves are required to obtain a converged result [15,16]. In the present work, the dimension of the eigenvalue problem that corresponds to the alloy end points (binary parent compounds) is a (136×136) matrix. A good convergence between theory and experiment regarding the energy band gaps is achieved with only 59 plane waves.

The EPM involves adjusting the pseudopotential form factors. These form factors can be adjusted with the help of experimental data such as optical spectra, to reproduce the band structure accurately. In the present paper, the empirical pseudopotential parameters are optimized using the non-linear least-squares method [17,18]. The experimental band-gap energies for InSb and AlSb at Γ , X and L high-symmetry points in the Brillouin zone used in the fitting procedure are depicted in Table 1. The final adjusted symmetric V_S and antisymmetric V_A pseudopotential form factors

Table 1

Experimental band-gap energies for InSb and AlSb fixed in the fits.

Compound	$E_{\Gamma-\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma-X}$ (eV)	$E_{\Gamma-L}$ (eV)
InSb	0.18 ^a	1.63 ^a	0.93 ^a
AlSb	2.30 ^b	1.615 ^b	2.211 ^b

^a Ref. [19].

^b Ref. [20].

and the used lattice constants for binary parent compounds of the alloy of interest are shown in Table 2.

The formalism can be generalized in the case of an alloy in that the alloy potential of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is expressed as [21–23]:

$$V_{\text{alloy}}(r) = V_{\text{VCA}}(r) + V_{\text{dis}}(r) \quad (3)$$

V_{VCA} in Eq. (3) is the periodic virtual crystal potential and $V_{\text{dis}}(r)$ is the non-periodic potential due to the compositional disorder. The $V(G)$ are then given by:

$$V_{\text{alloy}}(G) = (1-x)V_{\text{InSb}}(G) + xV_{\text{AlSb}}(G) - p[x(1-x)]^{\frac{1}{2}}(V_{\text{AlSb}}(G) - V_{\text{InSb}}(G)) \quad (4)$$

where p is treated as an adjustable parameter that simulates the disorder effect. Note that $p = 0$ when the compositional disorder effect is not taken into account (the VCA alone is used).

The lattice constant of the alloys of interest is determined using Vegard's law.

3. Results and discussion

3.1. Energy gaps

The composition dependence of the direct (E_{Γ}^{Γ}) and indirect (E_{Γ}^X) energy band-gaps for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ with and without taking into account the compositional disorder effect is shown in Figs. 1a and 1b.

Fig. 1a displays the variation of E_{Γ}^{Γ} versus the alloy content x using the VCA alone and the improved VCA (with disorder). We observe that in both cases the direct band gap (E_{Γ}^{Γ}) increases monotonically with increasing the Al concentration x . However, as regards the optical band-gap bowing parameter, the two types of calculations give different results. The use of the VCA alone (without disorder) gives a direct (E_{Γ}^{Γ}) band gap bowing parameter of 0.11 eV, whereas the use of the improved VCA (with disorder) gives a bowing parameter of 0.43 eV which is reached for $p = 0.075$. The small value of p suggests that the compositional disorder effect on E_{Γ}^{Γ} in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is not as important as that in other III–V ternary semiconductor alloys [15,22] and quasi-binary crystals [24]. While absorption measurements of Agaev and Bekmedova [25] yielded a linear variation of the direct energy gap with composition and Dai et al. [26] found a linear variation of the direct energy gap with alloy lattice constant (i.e., composition) for InSb-rich AlInSb, our result is in good agreement with that reported by Isomura et al. [27] using electroreflectance determination, with the empirical curve charting the increase of the bowing parameter with lattice mismatch between the binary constituents [28] and with the recommended value of Vurgaftman et al. [29] that was based on the fact that the electroreflectance measurements should have been more precise than the absorption experiments of Agaev and Bekmedova.

Fig. 1b shows the variation of the indirect band-gap E_{Γ}^X as a function of the alloy composition x with (improved VCA) and without (VCA alone) taking into account the compositional disorder

Table 2
Pseudopotential parameters for InSb and AlSb.

Compound	Form factors (Ry)						Lattice constant (Å)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
InSb	-0.201294	0.01	0.028338	0.064495	0.03	0.015	6.49
AlSb	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544	6.1355

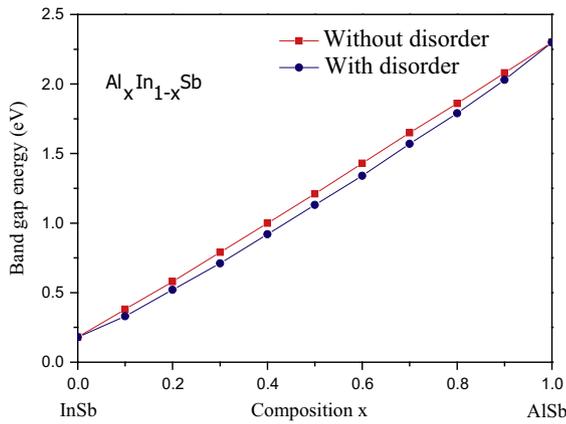


Fig. 1a. Direct (Γ - Γ) band gap energy in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content calculated without disorder (line + square symbols) and with disorder (line + circle symbols).

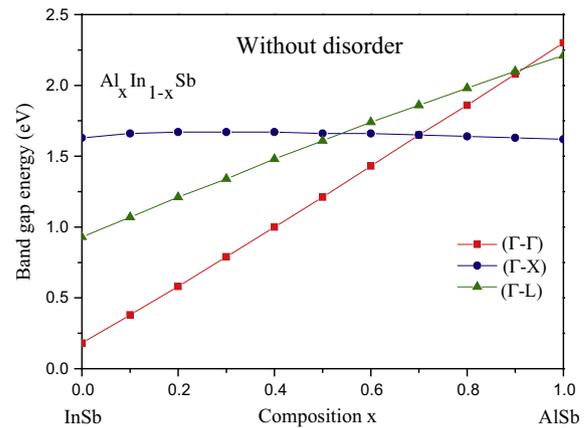


Fig. 2a. Direct (Γ - Γ) and indirect (Γ -X) and (Γ -L) band gap energies in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content computed without considering the compositional disorder effect.

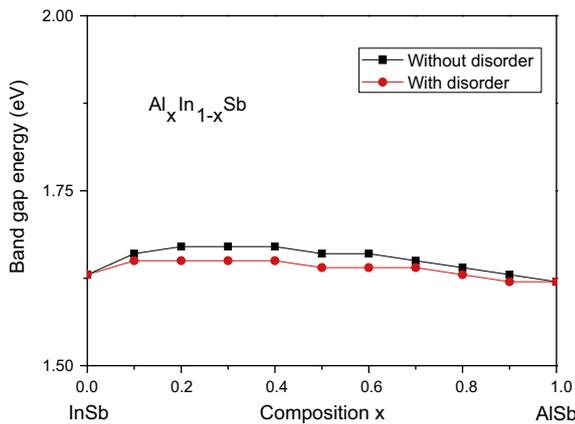


Fig. 1b. Indirect (Γ -X) band gap energy in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content calculated without disorder (line + square symbols) and with disorder (line + circle symbols).

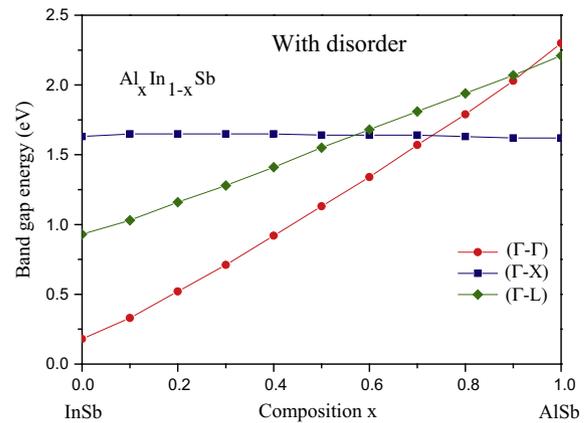


Fig. 2b. Direct (Γ - Γ) and indirect (Γ -X) and (Γ -L) band gap energies in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content computed with considering the compositional disorder effect.

effect. Note that when proceeding from InSb ($x = 0$) to AlSb ($x = 1$), E_{Γ}^{Γ} varies non-monotonically in both cases considered here. The variation seems to be very slight and not as important as that of E_{Γ}^{Γ} (Fig. 1a). The reason could be due to the fact that E_{Γ}^{Γ} of parent compounds of the material under load, i.e. InSb and AlSb are very close to each other. The effect of compositional disorder on E_{Γ}^{Γ} appears also to be weak. This could be traced back to the slow variation of E_{Γ}^{Γ} with x . Using the improved VCA, the indirect E_{Γ}^{Γ} band-gap bowing parameter is found to be -0.08 eV.

The composition dependence of the direct (Γ - Γ) and indirect (Γ -X) and (Γ -L) band-gap energies using the VCA and the improved VCA is plotted in Figs. 2a and 2b, respectively. Note that in both cases E_{Γ}^{Γ} , E_{Γ}^{Γ} and E_{Γ}^{Γ} do not exhibit the same behavior with respect to x when going from InSb to AlSb. The present results show that there is a crossover from direct (Γ - Γ) to indirect (Γ -X). This crossover occurs at $x = 0.7$ when using the VCA alone

(Fig. 2a) and $x = 0.73$ when the improved VCA is used (Fig. 2b) which corresponds to an energy band-gap of 1.65 eV in both cases. This suggests that the compositional disorder effect does not affect significantly the value of x that corresponds to the crossover for direct-to-indirect band-gap transition in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$. According to our findings one may expect that the absorption at the optical gaps in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is direct within the composition range $0 \leq x < 0.73$ and indirect for $0.73 < x \leq 1$.

3.2. Electronic charge distributions

The investigation of charge densities in semiconducting materials yields useful information about the chemical bonding properties and interstitial impurities in these materials [30–34]. In this respect, the total valence electron charge density is computed along the [111] direction using the special point scheme of

Chadi and Cohen [35], with $k_1 = (2\pi/a)(3/4, 1/4, 1/4)$ and $k_2 = (2\pi/a)(1/4, 1/4, 1/4)$, where a is the lattice constant, and the wave functions obtained from band structure calculations taking into account the compositional disorder effect.

Our results for $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ alloy are shown in Fig. 3. We observe that the electron charge distribution is essentially localized in the inter-atomic region and at the atomic sites that are occupied by the cation (Al,In) and anion (Sb). It is more shifted towards the anion than the cation. This is because of the covalent bond with partial ionic character. Indeed, the maximum value of the charge distribution of valence electrons gives usually information about the main contribution to the chemical bond formation. In the present case it is situated near the atomic site occupied by the anion. Practically, only small amount of charges can be seen at the interstitial regions.

The computed electron charge density along the [111] direction for the first conduction band at the Γ -point for $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ alloy using the wave-functions derived from the band structure obtained using the improved VCA is plotted in Fig. 4. Note that the majority of the electronic charge is localized at the anion and cation sites where it reaches its maximum at the cation (Al,In). The site occupied by the anion (Sb) seems to be less surrounded by the electronic charge density than that occupied by the cation. The minimum of the conduction electron charge density appears to be approximately half way along the bond in the bonding region suggesting thus that the first conduction band charge distribution is antibonding and s-like. Similar trends have been reported for III–V semiconductor ternary alloys [15]. Some amount of charge can be seen in the interstitial regions which is not equally distributed between the regions nearest to the cation and anion sites.

