



*République Algérienne Démocratique & Populaire*

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



## **Université Ziane Achour – Djelfa**

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département des Sciences de la Matière

**MSIL** *Materials Science and Informatics Laboratory*

N° d'Ordre :

# **PROPRIETES ELECTRONIQUES ET OPTIQUES DU SEMICONDUCTEUR InSb NANOSTRUCTURE : EFFET DE LA TAILLE DES NANOCRISTAUX**

*Mémoire présenté par*

**Kania BACHIRI**

*Pour l'obtention du grade de*

**Master**

*en : Physique des Matériaux*

*Soutenu le : ..... devant la commission d'examen :*

Dr Djamel Rahou	Président	Université de Djelfa	_____
Prof. Ahmed Gueddim	Encadreur	Université de Djelfa	_____
Dr Abdelkrim Naas	Examineur	Université de Djelfa	_____
Dr Assia Bouraiou	Examineur	Université de Djelfa	_____



## *Dédicace*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*A mes chers parents*

*A mes frères et sœurs*

*A Tous mes amis*

*A Tous mes enseignants du primaire à l'université*

Kania

## *Remerciements*

Ce travail a été réalisé au *Materials Science and Informatics Laboratory* de l'Université Ziane Achour de Djelfa.

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce travail.

Je tiens à remercier Monsieur *GUEDDIM AHMED*, Professeur à l'Université de Djelfa, pour m'avoir proposé un sujet de mémoire aussi passionnant, ainsi que pour sa gentillesse et son suivi dont j'ai pu apprécier l'enthousiasme et le sérieux dans le travail ; je lui dois beaucoup pour ce travail .

J'exprime mes sincères remerciements également à Mrs *D. Rahou* et *A. Naas*, maitres de conférences à l'université de Djelfa pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Mes remerciements sont aussi à Mme *A. Bouraiou* pour bien avoir voulu examiner ce travail .

Je remercie aussi mes parents, et les personnes que je n'ai pas citées et que je voudrais remercier pour leur contribution à la réalisation de ce travail.

Kania.

## **Table des matières**

Liste des tableaux.....	i
Liste des figures.....	ii
Introduction.....	1
Référence.....	3

### **CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LES NANOCRISTAUX ET InSb A L'ETAT MASSIF**

1.1.Introduction.....	4
1.2. Définition d'un quantum dot .....	4
1.2.1.Structure cristalline des nanocristaux.....	5
1.2.2. Propriétés optiques.....	6
1.2.3. Propriétés électriques des QDs .....	7
1.2.4.Structures électroniques dans les nanocristaux semi-conductrices : .....	8
1.2.5.Le confinement quantique .....	9
1.2.5.1. Les différents régimes de confinement .....	10
1.2.5.1. A. Régime de faible confinement .....	11
1.2.5.1. B. Régime de fort confinement .....	12
1.2.5.1. C. Régime de confinement intermédiaire.....	12
1.3. Matériau InSb .....	12
1.3.1. Présentation des matériaux III-V.....	13
1.3.2. Propriétés de l'antimoniure d'indium InSb .....	14
1.3.3. Structure de bande de l'antimoniure d'indium InSb.....	14
1.3.4. Les paramètres physiques des InSb .....	16
1.4.Conclusion.....	17
Référence .....	18

### **CHAPITRE 2 : METHODE DU PSEUDOPOTENTIEL**

2.1. Introduction .....	20
2.2. Historique.....	20
2.3. Concept du pseudopotentie.....	21
2.4. Méthode des pseudopotentiels.....	23

---

2.4.1. Méthode du pseudopotentiel local .....	23
2.4.2. Les Modèles du pseudopotentiel non local .....	29
2.4.2.1.1. Modèle d'Aschcroft .....	29
2.4.2.1.2- Modèle de Heine-Abarenkov ..	30
2.4.2.1.3- Modèle de Gauss .....	30
2.5. Conclusion.....	31
Référence .....	32

### **CHAPITRE 3 : RESULTATS & DISCUSSIONS**

3.1. Introduction.....	34
3.2. Propriétés électroniques.....	34
3.2.1. Gaps d'énergie.....	34
3.2.2. Largeur de la bande de valence.....	35
3.2.3. Masses effectives des porteurs.....	36
3.2.4. Facteur d'ionocité.....	38
3.3. Propriétés optiques.....	39
3.3.1. Indice de réfraction.....	39
3.3.2. Constantes diélectriques.....	40
3.3.3. Charge effective transverse.....	42
3.4. Conclusion.....	43
Référence.....	44
Conclusion générale.....	45
Référence.....	48

*Liste des tableaux*

Tableau 1.1	Extrait de la classification périodique des éléments.	13
Tableau 1.2	Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K.	13
Tableau 1.3	Les paramètres physiques de l'InSb.	16

## *Liste des figures*

Fig.1.1	Schéma de la structure zinc-blende.	5
Fig.1.2	(a) Schéma résumant les phénomènes optiques dans les nanocristaux [6] (b).L leurs impacts sur les spectres d'absorption et de photoluminescence, (c) Effet de la diminution de la taille sur les propriétés de photoluminescence pour des Nanocristaux d'InP.	6
Fig.1.3	Evolution de la structure électronique entre le solide massif et des nanocristaux de taille décroissante .	8
Fig.1.4	Les trois régimes de confinement pour un nanocristal.	9
Fig.1.5	Schémas représentatif du spectre d'énergie d'une particule. A gauche : dans le cas d'un semiconducteur massif. A droite : niveaux d'énergie d'une particule sphérique.	10
Fig.1.6	Structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin.	15
Fig.2.1	Potentiel d'interaction de deux atomes en fonction de la distance interatomique.	21
Fig.2.2	Représentation du pseudo-potentiel dans l'espace reel.	26
Fig.2.3	Représentation du pseudo-potentiel dans l'espace réciproque.	27
Fig.2.4	Diagramme bloc de la méthode E. P.M local.	28
Fig.2.5	Les modèles du pseudo-potentiel non local.	31
Fig.3.1	Variation des gaps direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la taille du noncristal d'InSb.	35
Fig.3.2	Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.	36
Fig.3.3	Variation de la masse effective des électrons (en unité de $m_0$ ) en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.	37
Fig.3.4	Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de $m_0$ ) en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.	37
Fig.3.5	Variation de l'ionicité en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.	38