3.3. Optical properties

The knowledge of the refractive index (n) of semiconductors is essential for devices such as photonic crystals, wave guides, solar cells, and detectors [36,37]. In the present contribution, n is calculated using different models and taking into account the disorder effect,

- (i) The revised expression reported by Ravindra and Srivastava [38] that was based essentially on the Moss formula [39],

$$n^4 E_g = 108 \quad (5)$$

- (ii) The Gupta and Ravindra [40] relation,

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad (6)$$

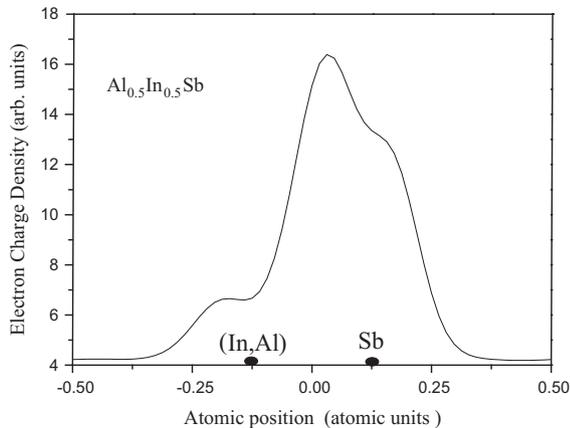


Fig. 3. Total valence charge density along the [111] direction for $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ using the two-point scheme of Chadi and Cohen.

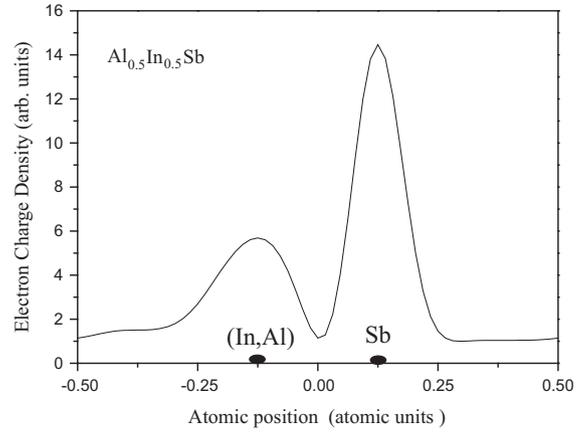


Fig. 4. First conduction band charge density at the Γ -point along the [111] direction for $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$.

- (iii) The Hervé and Vandamme empirical expression [41],

$$n = \left[1 + \left(\frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

- (iv) The Reddy and Anjaneyulu [42] relation,

$$E_g e^n = 36.3 \quad (8)$$

- (v) The Ravindra relation [37],

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (9)$$

- (vi) The Reddy and Ahammed empirical relation [43],

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154 \quad (10)$$

The calculated n for InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ and AlSb materials using various models are listed in Table 3. Also shown for comparison are the available experimental data reported in Refs. [44,45]. It can be noticed that for InSb the value of n determined using Ravindra model [37] is in better agreement with experiment [44] than those determined from the other models considered in this work. However, for the end-point compound AlSb, it seems that the value of n obtained from Reddy and Anjaneyulu [42] model is closer to experiment [45] than those obtained from the other models. The Reddy and Anjaneyulu model has already proved to give good results relative to experiment for III–V semiconductors [46] as compared to the other models. Nevertheless, when combining between the values of n determined for both InSb and AlSb, we note that the Gupta and Ravindra model is the most suitable to choose among the other models. On the other hand, it should be noted that the Reddy and Ahammed [43] empirical relation is neither valid for InSb and $Al_xIn_{1-x}Sb$ with $x = 0.1$ nor hold for infrared materials with an energy gap less than 0.365 eV.

The variation of n as a function of x calculated from different models is displayed in Fig. 5. We observe that for all models used here, n decreases with increasing Al concentration x . The behavior is monotonic. The trend is generally common for most of the III–V semiconductors [46–48] where the smaller band gap energy material has a larger value of n .

The knowledge of n has allowed us to calculate the high-frequency dielectric constant ϵ_∞ which is a crucial quantity in the design of a device. For this purpose, ϵ_∞ has been calculated using the expression,

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (11)$$

Table 3
Refractive index (n) for InSb, $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$ and AlSb semiconductor materials determined using different models.

Material	n calculated from						Expt.
	Moss model	Gupta and Ravindra model	Hervé and Vandamme model	Reddy and Anjaneyulu model	Ravindra model	Reddy and Ahammed model	
InSb	4.95	3.97	3.93	5.31	4.01		4.0 [44]
$\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$	3.13	3.38	3.16	3.47	3.20	3.77	
AlSb	2.86	3.08	2.89	3.11	2.78	3.33	3.2327 [45]

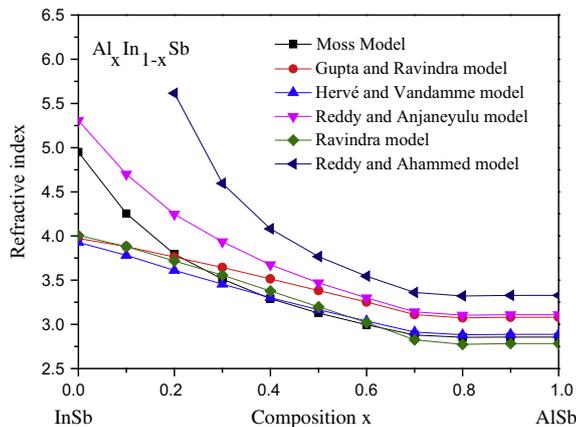


Fig. 5. Refractive index in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content calculated using different models.

where n is the refractive index determined from the Gupta and Ravindra model [40]. The values of ε_∞ for InSb and AlSb as illustrated by our results are 15.76 and 9.49, respectively. As compared to the experimental ones of 15.3 (for InSb) and 9.88 (for AlSb) quoted in Ref. [49], our results seem to agree to within 4% with those of [49]. Due to the lack of data concerning ε_∞ for $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$ in the literature, our result is only for reference that may serve for future studies.

The variation of ε_∞ as a function of the Al content x in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys is displayed in Fig. 6. Note that by increasing the Al concentration, ε_∞ decreases monotonically. The trend in ε_∞ versus x is qualitatively similar to that of n . This is an expected result since ε_∞ is obtained from the expression (11). The behavior of ε_∞ with respect to x suggests that as one proceeds from InSb ($x = 0$) to AlSb ($x = 1$), the ternary alloy of interest ($0 < x < 1$) becomes progressively a good insulator.

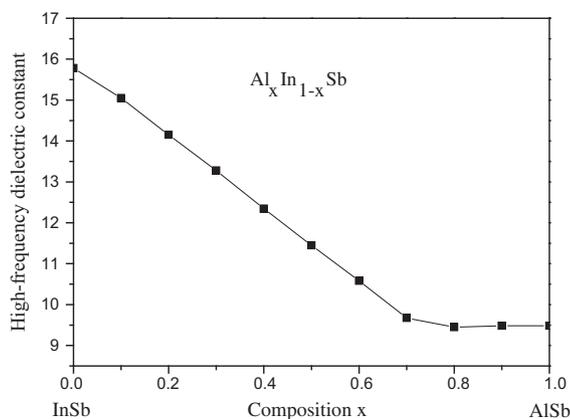


Fig. 6. High-frequency dielectric constant in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content calculated using Gupta and Ravindra model [40].

Interestingly, one should note that there is a flatness of both quantities n (Fig. 5) and ε_∞ (Fig. 6) when proceeding beyond the alloy composition $x = 0.73$. This behavior is due to the fact that after $x = 0.73$, the material of interest becomes an indirect (Γ -X) band-gap semiconductor. Hence, the fundamental band gap E_g used in the calculations of n and ε_∞ for x greater than 0.73 through all the used models in the present work is the indirect (Γ -X) band-gap which varies very slowly with the variation of x .

4. Conclusion

In conclusion, a pseudopotential approach under the VCA was employed so as to compute the direct and indirect band gap energies, valence and conduction charge densities, refractive index and high-frequency dielectric constant of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys. To make allowance for the compositional disorder, a correction to the alloy potential was introduced. In this respect, the effect of alloy disorder on direct and indirect band gaps was investigated and found to be weak. Good agreement was obtained between our findings and the available experimental data in the literature. The extent of the direct-to-indirect band gap transition was examined and found to be at the Al content of $x = 0.73$ which corresponds to an energy band-gap of 1.65 eV. The nature of the chemical bond for the equimolar $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$ alloy was examined and discussed by means of profiles of the charge distributions. The combination between the values of the refractive index obtained for the end-point compounds InSb and AlSb suggested that the Gupta and Ravindra model is the most suitable to choose among the other models considered by the present work. The behavior of most features of interest versus Al composition x was found to be monotonic.

Conflict of interest

There is no conflict of interest.

References

- [1] S.J. Smith, G.R. Nash, C.J. Bartlett, L. Buckle, M.T. Emeny, T. Ashley, Lateral light emitting n-i-p diodes in InSb/ $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) 111118–111118-3.
- [2] T. Ashley, L. Buckle, S. Datta, M.T. Emeny, D.G. Hayes, K.P. Hilton, R. Jefferies, T. Martin, T.J. Phillips, D.J. Wallis, P.J. Wilding, R. Chau, Heterogeneous InSb quantum well transistors on silicon for ultra-high speed: low power logic applications, *Electron. Lett.* 43 (2007) 777–779.
- [3] T.D. Mishima, M. Edirisooriya, M.B. Santos, Reduction of microtwin defects for high-electron-mobility InSb quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* 91 (2007) 062106–062106-3.
- [4] T.D. Mishima, M. Edirisooriya, M.B. Santos, Dislocation-filtering AlInSb buffer layers for InSb quantum wells-Analysis by high-tilt bright-field and dark-field TEM, *Physica E* 42 (2010) 2777–2780.
- [5] S. Tiwari, D.J. Frank, Empirical fit to band discontinuities and barrier heights in III-V alloy systems, *Appl. Phys. Lett.* 60 (1992) 630–632.
- [6] Yu. Zhang, Ya. Zhang, C. Wang, Y. Zeng, Transport properties in AlInSb/InAsSb heterostructures, *J. Appl. Phys.* 114 (2013) 243710–243710-7.
- [7] O.J. Pooley, A.M. Gilbertson, P.D. Buckle, R.S. Hall, M.T. Emeny, M. Fearn, M.P. Halsall, L.F. Cohen, T. Ashley, Quantum well mobility and the effect of gate dielectrics in remote doped InSb/ $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ heterostructures, *Semicond. Sci. Technol.* 25 (2010) 125005–125005-7.