Fig.3.6 Variation de Indice de réfraction en fonction de la taille du nanocristal d'InSb. 40

Fig.3.7 Variation des constantes diélectriques statique et de haute fréquence en fonction de la taille du nanocristal d'InSb. 41

Fig.3.8 Variation de la charge effective transverse en fonction de la taille du nanocristal d'InSb. 42

# INTRODUCTION

De nos jours, les semiconducteurs III-V à l'état nanostructuré s'imposent comme un sujet de recherche primordial vu les multiples applications technologiques [1,2] dont ils sont susceptibles. Les nanocristaux de ces semiconducteurs ont des propriétés qui peuvent être mises à profit pour des applications en micro- nano-électronique, optoélectronique, ou même photovoltaïque [3-12]. L'énergie de gap du semiconducteur nanostructuré est fortement contrôlée par sa taille [2] ; pour cela la détermination de la variation des différentes propriétés électroniques et optiques des nanomatériaux est d'une grande importance aussi bien sur le front fondamental que sur celui des applications technologiques.

Dans un semiconducteur massif, les électrons se répartissent dans les bandes d'énergie permises (conduction et valence) qui sont séparées par une bande interdite. Les porteurs de charges libres (électrons et trous) sont libres de se déplacer selon les trois directions de l'espace. Pour des matériaux avec des dimensions inférieures à la longueur d'onde de de Broglie, les propriétés électroniques et optiques du matériau seront complètement modifiées vu l'effet de confinement résultant en une quantification des états énergétiques de ces porteurs.

C'est sur ce registre que s'inscrit notre travail. Notre objectif est d'explorer comment vont varier les propriétés électroniques et optiques telles que les différents gaps d'énergie, la largeur de la bande de valence, les masses effectives des électrons et des trous, le gap antisymétrique, l'ionocité, l'indice de réfraction, les constantes diélectriques statiques et de haute fréquence ainsi que la charge effective transverse dans des quantum dots d'InSb supposés sphériques, sous l'effet du confinement quantique.

Nos présentons les variations de chacune des grandeurs examinées en fonction du diamètre des quantum dots d'InSb et nous déterminons le seuil radial en deçà duquel les effets du confinement quantique se font sentir de manière appréciable.

Cette étude est menée moyennant la méthode empirique du pseudopotentiel [13] qui est bien adaptée à l'investigation des propriétés physique des nanomatériaux. Il est vrai que cette approche ne peut remplacer les méthodes du premier principe, néanmoins elle présente l'avantage de donner des résultats plus précis sans demander des temps de calculs aussi long que ceux des méthodes ab initio [14-17].

Ce mémoire est organisé de la façon suivante:

Le chapitre 1 présente la définition des quantum dots, le confinement des porteurs dans ces structures ainsi que leurs propriétés les propriétés électroniques et optiques. Une section a été consacrée aux excitons dans les matériaux massif et nanocristallins, et terminer nous avons rappelé quelques avantages et applications des boîtes quantiques. Dans le chapitre 2, nous décrivons la méthode des pseudopotentiels utilisée pour l'investigation de l'effet du confinement quantique sur les propriétés optoélectroniques de nos quantum dots d'InSb. Enfin, dans Le chapitre 3, nous rapportons l'essentiel de nos résultats théoriques commentés et discutés.

**Références**

- [1] K.E. Andersen, C.Y. Fong, W.E. Pickett, *J. Non-Cryst. Solids* 299–302 (2002) 1105.
- [2] A.Gueddim, T.Eloud, N.Messikine, N.Bouarissa, *Superlatt. and Microstruct.*, 77 (2015) 124.
- [3] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C.M. Reaves, S.P. Denbaars, P.M. Petro, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3203.
- [4] J.Y. Marzin, J.M. Gerard, A. Izral, D. Barrier, G. Bastard, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 716.
- [5] H. Merchand, P. Desuardins, S. Guillon, J. Paultre, R. Mascut, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997) 527.
- [6] H. Li, T. Daniels-Race, Z. Wang, *Appl. Phys. Lett.* 74 (1999) 1388.
- [7] Y. Toda, O. Moriwaki, M. Nichioka, Y. Arakawa, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4114.
- [8] R.L. Sellin, Ch. Ribbat, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, D. Biomberg, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001) 1207.
- [9] L. Chu, A. Zrenner, M. Bichler, G. Abstreiter, *Appl. Phys. Lett.* 79 (2001) 2249.
- [10] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, N. Iwasa, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31 (1992) L139.
- [11] W.H. Jung, T.W. Kang, T.W. Kim, K.S. Chung, *Jpn. J. Appl. Phys.* 39 (2000) L1084.
- [12] N.Y. Morgan, D. Abusch-Magder, M.A. Kastner, Y. Takahashi, H. Tamura, K. Murase, *J. Appl. Phys.* 89 (2001) 410.
- [13] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988.
- [14] P.R.C. Kent, L. Bellaiche, A. Zunger, *Semicond. Sci. Technol.* 17 (2002) 851.
- [15] G. Bester, *J. Phys. Condens. Matter* 21 (2009) 023202.
- [16] A. Hafaiedh, N. Bouarissa, *Physica E* 43 (2011) 1638.
- [17] N. Bouarissa, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 10 (2013) 1284.

# Chapitre 1

## GENERALITES SUR LES NANOCRISTAUX ET InSb A L'ETAT MASSIF

### 1.1. Introduction

Depuis quelques décades, les semiconducteurs se sont taillés une place de choix dans de nombreux domaines à cause de leurs propriétés exceptionnelles : contrôle de conductivité par dopage, bons émetteurs et détecteurs de lumière, possibilité de modifier leurs caractéristiques par micro- et nano-fabrication, conductivité sensible à la température et à l'excitation optique, etc. [1].

De nos jours, les physiciens se sont passionnés pour les propriétés physiques des nanomatériaux, liées à leur très faible taille ; cette particularité faite que ces nanomatériaux représentent un état de la matière intermédiaire entre la molécule et le cristal massif [2].

Dans ce chapitre, nous présentons d'une part des généralités sur les quantum dots (QDs) en s'intéressant particulièrement aux effets liés au confinement quantique qui apparaissent lorsque la dimensionnalité des matériaux peut être qualifiée de basse ; à une échelle de l'ordre du rayon de Bohr  $a_B$  (quelques nanomètres) et d'autre part nous présentons les propriétés de l'antimoniure d'indium (InSb) à l'état massif qui seront nécessaires dans la suite pour les calculs et pour faire des comparaisons avec les propriétés similaires du même matériau dans sa phase nanométrique.

### 1.2. Définition d'un quantum dot

Les quantum dots semiconducteurs, aussi appelés boîtes quantiques, sont des matériaux ayant des propriétés intermédiaires entre celles des atomes isolés et des semiconducteurs macroscopiques. En raison de leurs faibles dimensions (1 à 10 nm), ces nanocristaux semi-conducteurs présentent des propriétés de fluorescence et des effets de confinement quantique liés à leur taille [3]. L'importance des QDs vient d'effets de basse dimensionnalité (0D) qui

induisent des changements des propriétés électroniques. Ces inclusions nanométriques présentent un fort confinement tridimensionnel des porteurs dû au fait que les porteurs pour minimiser leur énergie vont aller dans les QDs. Ce confinement conduit à une discrétisation des états électroniques. C'est cette propriété des QDs qui présente l'intérêt principal car on peut les considérer comme des atomes artificiels.

Dans le domaine de l'optoélectronique, l'utilisation de QDs dans la structure d'émetteurs et de détecteurs permet d'améliorer certaines de leurs caractéristiques : faible courant de seuil, sensibilité à la température réduite, la raie d'émission est fine dans le cas d'un QD unique alors que pour un ensemble de QDs la raie d'émission est plus large. Les bandes d'émission et de détection sont accordables grâce à des techniques d'inter-diffusion [1].

### **1.2.1. Structure cristalline des nanocristaux**

Comme dans le cas du matériau massif, les nanocristaux semiconducteurs (NCs) II-VI ou III-V présentent le phénomène de polymorphisme (plusieurs forme), c'est-à-dire qu'ils peuvent cristalliser dans plusieurs structures distinctes. [4] Pour notre matériau (InSb), il cristallise dans la phase zinc-blende (ZB) montrée sur la Fig. 1.1.

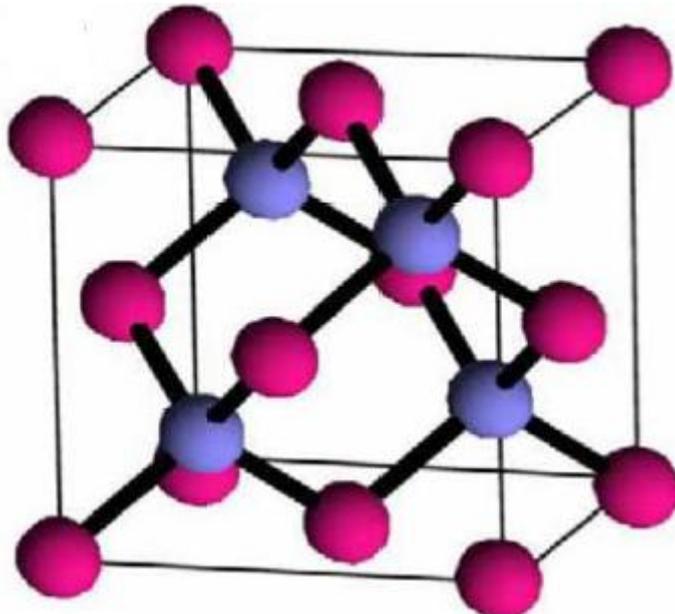


Fig. 1.1. Schéma de la structure zinc-blende [5].

### 1.2.2. Propriétés optiques des QDs

Deux principales caractéristiques optiques des nanocristaux existent massivement dans la littérature : l'absorption et la photoluminescence. Les nanocristaux peuvent absorber des photons d'énergie supérieure à la valeur de leur gap. L'observation d'un pic excitonique sur le spectre d'absorption d'une solution de nanocristaux correspond à la transition optique du premier état excité. Sa position en longueur d'onde est directement reliée à son gap tandis que la largeur de ce pic est directement liée à une dispersion en taille des nanocristaux. Dans le cas où les nanocristaux possèdent une dispersion en taille importante, on observera un épaulement à la longueur d'onde du pic excitonique. Sur les spectres bien résolus, significatifs d'une faible dispersion en taille des nanocristaux, on peut également observer des phénomènes d'absorption dans les faibles longueurs d'onde qui sont attribuables à des états excités de plus hautes énergies. La photoluminescence est par définition l'émission d'un photon. Il existe donc deux types d'émission : la fluorescence et la phosphorescence. La première se constitue d'une absorption d'un photon puis, de l'émission d'un photon de moindre énergie issu de la désexcitation de l'électron après relaxation de celui-ci par le biais de phonons. Le photon émis sera donc de longueur d'onde plus grande (et d'énergie plus basse). Le second type de luminescence est la phosphorescence et se caractérise par un phénomène similaire, mais à une échelle de temps plus grande. La Fig. 1.2. Résume ces phénomènes optiques.