- [8] K.C. Nowack, F.H.L. Koppens, Y.V. Nazarov, L.M.K. Vandersypen, Coherent control of a single electron spin with electric fields, *Science* 318 (2007) 1430–1433.
- [9] N. Goel, S.J. Chung, M.B. Santos, K. Suzuki, S. Miyashita, Y. Hirayama, Ballistic transport in InSb quantum wells at high temperature, *Physica E* 20 (2004) 251–254.
- [10] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, High-power/low-threshold type-II interband cascade mid-IR laser-design and modeling, *IEEE Photonics Technol. Lett.* 9 (1997) 170–172.
- [11] S.D. Smith, A. Vass, P. Bramley, J.G. Crowder, C.H. Wang, Comparison of IR LED gas sensors with thermal source products, *IEE Proc.: Optoelectron.* 144 (1997) 266–270.
- [12] G.R. Nash, K.J. Nash, S.J. Smith, C.J. Bartlett, J.H. Jefferson, L. Buckle, M.T. Emeny, P.D. Buckle, T. Ashley, Lateral n-i-p junctions formed in an InSb quantum well by bevel etching, *Semicond. Sci. Technol.* 20 (2005) 144–148.
- [13] M.K. Haigh, G.R. Nash, S.J. Smith, L. Buckle, M.T. Emeny, T. Ashley, Mid-infrared $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ light-emitting diodes, *Appl. Phys. Lett.* 90 (2007) 231116–231116-3.
- [14] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1988 (see for example).
- [15] N. Bouarissa, Electronic properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ from pseudopotential calculations, *Mater. Chem. Phys.* 124 (2010) 336–341.
- [16] M. Boucenna, N. Bouarissa, F. Mezrag, Composition and lattice mismatch dependent dielectric constants and optical phonon modes of $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x\text{Py}$ quaternary alloys, *Infrared Phys. Technol.* 67 (2014) 318–322.
- [17] T. Kobayashi, H. Nara, Properties of nonlocal pseudopotentials of Si and Ge optimized under full interdependence among potential parameters, *Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ.* 2 (1993) 7–16.
- [18] A. Bechiri, N. Bouarissa, Energy band gaps for the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ alloys lattice matched to different substrates, *Superlatt. Microstruct.* 39 (2006) 478–488.
- [19] S. Adachi, Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: key properties for a variety of the 2–4 μm optoelectronic device applications, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 4869–4876 (and references therein).
- [20] C. Alibert, A. Joullié, A.M. Joullié, C. Ance, Modulation-spectroscopy study of the $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ band structure, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 4946–4954.
- [21] S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, Band structure of ternary compound semiconductors beyond the virtual crystal approximation, *J. Phys.: Condens. Matter* 2 (1990) 3253–3257.
- [22] N. Bouarissa, Effects of compositional disorder upon electronic and lattice properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285–291.
- [23] N. Bouarissa, Pseudopotential calculations of $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$: energy gaps and dielectric constants, *Physica B* 399 (2007) 126–131.
- [24] N. Bouarissa, Band gaps and charge distribution in quasi-binary $(\text{GaSb})_{1-x}(\text{InAs})_x$ crystals, *Eur. Phys. J. B* 32 (2003) 139–143.
- [25] Ya. Agaev, N.G. Bekmedova, Some optical properties of -nonstoichiometric-InAlSb solid solutions, *Sov. Phys. Semicond.* 5 (1972) 1330.
- [26] N. Dai, F. Brown, R.E. Doezema, S.J. Chung, K.J. Goldammer, M.B. Santos, Determination of the concentration and temperature dependence of the fundamental energy gap in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$, *Appl. Phys. Lett.* 73 (1998) 3132–3134.
- [27] S. Isomura, F.G.D. Prat, J.C. Woolley, Electroreflectance spectra of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ alloys, *Phys. Status Solidi A* 65 (1974) 213–219.
- [28] T.H. Glisson, J.R. Hauser, M.A. Littlejohn, C.K. Williams, Energy bandgap and lattice constant contours of iii–v quaternary alloys, *J. Electron. Mater.* 7 (1978) 1–16.
- [29] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, *J. Appl. Phys.* 89 (2001) 5815–5875.
- [30] S.L. Richardson, M.L. Cohen, S.G. Louie, J.R. Chelikowsky, Electron charge densities at conduction-band edges of semiconductors, *Phys. Rev. B* 33 (1986) 1177–1182.
- [31] N. Bouarissa, Electron valence charge densities in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ mixed crystals, *Infrared Phys. Technol.* 39 (1998) 265–270.
- [32] N. Bouarissa, Pseudopotential study of bonding and ionicity in InP at various pressures, *Infrared Phys. Technol.* 40 (1999) 117–121.
- [33] N. Bouarissa, The behavior of electron valence and conduction charge densities in InP under pressure, *Mater. Chem. Phys.* 65 (2000) 107–112.
- [34] N. Bouarissa, Electronic structure and lattice properties of zinc-blende InN under high pressure, *Eur. Phys. J. B* 26 (2002) 153–158.
- [35] D.J. Chadi, M.L. Cohen, Special points in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* 8 (1973) 5747–5753.
- [36] S. Adachi, Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: key properties for a variety of the 2–4- μm optoelectronic device applications, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 4869–4876 (and reference therein).
- [37] N.M. Ravindra, P. Ganapathy, J. Choi, Energy gap-refractive index relations in semiconductors – an overview, *Infrared Phys. Technol.* 50 (2007) 21–29.
- [38] N.M. Ravindra, V.K. Srivastava, Variation of refractive index with energy gap in semiconductors, *Infrared Phys.* 19 (1979) 603–604.
- [39] T.S. Moss, A relationship between the refractive index and the infra-red threshold of sensitivity for photoconductors, *Proc. Phys. Soc. B* 63 (1950) 167–174.
- [40] V.P. Gupta, N.M. Ravindra, Comments on the Moss formula, *Phys. Status Solidi B* 100 (1980) 715–719.
- [41] P. Hervé, L.K.J. Vandamme, General relation between refractive index and energy gap in semiconductors, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609–615.
- [42] R.R. Reddy, S. Anjaneyulu, Analysis of the Moss and Ravindra relations, *Phys. Status Solidi B* 174 (1992) k91–k93.
- [43] R.R. Reddy, Y.N. Ahammed, A study on the Moss relation, *Infrared Phys. Technol.* 36 (1995) 825–830.
- [44] M. Levinshstein, S. Rumyantsev, M. Shur (Eds.), *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, vol. 2, World Scientific, Singapore, 1999.
- [45] M.J. Weber, *Handbook of Optical Materials*, Springer, Berlin, 2003.
- [46] M.S. Al-Assiri, N. Bouarissa, Electronic band structure and derived properties of $\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ alloys, *Superlatt. Microstruct.* 59 (2013) 144–154.
- [47] N. Bouarissa, M. Boucenna, Band parameters for AlAs, InAs and their ternary mixed crystals, *Phys. Scr.* 79 (2009) 015701–015701-7.
- [48] N. Bouarissa, Optical and vibrational properties of quasi-binary $(\text{GaSb})_{1-x}(\text{InAs})_x$ crystals, *Mater. Lett.* 60 (2006) 2974–2978.
- [49] S. Adachi, *Properties of Group IV, III–V, and II–VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, 2005.



Electron and positron characteristics in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$: A comparative study performed by using a pseudopotential approach



Nour El-Houda Fares^a, Nadir Bouarissa^{b,*}

^a Materials and Electronic Systems Laboratory, University of Bordj-Bou-Arréridj, 34000, Bordj-Bou-Arréridj, Algeria

^b Laboratory of Materials Physics and its Applications, University of M'sila, 28000, M'sila, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 2 September 2015

Received in revised form 28 October 2015

Accepted 3 November 2015

Available online 12 November 2015

Keywords:

Electron structure

Positron states

$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ alloys

Pseudopotentials

ABSTRACT

Based on a pseudopotential approach under the virtual-crystal approximation, the electron and positron band structures and their derived properties have been investigated for zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys. The effect of compositional disorder on electron and positron band structures has been examined and discussed. Moreover, the differences and the similarities between electron and positron characteristics in the material system of interest have been analyzed. The present study reveals possibilities for the investigation of the positron annihilation in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.

© 2015 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Positron annihilation spectroscopy is a characterization method for probing the local electron density and atomic structure at the site chosen by the electrostatic interaction of the positron with its environment [1–4]. In positron beam studies [3,5–8], positrons are implanted at a high initial kinetic energy but they rapidly lose their energy through interactions with electrons and phonons and become thermalized in a time short compared to their average lifetime in the material of interest. The thermal stage ends when the positron annihilates with an electron. The concomitant radiation conveys information which can be used to reconstruct host electronic properties near the site of annihilation [3,9]. Thus, the state of electrons in semiconducting materials might be studied by investigating the characteristics of the positron annihilation process [9–11]. The differences and similarities between electron and positron band structures and their related fundamental properties are also of considerable interest, and an understanding of positron annihilation characteristics in solids underpins and strengthens the description of the structure and properties of condensed matter.

The present contribution deals with electron and positron states in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys in the zinc-blende phase. The calculations are based on the pseudopotential approach within the virtual-crystal approximation (VCA). The positron wave function is

evaluated using the point-core approximation for the ionic potential. Special attention has been given to the effect of compositional disorder on the electron and positron band structures of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys. The aim of this work is to compare the electron and positron band structures and their related fundamental properties in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ so as to investigate the differences and the similarities. The choice of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys is based on their importance for many applications in semiconductor technology. These materials have an immense potential for technological applications in the fields of fabrication of microwave, optoelectronic, and electric devices. As a matter of fact, $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ($x = 1-0.5$) with a composition closely lattice matched to the channel layers, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ and $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, was used for barrier layers [12]. Besides, the InSb-like channel in the $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}/\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ heterostructures offers very high room-temperature as well as 77 K electron mobility [12]. Furthermore, transistors were fabricated on a semi-insulating GaAs substrate using a relaxed metamorphic buffer layer of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ to accommodate lattice mismatch, a compressively strained InSb quantum well confined between layers of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ and Schottky barrier metal gate [13].

2. Computational method

The electronic wave functions are determined from the band-structure using the pseudopotential approach, more specifically the empirical pseudopotential method (EPM) [14]. It is, of course, just such Fourier components with respect to reciprocal lattice vectors that enter directly into the secular equation that determines the

* Corresponding author.

E-mail address: n.bouarissa@yahoo.fr (N. Bouarissa).

Table 1
Experimental band-gap energies for InSb and AlSb fixed in the fits.

Compound	$E_{\Gamma-\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma-X}$ (eV)	$E_{\Gamma-L}$ (eV)
InSb	0.18 ^a	1.63 ^a	0.93 ^a
AlSb	2.30 ^b	1.615 ^b	2.211 ^b

^a Ref. [17].

^b Ref. [18].

energies and wave functions. The EPM involves adjusting the pseudopotential form factors which are modified in order to reproduce the experimental band-gap energies at selected points in the Brillouin zone as accurately as possible. In the present contribution, the non-linear least-squares method as described by Kobayasi and Nara [15,16] has been used so as to optimize the empirical pseudopotential parameters. Table 1 shows the experimental band-gap energies at Γ , X and L high-symmetry points in the Brillouin zone used in the fitting procedure for semiconductor compounds InSb and AlSb of interest.

The alloy potential has been obtained using the VCA. However, when the compositional disorder is taken into consideration, a correction to the VCA is made by introducing the disorder effect as an effective disorder potential as described in [19,20].