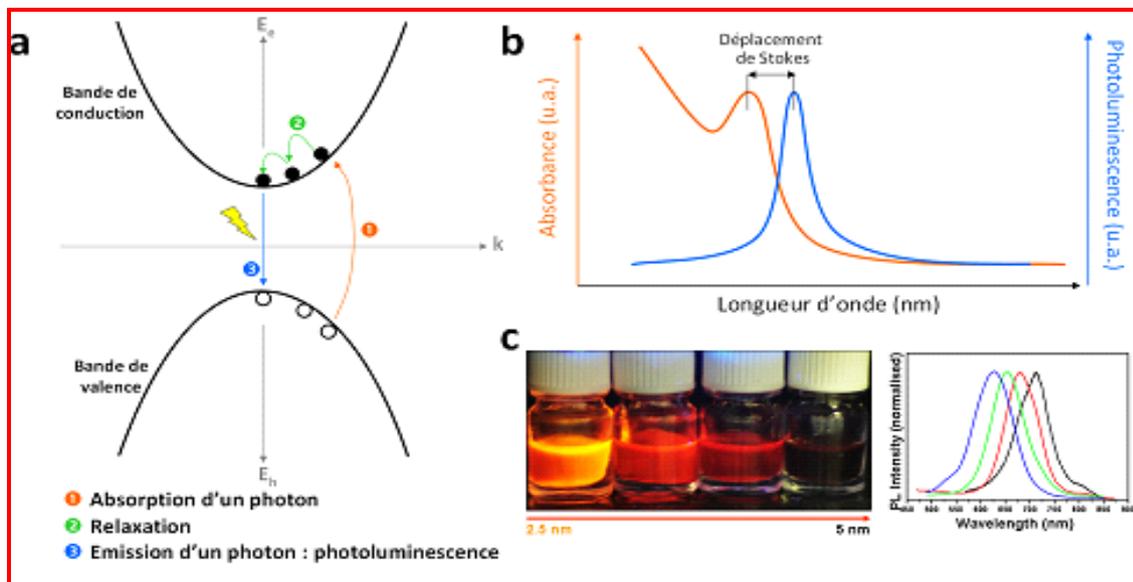


Fig.1.2. (a) Schéma résumant les phénomènes optiques dans les nanocristaux [6]  
 (b).L leurs impacts sur les spectres d'absorption et de photoluminescence,  
 (c) Effet de la diminution de la taille sur les propriétés de photoluminescence pour des Nanocristaux d'InP [7].

L'énergie du photon émis correspond quasiment à la valeur du gap du matériau, c'est pour cette raison que l'on peut contrôler la couleur des nanocristaux en ajustant le gap. Cependant, la présence de défauts de surface ou d'une mauvaise passivation peut inhiber cette émission par le biais de recombinaisons non-radiatives. Lorsque le photon émis est d'énergie plus faible que le photon absorbé, on appelle la différence de ces énergies le décalage de Stokes, qui trouve son explication dans la relaxation d'une partie de l'énergie de ce photon en phonons. Ce décalage vers les longueurs d'onde infrarouges (ou *redshift*) est observé dans la majorité des cas pour les quantum dots. L'effet inverse, le décalage anti-Stokes a également été observé (le photon émis est plus énergétique que le photon absorbé), l'absorption d'énergie dans l'infrarouge (sous forme de chaleur) étant la cause de cette augmentation d'énergie [8].

Le rendement de conversion des photons émis sur les photons absorbés s'appelle le rendement quantique. Celui-ci est intrinsèquement lié à la qualité des nanocristaux (défauts de surface, dispersion en taille, hétérogénéité de la stœchiométrie), mais également à l'état de surface (présence d'une coquille, nature des ligands, etc.).

### **1.2.3. Propriétés électriques des QDs**

Lorsque l'on parle des propriétés électriques des nanocristaux, on se réfère généralement à des assemblages de nanocristaux, c'est-à-dire un réseau de particules contenues dans une matrice, ordinairement les ligands. La constitution d'un réseau organisé dans lequel la distance entre les nanocristaux est maîtrisée apparaît alors indispensable. La distance inter-particules et sa nature conditionnent directement la qualité du transport électrique. Les nanocristaux qui présentent des propriétés bien définies lorsqu'ils sont isolés, subissent un couplage interarticulaire lors de leur assemblage en films. Ce couplage peut être formalisée par l'équation suivante exprimant le taux de transfert tunnel entre deux orbitales de deux nanocristaux voisins [9,10] .

$$C \propto \exp \left( -2\Delta x \left( \frac{2m_e^* \Delta E}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (1.1)$$

Ici,  $m_e^*$  est la masse effective de l'électron,  $\Delta E$  et  $\Delta x$  sont respectivement la hauteur de la barrière tunnel et la plus petite distance entre les nanocristaux.

Comme le montre cette expression, ce couplage augmente exponentiellement avec la distance entre les nanocristaux et la racine carrée de la hauteur de la barrière. Il apparaît clairement

qu'une ingénierie appliquée de ces paramètres permettrait l'augmentation importante du couplage. D'autres paramètres influent sur le transport comme l'énergie de charge et les défauts structuraux.

**1.2.4. Structure électronique dans les nanocristaux semiconducteurs**

Dans le cas des nanocristaux semiconductrices, la situation du diagramme énergétique est complètement différente de celle de l'état massif. La présence d'une structure à niveaux discrets au lieu d'une structure de bande a pour effet d'une part, d'espacer davantage les niveaux d'énergie, particulièrement le plus haut niveau de la bande de valence (BV) et le plus bas niveau de la bande de conduction (BC). D'autre part, l'énergie cinétique de la paire électron-trou (exciton) augmente. C'est pourquoi, l'appel à la théorie des orbitales moléculaires et l'emploi des termes HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) et LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), à la place de BV et BC, est nécessaire. La structure électronique pour le matériau massif et pour des nanocristaux de taille décroissante est montrée sur la Fig. 1.3.

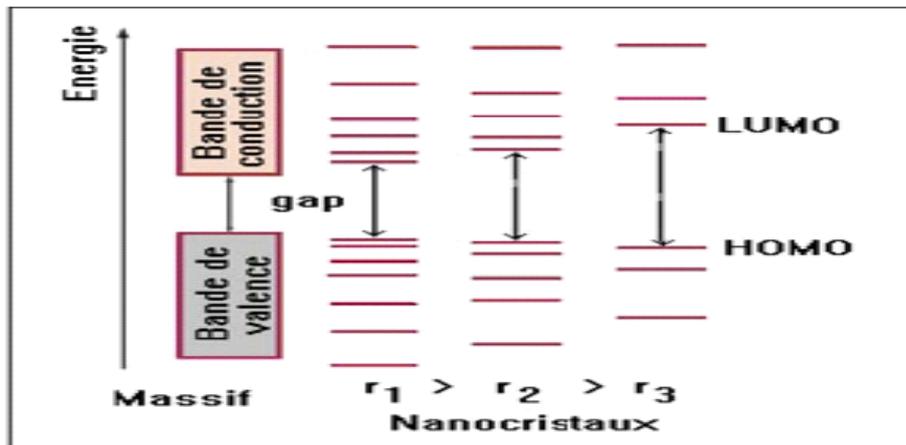


Fig. 1.3. Evolution de la structure électronique entre le solide massif et des nanocristaux de taille décroissante .

L'on note une discrétisation des niveaux électroniques au lieu du continuum d'états constituant les bandes d'énergie du fait de la diminution du nombre d'atomes dans le semiconducteur; ce qui se traduit par une augmentation de la bande interdite: les niveaux HOMO et LUMO (Fig 1.3) qui déterminent le gap du nanocristal s'écartent au fur et à mesure

que la taille des cristallites diminuent. C'est la raison pour laquelle on dit que les nanocristaux semiconducteurs sont à gap ajustable [11].

### 1.2.5. Le confinement quantique

Les propriétés optiques des nanoparticules semiconductrices sont étroitement liées à la structure électronique. Le confinement des paires électron-trou dans une particule de taille nanométrique change considérablement l'énergie correspondante aux transitions optiques. En effet, deux énergies doivent être prises en compte lors du calcul de la première transition excitonique : l'énergie du confinement et l'énergie coulombienne responsable de la formation de l'exciton. Ces deux énergies sont en relation directe avec le rayon de la particule, mais elles évoluent de manière différente. L'énergie du confinement varie comme l'inverse du carré du rayon du nanocristal ( $\propto 1/R^2$ ). Alors que l'énergie coulombienne varie comme l'inverse de la du rayon du nanocristal ( $\propto 1/R$ ). Elles déterminent le régime de confinement des porteurs de charges : faible, fort ou intermédiaire.

La réduction des dimensions d'un matériau semiconducteur massif à l'échelle nanométrique provoque des modifications significatives de ses propriétés optiques lorsque le rayon du nanocristal ( $R$ ) et le rayon de Bohr ( $a_B$ ) de l'exciton, considéré comme longueur de référence, deviennent comparables. Dans ce cas les effets excitoniques sont importants puisque la proximité du paire électron-trou est "forcée" par la géométrie du matériau. Les trois régimes de confinement possibles (Fig. 1.4) sont alors définis par comparaison du rayon  $R$  du nanocristal et du rayon de Bohr [12].

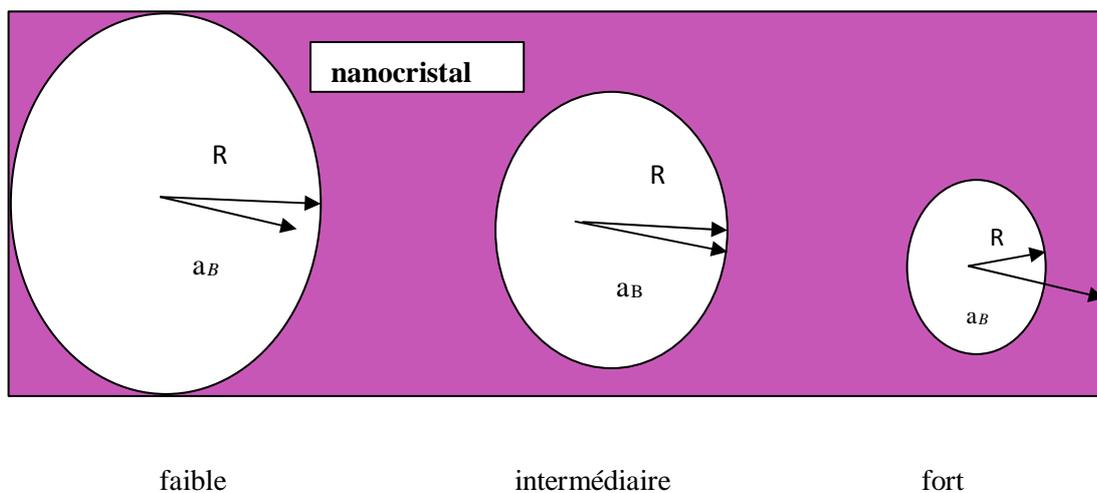


Fig. 1.4. Les trois régimes de confinement pour un nanocristal [13].

### 1.2.5.1. Les différents régimes de confinement

Pour faire une discussion simple des transitions optiques dans les boites quantiques, nous prenons le cas d'un semiconducteur à gap direct et nous adoptons le modèle à deux bandes simples, paraboliques et isotropes. Nous utilisons également l'approximation de la masse effective, qui suppose que les dimensions de la boite quantique dépassent largement la constante du réseau cristallin. Dans le cas idéal d'un potentiel de confinement infini, l'énergie cinétique des particules dans une nanosphère de rayon R prend des valeurs discrètes et inversement proportionnelles au carré du rayon R :

$$E_{e,nlm} = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\alpha_{n,l}}{R} \right)^2 \quad (1.2)$$

Pour les électrons, Pour les trous

$$E_{h,nlm} = \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left( \frac{\alpha_{n,l}}{R} \right)^2 \quad (1.3)$$

Il est usuel de noter les états propres (n, l) des électrons et des trous de la façon suivante : 1s, 1p,....., 2s, etc. A remarquer que, contrairement au cas d'un potentiel coulombien, l'état 1p est possible dans le cas d'un potentiel de confinement sphérique. La Fig. 1.5 montre l'énergie dans le cas du massif.