The lattice constant of the alloy system of interest has been determined assuming the Vegard's law.

The positron wave function is evaluated using the point-core approximation for the ionic potential. More details about the approach can be found in [9–11]. As a matter of fact, after implantation and thermalization the positron in a semiconductor is in a Bloch-like state in a perfect periodic crystal lattice. It can be then described to a ground approximation by a single-particle Schrödinger equation [3]. The positron potential results from two parts, the first part is due to the nuclei and the second one results from the electron. Both parts are purely Coulombic in nature. The nuclear part is expressed in terms of point charges situated at the lattice sites where its Fourier coefficients are easily found. Note that the electron-positron correlation potential has been neglected here. This has been justified by the fact that this potential is a slow function of the electron density. Thus, it is generally flat in the interstitial region and is swamped by the ionic and Coulombic potentials in the ion core region.

The positron wave function has been represented by plane waves as described in [9]. The positron can be assumed to thermalize in a time short compared to its lifetime [3]. This makes the solution of the secular equation simple.

3. Results and discussion

The pseudopotential parameters used in the present calculations for InSb and AlSb are given in Table 2, whereas the Fourier coefficients of the valence charge densities for InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb are shown in Table 3.

The computed electron and positron energy band structures of $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ in the zinc-blende phase at the high-symmetry points and along the principal symmetry directions in the Brillouin zone are displayed in Figs. 1 and 2, respectively. In both cases, the effect of compositional disorder on the band structure has been examined. The electron valence band maximum is taken to be the zero energy reference (Fig. 1). Note that the electron conduction band minimum occurs at the Γ point. This is consistent with the fact that $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ is a direct band gap semiconductor as reported in Ref. [20]. The largest degree of localization is exhibited by the wave functions for the minimum conduction band at Γ . Taking an overall look at the electron band structure featured in Fig. 1, one can see that it is similar to other electronic band structure of III–V ternary semiconductor alloys [21] with different dispersive bands

and band crossings. This difference accounts for the difference in the ionicity of the semiconducting materials. The positron band structure (Fig. 2) exhibits similarities to that of the electron counterpart (Fig. 1). Nevertheless, the positron energy spectrum does not show a band gap between the fourth and the fifth bands at the Γ point in the Brillouin zone. This is consistent with the fact that all the positron bands are conduction ones. Going back to the electron band structure (Fig. 1), one can observe a presence of a band gap between the first and second valence bands at the X point in the Brillouin zone. This gap is termed as the antisymmetric gap and found to be useful for getting information about the trend of the ionicity in semiconducting materials [22,23]. Interestingly, this gap is also present in the positron band structure and may serve as a source of information on the crystal ionicity. It is to be noted that the effect of compositional disorder is more important on the electron band structure than on the positron band structure counterpart. The alloy disorder effect affects both the valence and conduction bands in the electronic band structure (Fig. 1) and hence it should be taken into account in the electron band structure calculations. The same conclusion can be drawn for the positron band structure even seen that the compositional disorder effect is not as important as that on the electron band structure. This particularly is more important for the positron thermalization energy that is the lowest energy level in the positron band structure.

The knowledge of the electronic and positronic band structures allowed us to determine the electron and positron effective masses that are important parameters in transport properties of semiconductors. Following the approach used by Bouarissa [24] for both electrons and positrons, the electron and positron effective masses have been calculated. The electron effective mass has been determined in the electronic conduction band minimum at the Γ valley, whereas, the positron effective mass counterpart was obtained in the bottom of the positronic lowest energy band and termed as the positron band mass (m_b^*). Our findings showed that the electron effective mass for InSb is $0.03m_0$ and that for AlSb is $0.13m_0$, where m_0 is the electron free-particle mass. These values agree reasonably with the experimental ones of $0.013m_0$ [25] and $0.14m_0$ [25] reported by Adachi for InSb and AlSb, respectively. Taking into account the disorder effect, the variation of the electron effective mass as a function of the alloy composition x for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ with zinc-blende structure is displayed in Fig. 3. The solid line is a fitted curve drawn using the least-squares method. Note that by increasing the Al content on going from 0 up to 1, the electron effective mass increases almost linearly. The behavior suggests that the electron mobility may decrease with increasing the composition x . As regards the positron case, our calculations found that the positron effective band mass is $1.03m_0$ for InSb and $1.29m_0$ for AlSb, where m_0 is the positron free-particle mass. The positron effective mass of $1.5m_0$ has been reported to be a compromise over the various theoretical and experimental determinations [26]. As compared to our obtained values, it seems that our results are smaller than this value. As a matter of fact, the positron effective mass contains the contributions due to the periodic lattice (m_b^*) and due to the screening electron cloud (correlation effective mass) [26]. Recently, Panda et al. [27] have determined the positron effective mass in Si using first-principles calculations. Their results showed that the obtained positron effective mass is smaller than $1.5m_0$. The discrepancy has been attributed to the neglect of the positron-phonon and positron-plasmon interactions. By including the positron-plasmon interaction in their calculation, Panda et al. [27] found that the positron effective mass becomes in good agreement with that of $1.5m_0$, suggesting thus that the positron self-interaction with the phonon field is negligible. Accordingly, one can believe that the discrepancy in our case is due to the neglect of the positron-plasmon interaction. Nevertheless, one can note that the largest contribution to the positron effective mass comes from m_b^* . This is

Table 2
Pseudopotential parameters for InSb and AlSb.

Compound	Form factors (Ry)						Lattice constant (Å)
	$V_S(3)$	$V_S(8)$	$V_S(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
InSb	-0.201294	0.01	0.028338	0.064495	0.03	0.015	6.49
AlSb	-0.225597	0.028086	0.062230	0.007109	0.058960	0.004544	6.1355

Table 3
Fourier coefficients of the valence charge densities for InSb, $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$ and AlSb. The real parts of the coefficient are listed first.

Material	Fourier coefficient ($e \Omega^{-1}$) for the following $G(a/2\pi)$						
	000	111	220	311	222	400	331
InSb	8.000	-0.555	0.004	-0.060	-0.244	0.027	-0.003
	0.000	0.162	0.017	-0.002	0.000	0.000	0.000
$\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$	8.000	-0.537	-0.003	-0.053	-0.219	0.023	-0.001
	0.000	0.221	0.029	-0.001	0.000	0.000	0.000
AlSb	8.000	-0.511	-0.010	-0.038	-0.173	0.019	0.002
	0.000	0.321	0.051	0.002	0.000	0.000	0.000

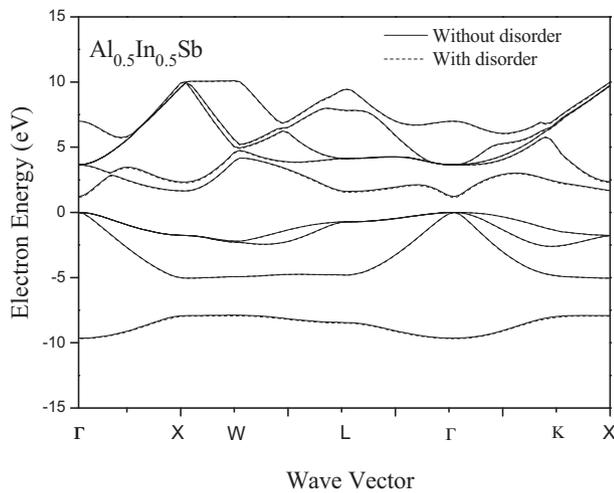


Fig. 1. Electron band structure for zinc-blende $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$.

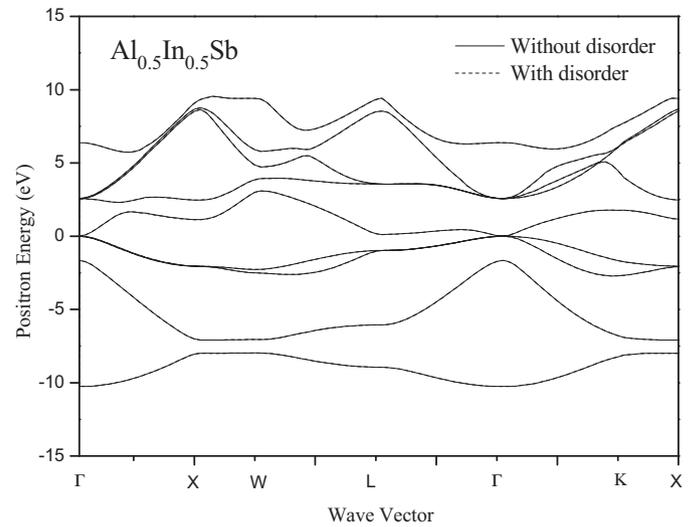


Fig. 2. Positron band structure for zinc-blende $\text{Al}_{0.50}\text{In}_{0.50}\text{Sb}$.

consistent with previous studies reported in the literature [10,24,27]. By considering the compositional disorder effect, the compositional dependence of m_b^* for zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ has been examined. Our results are plotted in Fig. 4. The solid line is a fitted curve drawn using the least-squares method. We observe that similarly to the electron effective mass when proceeding from InSb ($x=0$) to AlSb ($x=1$), the m_b^* increases almost linearly. The increase indicates also that the positron mobility may decrease with increasing x . Interestingly, one may expect that the effective mass bowing parameter for positrons should be smaller than that for electrons since the electron in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is more affected by the disorder effect than the positron as discussed previously (Figs. 1 and 2).

The study of electronic charge densities in semiconductors is of fundamental interest to researchers in the condensed matter physics and material sciences. It provides some qualitative insight into bonding trends [28–30]. In this respect, the electronic and positronic charge densities have been calculated using wave functions derived from the electronic and positronic band structures. The computed electronic charge density along [1 1 1] direction for the sum of the four valence bands at the Γ -point for $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ is shown in Fig. 5, whereas the positron charge density along the [1 1 1] direction for the lowest band at the Γ point for $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$

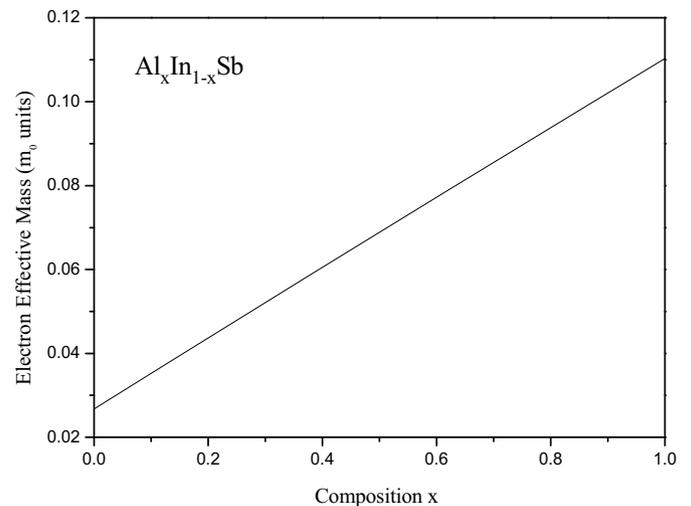


Fig. 3. Electron effective mass at the Γ high-symmetry point of the Brillouin zone in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ as a function of Al content.

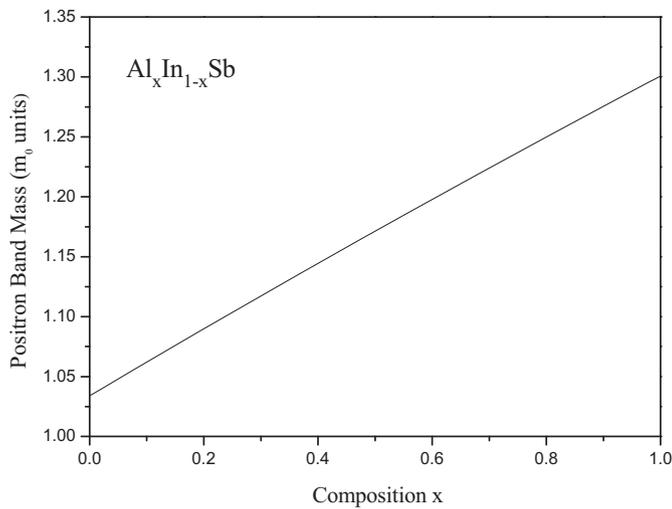


Fig. 4. Band effective mass of the positron in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ as a function of Al content.

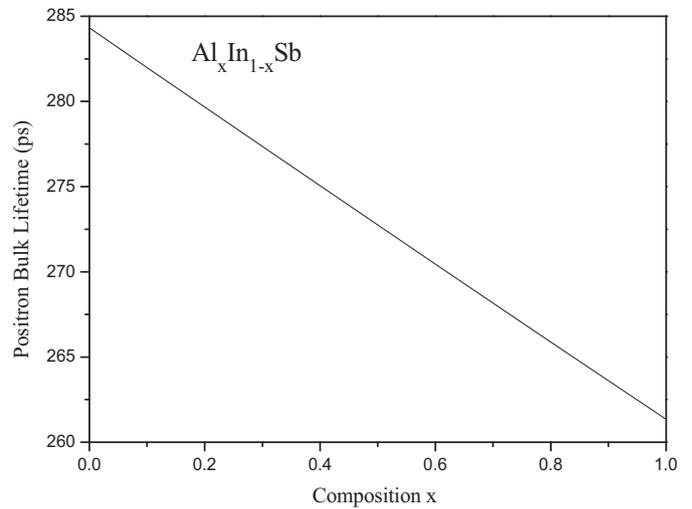


Fig. 7. Positron bulk lifetime as a function of Al content in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.

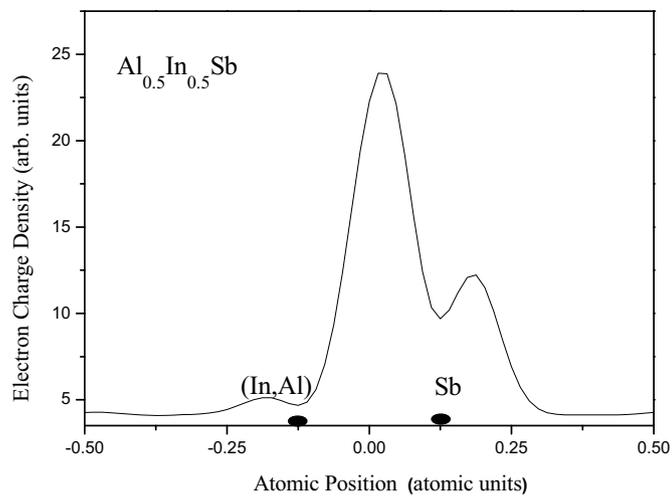


Fig. 5. Electron total valence charge density at the Γ -point along the $[1\ 1\ 1]$ direction for zinc-blende $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$.

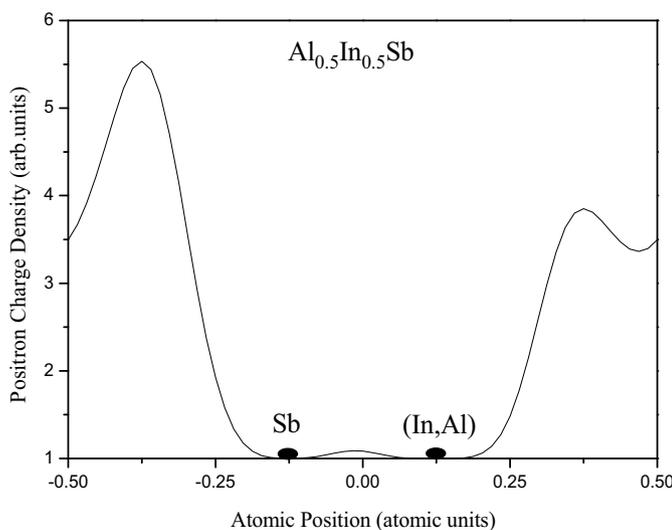


Fig. 6. Positron charge density along the $[1\ 1\ 1]$ direction for the lowest band at the Γ -point in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$.

is displayed in Fig. 6. The electron is attracted by the positive ions. Thus, the majority of the charge density is lying in the inter-atomic region, whereas at the interstitial regions there is only a small amount of charges (Fig. 5). However, due to the Coulomb repulsion from positive ion cores, the positron wave function is concentrated in the interstitial space between the atoms in the lattice. Thus, the exclusion of the positron from both the ion cores and the bonds regions can be clearly seen from Fig. 6. The positron has a tendency to be repelled by the cell containing the larger ion core and hence to be attracted to the cell with larger electron density. It seems that the positron charge density in the interstitial region nearest to the anion is more important than that in the interstitial region nearest to the cation suggesting thus that the positron has an affinity for the former.

One of the important parameters in the positron annihilation studies is the positron bulk lifetime. The latter has been calculated in the present contribution using the relation proposed by Siethoff [31]. The relation relies between positron bulk lifetime and atomic volume of tetrahedrally coordinated semiconductors and proved to give good results with respect to experiment [9]. In the present work, the positron bulk lifetime is found to be 284 and 261 ps for InSb and AlSb, respectively. To the best of our knowledge, no theoretical or experimental data have been reported so far regarding the positron bulk lifetime for InSb and AlSb to compare with. Hence, our results are predictions and may serve as a reference for future work. Nevertheless, on the basis of the experimental positron bulk lifetime of 232 ps quoted by Puska et al. [32] for GaAs, and giving the fact that the lattice parameter of GaAs (5.653 Å) is smaller than those of AlSb (6.1355 Å) and InSb (6.49 Å), one expects that the positron bulk lifetime for InSb is larger than that for AlSb which in turn is larger than that of GaAs. This is consistent with our results demonstrating thus that their order of magnitude is reasonable. Fig. 7 shows the variation of the positron bulk lifetime as a function of the Al concentration x for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$. Note that as the Al content increases on going from 0 to 1, almost a linear behavior of the positron bulk lifetime with respect to x can be observed. It should be pointed out that the positron bulk lifetime of InSb is larger than that of AlSb. Since the ionicity of InSb ($f_i = 0.321$), where f_i is the ionicity factor which measures the fraction of ionic character and should lie in the interval between zero and one, is greater than that of AlSb ($f_i = 0.250$) according to Phillips ionicity scale [33], one may conclude that the positron bulk lifetime exhibits a dependence on the ionicity of the semiconductor crystal.

4. Conclusion

A pseudopotential approach within the VCA was used so as to study the electron and positron properties in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys with the zinc-blende structure. The alloy composition range was taken from 0 up to 1. To make allowance for the compositional disorder effect, our calculations were extended beyond the VCA by introducing the alloy disorder as an effective disorder potential. In this respect, the effect of compositional disorder on the electron and positron band structures was examined and found to be more important for the electron than the positron counterpart. The differences and the similarities between electrons and positrons in terms of band structure, effective mass and charge distribution were analyzed. Our results showed that the positron characteristics are expected to give useful information about the crystal properties similarly to those obtained from the electron ones. Besides, the positron bulk lifetime as a function of the Al concentration in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ was determined and found to exhibit a monotonic behavior. The present contribution may be a useful information for the study of the positron annihilation in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys.

References

- [1] P.G. Coleman, S.C. Sharma, L.M. Diana (Eds.), Proceedings of the Sixth International Conference on Positron Annihilation, North Holland, Amsterdam, 1982.
- [2] B.K. Panda, H.C. Padhi, B. Viswanathan, Positron annihilation studies in GaAs, Phys. Stat. Sol. (b) 173 (1992) 621–626.
- [3] M.J. Puska, R.M. Nieminen, Theory of positrons in solids and on solid surfaces, Rev. Mod. Phys. 66 (1994) 841–897.
- [4] F. Tuomisto, I. Makkonen, Defect identification in semiconductors with positron annihilation: experiment and theory, Rev. Mod. Phys. 85 (2013) 1583–1631.
- [5] M. Dapor, A. Miotello, Backscattering of positrons from solid targets, Scanning Microsc. 12 (1998) 131–138.
- [6] P.G. Coleman (Ed.), Positron Beams and their Applications, World Scientific Publishing, Co. Pte. Ltd, Singapore, 2000.
- [7] M. Dapor, A comparative study of electron and positron penetration in silicon dioxide, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 151 (2006) 182–192.
- [8] N. Bouarissa, M.S. Al-Assiri, Transport of electrons and positrons impinging on solid targets: a comparative study performed by using a Monte Carlo simulation, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 191 (2013) 11–15.
- [9] N. Bouarissa, Composition dependence of positron states in zincblende $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$, Philos. Mag. B 80 (2000) 1743–1756.
- [10] N. Bouarissa, Positron behavior in GaSb under pressure, J. Phys. Chem. Solids 61 (2000) 109–114.
- [11] N. Bouarissa, Theoretical investigation of disorder effect on positron states in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$, J. Phys. Chem. Solids 62 (2001) 1163–1170.
- [12] P.N. Uppal, D.M. Gill, S.P. Svensson, D.C. Cooke, Transport properties of heterostructures based on GaSb, InAs and InSb on GaAs substrates, J. Cryst. Growth 111 (1991) 623–627.
- [13] S. Datta, III–V field-effect transistors for low power digital logic applications, Microelectron. Eng. 84 (2007) 2133–2137.
- [14] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer-Verlag, Berlin, 1988 (see for example).
- [15] T. Kobayashi, H. Nara, Properties of nonlocal pseudopotentials of Si and Ge optimized under full interdependence among potential parameters, Bull. Coll. Med. Sci. Tohoku Univ. 2 (1993) 7–16.
- [16] A. Bechiri, N. Bouarissa, Energy band gaps for the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ alloys lattice matched to different substrates, Superlatt. Microstruct. 39 (2006) 478–488.
- [17] S. Adachi, Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: key properties for a variety of the 2–4 μm optoelectronic device applications, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4869–4876 (and references therein).
- [18] C. Alibert, A. Joullié, A.M. Joullié, C. Ance, Modulation-spectroscopy study of the $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ band structure, Phys. Rev. B 27 (1983) 4946–4954.
- [19] S.J. Lee, T.S. Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, Band structure of ternary compound semiconductors beyond the virtual crystal approximation, J. Phys: Condens. Matter 2 (1990) 3253–3257.
- [20] N.E.-H. Fares, N. Bouarissa, Energy gaps, charge distribution and optical properties of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys, Infrared Phys. Technol. 71 (2015) 396–401.
- [21] N. Bouarissa, Effects of compositional disorder upon electronic and lattice properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, Phys. Lett. A 245 (1998) 285–291.
- [22] J.R. Chelikowsky, T.J. Wagener, J.H. Weaver, A. Jin, Valence-and-conduction-band densities of states for tetrahedral semiconductors: theory and experiment, Phys. Rev. B 40 (1989) 9644–9651.
- [23] N. Bouarissa, Pseudopotential calculations of $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$: energy gaps and dielectric constants, Phys. B 399 (2007) 126–131.
- [24] N. Bouarissa, Effective masses of electrons, heavy holes and positrons in quasi-binary $(\text{GaSb})_{1-x}(\text{InAs})_x$ crystals, J. Phys. Chem. Solids 67 (2006) 1440–1443.
- [25] S. Adachi, Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors, Wiley, Chichester, 2005.
- [26] O.V. Boev, M.J. Puska, R.M. Nieminen, Electron and positron energy levels in solids, Phys. Rev. B 36 (1987) 7786–7794.
- [27] B.K. Panda, Y.Y. Shan, S. Fung, C.D. Beling, Positron effective mass in silicon, Phys. Rev. B 52 (1995) 5690–5694.
- [28] S.L. Richardson, M.L. Cohen, S.G. Louie, J.R. Chelikowsky, Electron charge densities at conduction-band edges of semiconductors, Phys. Rev. B 33 (1986) 1177–1182.
- [29] N. Bouarissa, Electron valence charge densities in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ mixed crystals, Infrared Phys. Technol. 39 (1998) 265–270.
- [30] N. Bouarissa, Pseudopotential study of bonding and ionicity in InP at various pressures, Infrared Phys. Technol. 40 (1999) 117–121.
- [31] H. Siethoff, Relationship between positron bulk lifetime and atomic volume of tetrahedrally coordinated semiconductors, Phys. Stat. Sol. (b) 205 (1998) R3–R4.
- [32] M.J. Puska, S. Mäkinen, M. Manninen, R.M. Nieminen, Screening of positrons in semiconductors and insulators, Phys. Rev. B 39 (1989) 7666–7679.
- [33] J.C. Phillips, Bonds and Bands in Semiconductors, Academic, New York, 1973.