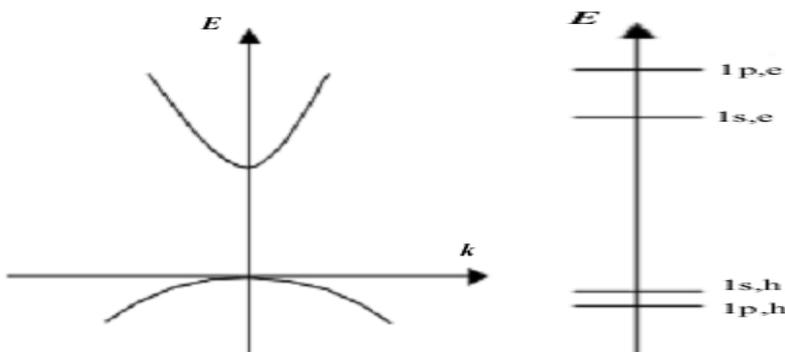


Fig 1.5. – Schémas représentatif du spectre d'énergie d'une particule. A gauche : dans le cas d'un semiconducteur massif. A droite : niveaux d'énergie d'une particule sphérique.

Des équations (1.2) et (1.3) nous observons que, en l'absence d'interaction coulombienne, l'état de plus basse énergie de la paire électron-trou a une énergie plus grande que le gap du semiconducteur massif d'une quantité :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\pi}{R}\right)^2 \quad (1.4)$$

Soit encore

$$\Delta E = E_{ex} \left(\frac{\pi \cdot a_B}{R}\right)^2 \quad (1.5)$$

Où  $E_{ex}$  et  $a_B$  désignent respectivement l'énergie de liaison et le rayon de Bohr de l'exciton dans le matériau massif. L'expression (1.5) montre que pour des petites boîtes quantiques ( $R \ll a_B$ ), le confinement géométrique introduit un déplacement énergétique très grand devant l'énergie de liaison de l'exciton. Si nous utilisons  $E_{ex}$  comme une mesure de l'importance de l'interaction coulombienne inter-bande, On peut en première approximation négliger l'interaction coulombienne dans les petites boîtes quantiques (système de particules indépendantes). Ainsi, l'énergie du photon nécessaire a la création d'une paire électron-trou est donnée par :

$$\hbar\omega = E_g + E_{ex} \left(\frac{\pi \cdot a_B}{R}\right)^2 \quad (1.6)$$

En fait, le spectre d'énergie des états électroniques dans une nanosphère est déterminé par l'effet de taille quantique (Quantum Size Effect : QSE) et l'interaction coulombienne. Ces deux formes d'énergie augmentent lorsque le rayon R diminue. L'importance relative de ces deux énergies dépend de la taille de la microcristallite et des paramètres physiques du matériau semiconducteur. Ainsi, nous pouvons distinguer trois régimes de confinement.

### 1.2.5.1. Régime de faible confinement

Le confinement est dit faible lorsque le rayon de la nanosphère R est largement supérieur au rayon de Bohr de l'exciton. Dans ce cas, seulement le mouvement du centre de masse de l'exciton est quantifié, pendant que les mouvements relatifs de l'électron et du trou sont à peine affectés. Le déplacement des pics excitoniques du matériau vers les hautes énergies est inversement proportionnel à la masse totale de l'exciton. Dans le formalisme de la fonction enveloppe, la position de la raie de plus faible énergie est donnée par l'équation :

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2MR^2}\right) \quad (1.7)$$

Où  $M = m_e^* + m_h^*$  est la masse totale de l'exciton.

Les énergies des transitions suivantes s'écrivent sous la forme

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2MR^2} \right) \quad (1.8)$$

Où  $n$  est un entier.

### 1.2.5.1. Régime de fort confinement

Il s'agit d'un régime de fort confinement lorsque le rayon de la nanosphère est très inférieur au rayon de Bohr de l'exciton. L'effet du confinement est alors prédominant et affecte les mouvements de l'électron et du trou. Ces derniers peuvent être décrits dans un premier temps à l'aide des fonctions d'onde séparées (particules indépendantes), puis l'interaction coulombienne entre ces particules est traitée comme une perturbation. La position de la raie de plus faible énergie dans le spectre d'absorption est donnée par :

$$\hbar\omega = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu R^2} - 1.8 \frac{e^2}{\epsilon R} \quad (1.9)$$

Pour les nanoparticules en régime de fort confinement, nous obtenons une forte augmentation du gap énergétique et un déplacement significatif des spectres optiques vers les hautes énergies.

### 1.2.5.1. Régime de confinement intermédiaire

Ce régime est obtenu lorsque le rayon de la nanosphère est plus petit que le rayon de Bohr de l'électron et plus grand que le rayon de Bohr du trou ( $a_h \ll R \ll a_e$ ). Cette condition est réalisée dans le cas usuel où la masse effective du trou est largement supérieure à celle de l'électron. Ainsi, l'effet du confinement géométrique sur l'électron d'une part et le trou d'autre part est considérablement différent. Le confinement est important pour le mouvement des électrons, particules les plus légères. Dans ce cas, le mouvement de l'électron est quantifié et l'interaction coulombienne non négligeable entre électrons et trous va influencer le mouvement des trous. Ceux-ci se déplacent essentiellement dans un nuage d'électrons fortement confinés qui produisent un potentiel coulombien moyen. L'exciton peut être traité comme un donneur situé au centre de la nanosphère. Cette situation a lieu pour beaucoup de

semiconducteurs à gap direct, comme les composés II-VI, où l'énergie de liaison de l'exciton  $E_{ex}$  n'est pas très importante et  $a_B$  peut être appréciable [14].

### 1.3. Matériau : l'antimoniure d'indium

#### 1.3.1. Présentation des matériaux III-V

Les matériaux III-V sont une association d'éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev. Le Tableau (1.1) montre un extrait de cette classification et nous donne une idée sur les composés binaires qui peuvent être réalisés à partir de ces deux colonnes, les chiffres représentent le nombre atomique de matériau:

Tableau 1.1. Extrait de la classification périodique des éléments.