Positron affinity, deformation potential and diffusion constant in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys

Nour El-Houda Fares¹ and Nadir Bouarissa^{2,*}

¹ Materials and Electronic Systems Laboratory, University of Bordj-Bou-Arréridj, 34000, Bordj-Bou-Arréridj, Algeria

² Laboratory of Materials Physics and its Applications, University of M'sila , 28000 M'sila, Algeria

Abstract

The present investigation deals with the positron behavior in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys in the zinc-blende phase. The calculations are mainly based on a pseudopotential approach coupled with the independent particle model. Features such as elastic constants, electron and positron chemical potentials, positron deformation potential and positron diffusion constant are determined. Moreover, the positron affinity to InSb, AlSb and their related ternary alloys and heterostructures are calculated. Our results are compared to experiment where possible and found to be in reasonably good agreement. The information gathered from the present study can help in understanding the positron trapping at interfaces and at precipitates and might be useful in slow-positron-beam experiments.

Keywords: Semiconductor alloys; Positrons; Diffusion; Surface and interface states; Heterostructures.

*Corresponding author. n_bouarissa@yahoo.fr

1. Introduction

The III-V semiconductors are important materials for the high-tech photonic and optoelectronic devices. This is due to their large bulk moduli, high melting temperature and high thermal conductivity. Several techniques, such as molecular beam epitaxy, metal organic vapor phase epitaxy and liquid phase epitaxy can be used in order to obtain the film materials of devices [1].

The III-V compounds that have different fundamental properties can be mixed to ternary alloys so as to obtain a new material with intermediate properties which allow light emission and absorption at desired wavelength.

Among these materials, $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys are important materials that have an immense potential for many applications in semiconductor technology. Besides, $\text{InSb}/\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ - based quantum wells have received a growing interest. This is because of their importance for lasers [2], for devices exhibiting quantum effects such as quantized conductance [3,4] and for quantum information applications [5].

The study of solid surfaces and defect profiles using slow beams of mono-energetic positrons is currently a well-established tool for non-destructive evaluation of layered structures as well as for other surface and near-surface investigations [6-8]. However, experimental techniques require a comprehensive theory for deep, quantitative understanding of the results. Computational methods for examining positron experiments have matured and are reported in the literature [9-11]. In fact, Monte Carlo simulations can be used to investigate the positron slowing-down processes in solid targets [12-15]. The positron affinity and positron deformation potential are useful parameters for positron penetration in semiconducting materials. Moreover, the positron deformation potential is related to positron diffusion in metals and semiconductors [16,17]. These parameters can be measured experimentally and may serve as a test of the quality of the theoretical models employed for the determination of the electron and positron chemical potentials.

In the current contribution, the electron and positron energy levels in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys have been calculated. This has allowed the determination of the positron affinity, positron deformation potential and positron diffusion constant in the material system of interest. The calculations are mainly based on the empirical pseudopotential method (EPM) under the virtual-crystal approximation (VCA), whereas the

point-core approximation for the ionic potential has been used in order to evaluate the positron wave function.

2. Computational details

The electronic band structure has been computed by using the EPM [18]. It is an approach in which the potential in the Schrödinger equation is approximated by a truncated Fourier series, where the expansion coefficients are obtained by fitting to experiment. In the present work, a set of symmetrical and anti-symmetrical pseudopotential form factors are adjusted in order to yield band-gap energies that agree with the experimental measurements. The empirical pseudopotential parameters are optimized using the non-linear least-squares method as described in references [19, 20]. The used empirical energy band-gaps at Γ , X and L k-points in the fitting procedure at zero pressure for InSb and AlSb semiconductor compounds are shown in Table 1.

The potential of ternary semiconductor alloys $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is calculated using the VCA and including the compositional disorder effect into the effective potential as described in [23-25], whereas the Vegard's law is assumed for the calculation of the alloy system lattice constant.

The positron wave function is represented by plane waves and evaluated using the point-core approximation for the ionic potential as described elsewhere [10, 11, 26]. It is assumed that there is only one positron for many electrons. Hence, the exchange term can be neglected since there is no positron-positron interaction.

3. Results and discussion

Elastic properties of materials are relating to various fundamental solid-state properties such as inter atomic potentials and associated with longitudinal waves of the acoustic phonons. Thus, it is important to determine elastic constants of the material system of interest. In this respect, the elastic constants, namely C_{11} , C_{12} and C_{44} of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys have been calculated using the same approach used by Bouarissa [27] for calculating C_{11} and C_{12} and the valence force field model as reported in Refs. [28,29] for C_{44} . Our results are given in Table 2. Also shown for comparison are the available

experimental data reported in the literature. Note that our results agree well with the experimental ones reported in Ref [30] for InSb and AlSb. Our results for $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ are predictions. The variation of the elastic constants of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ as a function of the Al concentration is displayed in Fig.1. The solid, dashed and dotted lines are fitted curves drawn using the least-squares method. The corresponding expressions to the fit are as follows,

$$C_{11}(x) = 6.24 + 3.78x - 0.25x^2 \quad (1a)$$

$$C_{12}(x) = 2.70 + 1.58x - 0.092x^2 \quad (1b)$$

$$C_{44}(x) = 2.52 + 1.55x - 0.11x^2 \quad (1c)$$

One can observe that by increasing the Al concentration x , C_{11} and C_{44} increase non-linearly whereas C_{12} increases almost linearly. All constants vary monotonically exhibiting the same qualitative behavior. Nevertheless, the rate of variation seems to be more important for C_{11} .

The knowledge of elastic constants makes it possible to proceed with the average in $\langle C_{ii} \rangle$ following the approximation of Boev et al. [16]. In fact, $\langle C_{ii} \rangle$ is the elastic constant associated with longitudinal waves and averaged over the directions of propagation. The latter has been calculated using the approximate expression [16].

$$\langle C_{ii} \rangle \approx 1/2 (C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) \quad (2)$$

Our results are depicted in Table 2 and may serve as a reference for future studies. The compositional dependence of $\langle C_{ii} \rangle$ for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ in the zinc-blende phase is displayed in Fig.2. The solid line is a fitted curve plotted using the least-squares method and corresponds to the relation,

$$\langle C_{ii} \rangle (x) = 6.99 + 4.23x - 0.28x^2 \quad (3)$$

Note that on going from InSb ($x=0$) to AlSb ($x=1$), $\langle C_{ii} \rangle$ increases monotonically from 7.011×10^{11} to 10.933×10^{11} dyn/cm².

Another important parameters than can be obtained from the electron and positron band structures are the internal electron and positron chemical potentials. These features are denoted by μ_- and μ_+ for the electron and positron, respectively and are purely bulk properties. μ_- is equal to the Fermi energy in the electron band structure, whereas μ_+ is the lowest energy in the positron band structure. The calculated electron and positron chemical potentials for InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb semiconducting materials are shown in Table 3. Due to the absence of both theoretical and experimental data regarding μ_- and μ_+ for the materials of

interest, to the best of our knowledge, our results are only for reference and may serve for future investigations.

The variation of μ_- and μ_+ as a function of the Al content in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys is plotted in Figures 3 and 4, respectively. The solid lines in both figures are the curves that fit best the obtained data in the present work, which correspond to the following expressions:

$$\mu_-(x) = -0.044 - 1.32x + 0.51x^2 \quad (4)$$

$$\mu_+(x) = -7.44 + 0.19x - 0.08x^2 \quad (5)$$

Note that as ones proceeds from InSb to AlSb, μ_- decreases, whereas μ_+ increases. Both variations are monotonic. However, μ_+ exhibits a weaker bowing parameter as compared to that of μ_- (see the quadratic terms in Eqs.4 and 5). The increase of the positron chemical potential when going from InSb to AlSb is consistent with the positron bulk lifetime in these compounds reported very recently by Fares and Bouarissa [31], bearing in mind that the thermalized positrons are near the bottom of the lowest energy band at $k_+=0$.

The positron affinity denoted by A_+ is a basic bulk characteristic of materials. It has an important role in the understanding of positron trapping at interfaces and at precipitates [32]. It can be obtained simply by using the relation [33]

$$A_+ = \mu_- + \mu_+ \quad (6)$$

Our results concerning A_+ for InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb are listed in Table 3. In Fig.5 we display the positron affinity against the alloy composition x for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$. Note that by increasing the alloy concentration x , A_+ decreases monotonically. The solid line is the best fit of our results using a least-squares procedure which corresponds to the following expression,

$$A_+(x) = -7.48 - 1.13x + 0.43x^2 \quad (7)$$

The quadratic term in equation (7) is the bowing parameter of the positron affinity. It indicates that the behaviour of A_+ versus the alloy composition x is non-linear. It should be noted that A_+ is a bulk material property. However, its practical usage concerns material surfaces and interfaces [32]. Thus, for heterostructures formed by distinct materials M_1 and M_2 in contact, the electron chemical potentials align mutually, and hence the difference between the positron levels can give the difference between the positron affinities in M_1 and M_2 as [16,33],

$$\Delta A_+^{M_1, M_2} = A_+^{M_1} - A_+^{M_2} \quad (8)$$

Using the values of A_+ given in Table 3, the positron affinity to different heterostructures formed by InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb semiconducting materials has been calculated. For

example, InSb and $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ in contact (InSb/ $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ heterostructure), the positron favours $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ with an affinity difference of 0.40 eV. On the other hand, for InSb and AlSb in contact (InSb/AlSb heterostructure), the positron favours AlSb with an affinity difference of 0.60 eV, whereas it favours AlSb with an affinity difference of - 0.20 eV for AlSb/ $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ heterostructure. It is worth noting that if M_2 is a precipitate, the relation $\Delta A_+^{M_1, M_2} > 0$ is a necessary condition for the trapping of positrons in this precipitate.

Another interesting quantity regarding the positron characteristics is the positron deformation potential denoted by E_d^+ which has been calculated using the relation [16],

$$E_d^+ = -V_0 \frac{dA_+}{dV} \quad (9)$$

Where V_0 is the crystal volume at zero pressure. The volume derivatives of the positron affinity are obtained by performing electron and positron band structure calculations based on the EPM coupled with the independent particle model for various lattice constants which are obtained by using different pressures. The change in the lattice constant as a function of pressure is calculated using the Murnaghan equation of state. The values of the equilibrium bulk modulus (B_0) and its first pressure derivative (B'_0) used in the present contribution are $B_0 = 4.56 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$, $B'_0 = 4.899$ and $B_0 = 5.82 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$, $B'_0 = 4.55$ for InSb and AlSb, respectively [30]. The pressure derivatives of the pseudopotential form factors required in the present calculation are obtained empirically by fitting the first order pressure coefficients of the band gaps at Γ , X and L high-symmetry points in the Brillouin zone to those of $\frac{dE_{\Gamma\Gamma}}{dp} = 17.6$, $\frac{dE_{\Gamma X}}{dp} = 2.7$, $\frac{dE_{\Gamma L}}{dp} = 8.3$ ($\times 10^{-3} \text{ eV/kbar}$) and $\frac{dE_{\Gamma\Gamma}}{dp} = 10$, $\frac{dE_{\Gamma X}}{dp} = -1.5$, $\frac{dE_{\Gamma L}}{dp} = 6.4$ ($\times 10^{-3} \text{ eV/kbar}$) reported in Ref. [34] for InSb and AlSb, respectively. Table 4 shows pseudopotential parameters used in this work for InSb and AlSb at pressures ranging from 0 to 20 kbar. In Table 5, we list the calculated positron deformation potential for InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb. Once again our results are only for reference.

The variation of E_d^+ as a function of the Al concentration for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys is plotted in Fig.6. The solid line in Fig.6 represents the curve that fit best the obtained data, which gives the analytical relation,

$$E_d^+(x) = 3.88 - 0.64x + 0.04x^2 \quad (10)$$

We observe that as the Al content increases from $x=0$ to $x=1$, the positron deformation potential decreases monotonically exhibiting an almost linear behaviour. This can be confirmed from equation (10) where one can see a very weak bowing parameter.

From the deformation potential theory, one can get the positron diffusion constant due to acoustic phonon scattering as follows [16],

$$D_+ = \left[\frac{8\pi}{9} \right]^{1/2} \frac{\hbar^4 \langle C_{ii} \rangle}{m_+^{*5/2} (K_B T)^{1/2} E_d^{+2}} \quad (11)$$

Where m_+^* is the positron effective mass, T the absolute temperature, and $\langle C_{ii} \rangle$ the elastic constant mentioned above. m_+^* has been calculated following the approach used by Bouarissa [35]. Our predicted results as regards D_+ for InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$, and AlSb semiconducting materials are listed in Table 5. The variation in D_+ as a function of the Al concentration x for $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ is displayed in Fig.7. The solid line is a fitted curve drawn using the least-squares method, which corresponds to the following analytical expression,

$$D_+(x) = 6.86 + 0.05x + 1.62x^2 \quad (12)$$

Note that as one goes from InSb to AlSb parent compounds, the positron diffusion constant increases monotonically showing a non linear behaviour with a large bowing parameter. This can be seen from equation 12. On the basis of the energy band-gap trend [25], and that of the positron diffusion constant in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ semiconductor ternary alloys, one may conclude that the positron diffusion constant follows the same trend as that of the energy band-gap.

4. Conclusion

In summary, a theoretical investigation of electron and positron energy levels in zinc-blende $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary semiconductor alloys has been performed using a pseudopotential approach coupled with the independent particle model. The alloy potential has been calculated within the VCA that takes into account of the disorder effect. Quantities such as a positron deformation potential, positron affinity and positron diffusion constant have been obtained for materials of interest and heterostructures formed by these materials. Besides, elastic constants and the elastic constant associated with longitudinal waves averaged over the directions of propagation have been determined. Our results were compared to experiments, where possible, and found to be in reasonably good agreement. Other case, our

results are predictions and may serve for a reference for future studies. The compositional dependence of all features being studied here has been examined and expressed by quadratic polynomial forms. The present study was capable of predicting quantities which can be measured directly using the slow-positron-beam techniques. This is very useful for the investigation of both bulk and surface solids.

References

- [1] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* 89 (2001) 5815 and references cited therein.
- [2] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, A.R. Adams, T. Ashley, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001) 2640.
- [3] N. Goel, J. Graham, J.C. Keay, K. Suzuki, S. Miyashita, M.B. Santos, Y. Hirayama, *Physica E* 26 (2005) 455.
- [4] J.M.S. Orr, P.D. Buckle, M. Fearn, C.J. Storey, L. Buckle, T. Ashley, *New J. Phys.* 9 (2007) 261.
- [5] G.A. Khodaparast, R.E. Doezema, S.J. Chung, K.J. Goldammer, M.B. Santos, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 155322.
- [6] P.J. Schultz, K.G. Lynn, *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 701.
- [7] P.G. Coleman, L. Albrecht, K. O. Jensen, A. B. Walker, *J. Phys. Condens. Matter* 4 (1992) 10311.
- [8] P.G. Coleman, *App. Surf. Sci.* 194 (2002) 264.
- [9] M.J. Puska, R. M. Nieminen, *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994) 841 and references cited therein.
- [10] N. Bouarissa, *Philos. Mag. B* 80 (2000) 1743.
- [11] N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* 62 (2001) 1163.
- [12] K.O. Jensen, A.B. Walker, N. Bouarissa, in: *Positron Beams for Solids and Surfaces*, AIP Conf. Proc. No. 218, Eds. P. J. Schultz, G. R. Massoumi, and P. J. Simpson, American Institute of Physics, New York 1990 (p. 19).
- [13] M. Dapor, A. Miotello, *Scanning Microsc.* 12 (1998) 131.
- [14] M. Dapor, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 151 (2006) 182.
- [15] N. Bouarissa, M.S. Al-Assiri, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 191 (2013) 11.
- [16] O.V. Boev, M.J. Puska, R.M. Nieminen, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 7786.
- [17] N. Bouarissa, *Phys. Stat. Sol. (b)* 231 (2002) 391.

- [18] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1988 (See for example).
- [19] T. Kobayasi, H. Nara, *Bull. Coll. Med. Sci. Tokoku Univ.* 2 (1993) 7.
- [20] A. Bechiri, N. Bouarissa, *Superlatt. Microstruct.* 39 (2006) 478.
- [21] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 4869 and references cited therein.
- [22] C. Alibert, A. Joullié, A.M. Joullié, C. Ance, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 4946.
- [23] S.J. Lee, T.S Kwon, K. Nahm, C.K. Kim, *J. Phys. Condens. Matter* 2 (1990) 3253.
- [24] N. Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285.
- [25] N.E.-H. Fares, N. Bouarissa, *Infrared Phys. Technol.* 71 (2015) 396.
- [26] N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* 61 (2000) 109.
- [27] N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 100 (2006) 41.
- [28] W.A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, New York, 1980.
- [29] L. Hannachi, N. Bouarissa, *Physica B* 404 (2009) 3650.
- [30] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III–V, and II–VI Semiconductors*, Wiley, Chichester, 2005.
- [31] N.E.-H. Fares, N. Bouarissa, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* 206 (2016) 1.
- [32] J. Kuriplach, M. Sob, G. Brauer, W. Anward, E.-M. Nicht, P. G. Coleman, N. Wagner, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 1948.
- [33] M.J. Puska, P. Lanki, R.M. Nieminen, *J. Phys. Condens. Matter* 1 (1989) 6081.
- [34] Y.F. Tsay, S.S. Mitra, B. Bendow, *Phys. Rev. B* 10 (1974) 1476.
- [35] N. Bouarissa, *J. Phys. Chem. Solids* 67 (2006) 1440.

Figure Caption

Fig. 1. Elastic constants in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 2. Elastic constant associated with longitudinal waves and averaged over the directions of propagation in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 3. Electron chemical potential in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 4. Positron chemical potential in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 5. Positron affinity in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 6. Positron deformation potential in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Fig. 7. Positron diffusion constant in $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloys versus Al content.

Table 1. Experimental band-gap energies for InSb and AlSb fixed in the fits at zero pressure.

Compound	$E_{\Gamma-\Gamma}$ (eV)	$E_{\Gamma-X}$ (eV)	$E_{\Gamma-L}$ (eV)
InSb	0.18 ^a	1.63 ^a	0.93 ^a
AlSb	2.30 ^b	1.615 ^b	2.211 ^b

^a Ref. [21]; ^b Ref. [22].

Table 2. Elastic constants and the average in $\langle C_{ii} \rangle$ for zinc-blende InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb.

Material	Elastic constants (10^{11} dyn/cm^2)			
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\langle C_{ii} \rangle$
InSb	6.26 ^a	2.71 ^a	2.526 ^a	7.011 ^a
	6.608 ^b	3.531 ^b	3.027 ^b	
$\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	8.073 ^a	3.471 ^a	3.267 ^a	9.039 ^a
AlSb	9.766 ^a	4.188 ^a	3.956 ^a	10.933 ^a
	8.769 ^b	4.341 ^b	4.076 ^b	

^a This work

^b Experimental data reported in Ref. [30].

Table 3. Electron and positron chemical potentials and positron affinity for zinc-blende InSb, $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ and AlSb.