III	IV	V
B <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	N <sub>7</sub>
Al <sub>13</sub>	Si <sub>14</sub>	P <sub>15</sub>
Ga <sub>31</sub>	Ge <sub>32</sub>	As <sub>33</sub>
In <sub>49</sub>	Sn <sub>50</sub>	Sb <sub>51</sub>
Tl <sub>81</sub>	Pb <sub>82</sub>	Bi <sub>83</sub>

Le tableau 1.2. présente quelque semiconducteurs binaires en donnant leur énergie de la bande interdite  $E_g$ , la masse effective des électrons du bas de la bande de conduction, la mobilité électronique à champ faible  $\mu$  et les paramètres cristallins a et c dans le cas du :

Tableau 1.2. Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K [15].

Composé III- V	$E_g$ (eV)	$m^*$ ( $m_0$ )	$\mu$ ( $cm^2/Vs$ )	a (Å)
InSb	0.17	0.01	80000	6.47
InAs	0.36	0.02	33000	6.05
GaSb	0.72	0.04	5000	6.09
InP	1.35	0.07	4600	5.86
GaAs	1.42	0.06	8500	5.65
AlSb	1.58	0.12	200	6.13
GaP	2.26	0.82	110	5.45

### 1.3.2. Propriétés de l'antimoniure d'indium InSb

Des mesures électriques et optiques permettent de lui attribuer une valeur  $E_g = 0.27$  eV au zéro absolu,  $E_g = 0.17$  eV à 300 K, et une dépendance avec la température (entre 100 et 300K) :

$$\frac{dE_g}{dT} = 2.9 \times 10^{-4} \text{ eV}/^\circ\text{C} \quad (1.10)$$

### 1.3.3. Structure de bande de l'antimoniure d'indium InSb

Par la résonance de cyclotron, on sait que la bande de conduction a la symétrie sphérique et que son minimum est au centre de la première zone de Brillouin. La symétrie sphérique avait déjà été démontrée par Pearson et Tanenbaum par l'étude de la magnétorésistance longitudinale, qu'ils ont trouvée négligeable. Il est à noter que la magnétorésistance longitudinale devient comparable à la magnétorésistance transversale dans le cas de la conduction par bande d'impureté et que cette anomalie est levée si le champ électrique appliqué est supérieur au champ de claquage. Par suite de la faible valeur de  $m_n$ , les électrons libres ne sont pas confinés au bas de la bande de conduction, mais peuvent en occuper une zone étendue, comme le montre l'effet Burstein ; ce fait permet d'étudier cette bande de façon détaillée. Analysant l'effet Burstein, Hrostowski et al. Suggérèrent que la bande de conduction n'était pas parabolique, c'est-à-dire que la relation entre l'énergie et le nombre d'ondes des électrons différait de la relation classique :

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \quad (1.11)$$

Cette idée a été reprise par Barrie et Edmond puis Kane a montré sa validité en faisant une théorie approchée de la structure de bande de l'InSb au voisinage de  $k = 0$ . A la formule (1.11), Kane substitue la formule :

$$V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2} [(\Delta E)^2 + 2 \hbar^2 k^2 \Delta E \frac{m_0 - m_n}{m_0 m_n}]^{1/2} - \Delta E \quad (1.12)$$

En ce qui concerne la bande de valence, un modèle plus complexe a été proposé à la suite des spéculations théoriques d'Herman et de divers faits expérimentaux : la résonance de cyclotron des anomalies de magnétorésistance, l'existence probable de transitions optiques indirectes, piézorésistance . On croit actuellement, que la bande de valence a plusieurs maxima près du

point  $k = 0$ , le long des huit directions (111), et Potter a estimé à 0,015 eV l'écart énergétique entre ces points et le point  $k = 0$ . Il y a deux sortes de trous, les plus nombreux auxquels Kane attribue la masse efficace  $m_p = 0,18 m_0$ , et un petit nombre de trous plus légers de masse 0,015  $m_0$ . Une telle structure de bande de l'InSb semble à l'heure actuelle ne contredire aucun résultat expérimental [16].

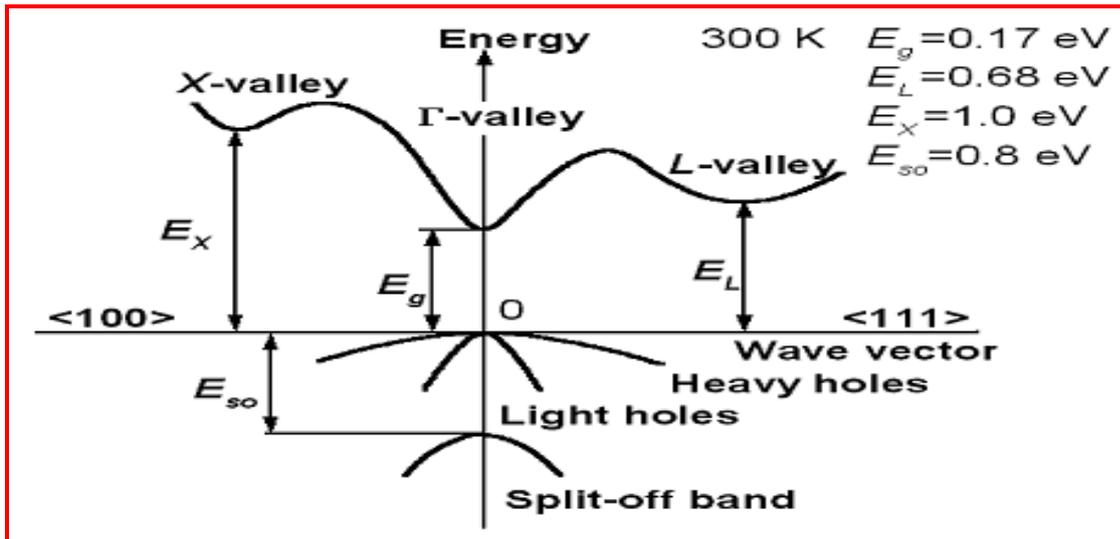


Fig. 1.6. Structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin.