Material	μ_- (eV)	μ_+ (eV)	A^+ (eV)
InSb	-0.09 ^a	-7.43 ^a	-7.52 ^a
$\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	-0.57 ^a	-7.36 ^a	-7.92 ^a
AlSb	-0.81 ^a	-7.31 ^a	-8.12 ^a

^a This work

Table 4. Pseudopotential parameters for zinc-blende ^(a)InSb and ^(b)AlSb at various pressures up to 20 kbar.

a) InSb

Pseudopotential parameters	p = 0 kbar	p = 5 kbar	p = 10 kbar	p = 15 kbar	p = 20 kbar
$V_s(3)$ (Ry)	-0.201294	-0.201109	-0.200967	-0.200878	-0.200727
$V_s(8)$ (Ry)	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
$V_s(11)$ (Ry)	0.028338	0.030451	0.031422	0.034612	0.036643
$V_A(3)$ (Ry)	0.064495	0.063882	0.063319	0.062763	0.062233
$V_A(4)$ (Ry)	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
$V_A(11)$ (Ry)	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015
Lattice constant (at. Units)	12.2684	12.2248	12.1835	12.1443	12.1070

b) AlSb

Pseudopotential parameters	p = 0 kbar	p = 5 kbar	p = 10 kbar	p = 15 kbar	p = 20 kbar
$V_s(3)$ (Ry)	-0.225597	-0.223732	-0.221471	-0.219438	-0.217605
$V_s(8)$ (Ry)	0.028086	0.025325	0.021853	0.018512	0.015273
$V_s(11)$ (Ry)	0.062230	0.065721	0.069888	0.073990	0.078050
$V_A(3)$ (Ry)	0.007109	0.007109	0.007109	0.007109	0.007109
$V_A(4)$ (Ry)	0.058960	0.058960	0.058960	0.058960	0.058960
$V_A(11)$ (Ry)	0.004544	0.004544	0.004544	0.004544	0.004544
Lattice constant (at. Units)	11.5983	11.5658	11.5345	11.5045	11.4755

Table 5. Positron deformation potential and positron diffusion constant for zinc-blende InSb, $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ and AlSb.

Material	E_d^+ (eV)	D_+ (cm ² /s)
InSb	3.88 ^a	6.86 ^a
$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$	3.57 ^a	7.29 ^a
AlSb	3.28 ^a	8.53 ^a

^a This work

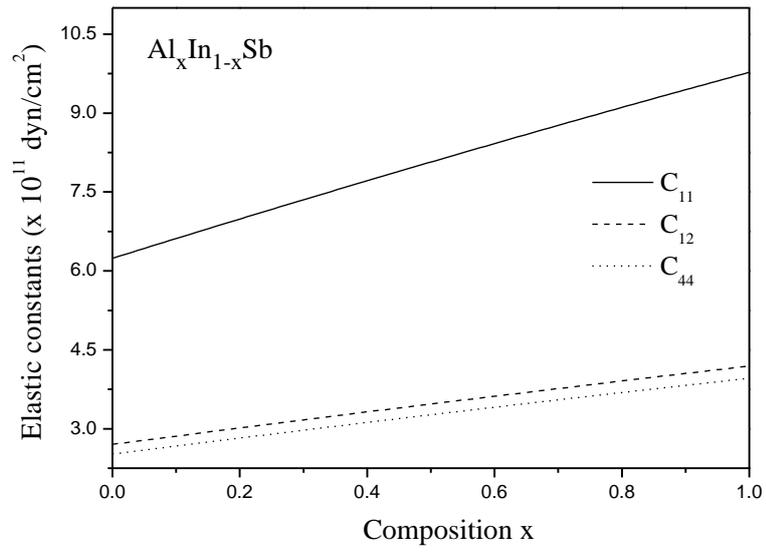


Fig. 1.

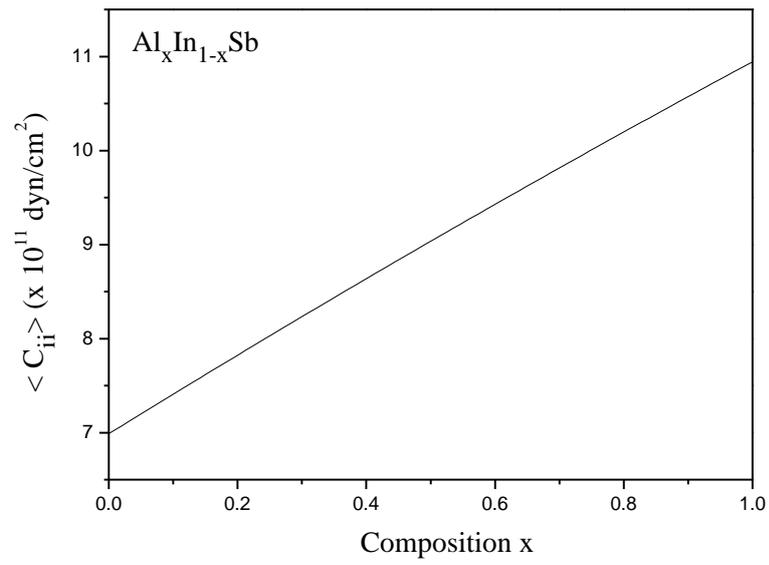


Fig.2.

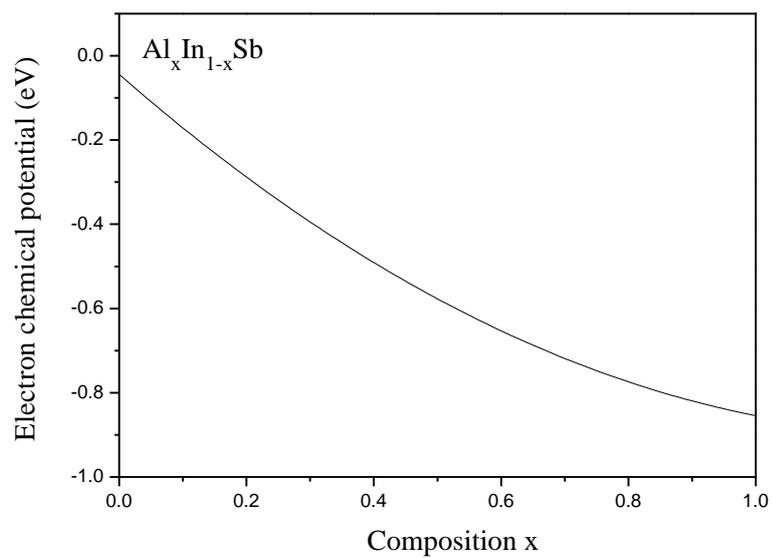


Fig.3.

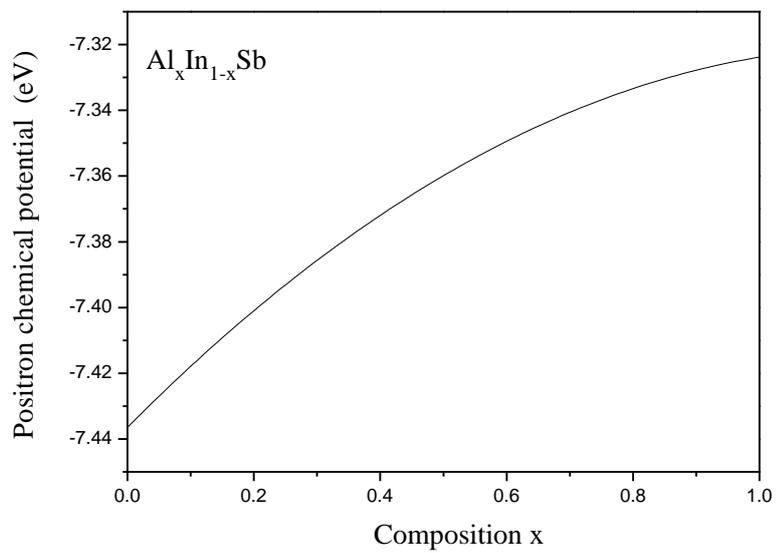


Fig.4.

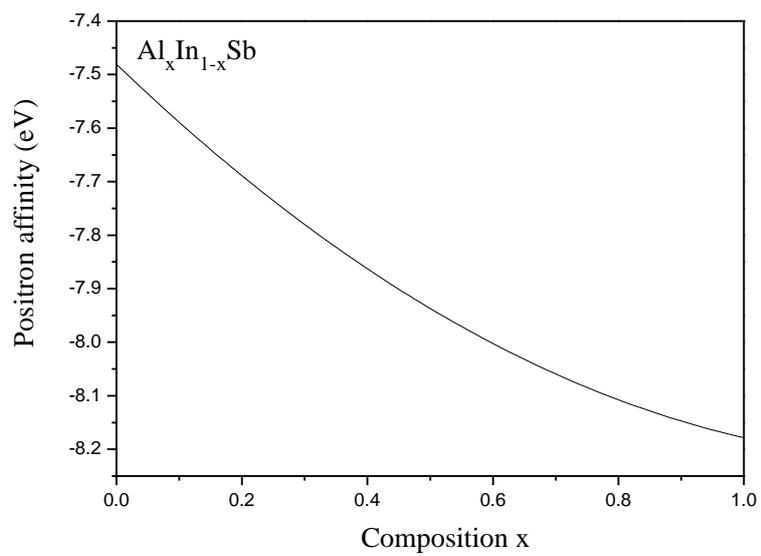


Fig.5.

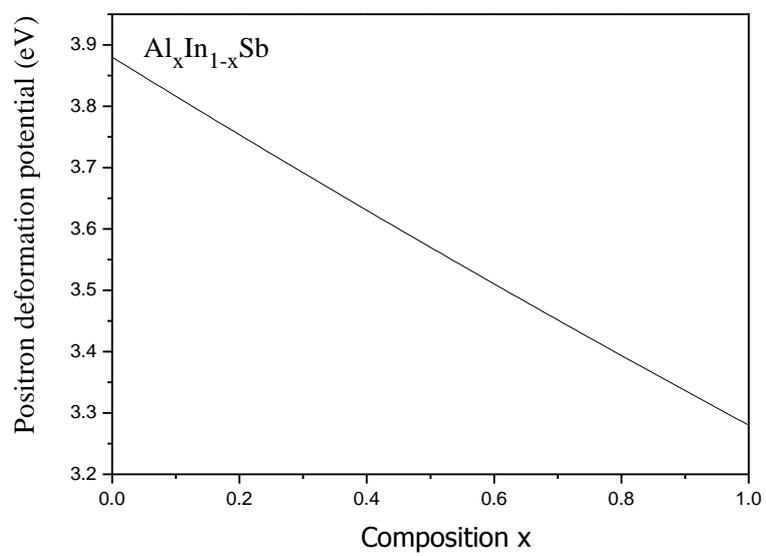


Fig.6.

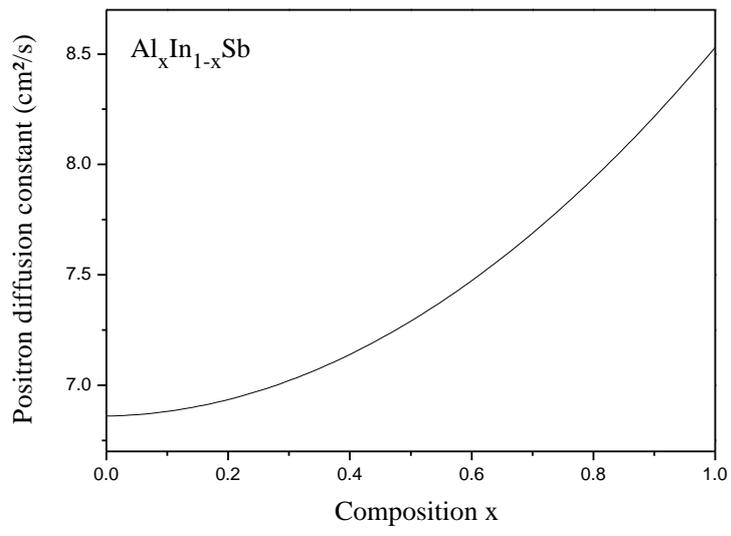


Fig.7.