La description de la structure des bandes d'énergie s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{k}$  c'est-à-dire l'espace réciproque. On considère les variations de l'énergie  $E$  en fonction de  $\vec{k}$  que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin [15].

### 1.3.4. Les paramètres physiques de l'InSb [17]

Tableau 1.3. Les paramètres physiques de l'InSb.

T	[ <sup>0</sup> K]	0	300
$E_g$	(eV)	0.235	0.174
a	[Å]	6.46896	6.4794
$E_g^L$	(eV)	0.630	0,569
$E_g^X$	(eV)	0.93	0.869
$\Delta S_0$	(eV)	0.81	0.749
$m_\Gamma^*$		0.0135	0.01
$m_{so}^*$		0.11	0.102
$m_{lh}^*$		0.015	0.013
$m_{hh}^*$		0.359	0.321
$m_x^*$		0.870	0.786
$m_L^*$		0. 250	0.234

T : La température.

$E_g$  : L'énergie de gap de l'InSb.

a : Le paramètre de maille

$\Delta SO$  : Splitting spin-orbite

$m_{so}^*$  : La masse effective des trous (bande spin -orbite)

$m_{lh}^*$  : La masse effective des trous légers

$m_{hh}^*$  : La masse effective des trous lourds

$m_\Gamma^*$ ,  $m_x^*$  et  $m_L^*$  : Sont les masses effectives de l'électrons aux points ( $\Gamma$ , x et L)

$E_g^L, E_g^X$  : Sont l'énergies de gap aux points L et X.

#### **1.4. Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons défini ce que c'est un quantum dot, expliqué le confinement quantique et ses répercussions sur les propriétés des QDs en fonction de leur taille. Les propriétés optiques et électriques ont ensuite été présentées. Une dernière partie a été consacrée aux diverses propriétés de l'InSb à l'état massif. Ces propriétés seront ensuite utilisées pour le calcul des propriétés optoélectroniques des QDs d'InSb. Elles serviront aussi de référence pour examiner comment vont dévier les propriétés des QDs d'InSb par rapport à celles des matériaux massifs lorsque la taille du quantum dot varie en dessous d'un certain seuil comme le révèle nos calculs menés moyennant la méthode empirique du pseudopotentiel qui sera détaillée dans le chapitre suivant.

## REFERENCES

- [1] J. Zribi, L'effet de la technique d'interdiffusion sur les propriétés optiques des boîtes quantiques InAs/GaAs, Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, Canada, 2008.
- [2] N. Berroual, Caractérisation structurale et optique des nanocristaux des semiconducteurs GaAs et TiO<sub>2</sub> inclus dans les monocristaux de KCl et de KBr, Mémoire de maîtrise, Université de Constantine, 2005.
- [3] K. Antoine, Synthèse de nouveaux types de nanocristaux semi-conducteurs pour application des cellules solaires, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2012.
- [4] P. Reiss et F. Chandezon, Nanocristaux semi-conducteurs fluorescents, Techniques de l'Ingénieur, 2004.
- [5] M.M. Catherine, S. Fanget, Matériaux et hétérostructures à base de nitrures d'éléments III en phase cubique et hexagonale pour l'optoelectronique, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2002.
- [6] P. Reiss, Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots, Springer (Vienna) 2008
- [7] S. Tamang, Synthèse et fonctionnalisation des nanocristaux émettant dans le proche infrarouge pour l'imagerie biologique, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2011.
- [8] F. Wang et X. Liu, Recent advances in the chemistry of lanthanide-doped up conversion nanocrystals., Chemical Society reviews, 2009.
- [9] A. Khosousi et A. Dhirani, Charge transport in nanoparticles assemblies., Chemical reviews, 2008.
- [10] R. Chandler, A. Houtepen, J. Nelson et D. Vanmaekelbergh, Electron transport in quantum dot solids, Monte Carlo simulations of the effects of shell filling, Coulomb repulsions, and site disorder, Physical reviews, 2007.
- [11] F. Chandezon et P. Reiss, Techniques de l'ingénieur, (2004).
- [12] F. Nasri, Élaboration et caractérisation de films minces de polystyrène dopés par des nanocristaux du semiconducteur CdTe, Thèse de doctorat, Université Mentouri, Constantine, 2012.
- [13] M. Benaïcha. Etude des matériaux semiconducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque, Mémoire de maîtrise, Université de Batna, 2007.

- [14] B. Dridi , Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules photovoltaïques à haut rendement, INSA Lyon , 2010.
- [15] A. Ouchdi, Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires, Application au matériau  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ , Mmoire de majister, Université de Tlemcen, 2011.
- [16] M. Rodot , Propriétés\_et\_es du semi-conducteur InSb, J. Phys. Radium,.1958
- [17] K. Noureddine, Etude des proprietes opto-électroniques des nanostructures lasers de Nitrures d'Antimoniures  $Al_zGa_yIn_{1-y-z}N_xSb_{1-x}/GaN_xSb_{1-x}$ , Mmoire de majister, Université d'Oran,2010.

## Chapitre 2

# METHODE DES PSEUDOPOTENTIELS

### 2.1. Introduction

Les pseudopotentiels sont un élément essentiel dans les calculs en physique du solide, de part la grande simplification qu'ils apportent et leur transférabilité .

Les pseudopotentiels apportent un modèle simple des interactions entre l'ion formé par le noyau et les électrons de cœur, inertes chimiquement, et les électrons de valence, qui eux participent activement aux réactions chimiques. Répondant à des règles pendant leur génération, il n'en reste pas moins qu'il n'y a pas de méthode toute faite pour trouver un pseudopotentiel [1].

### 2.2. Historique

La méthode des pseudopotentiels fût introduite par Fermi en 1934 pour étudier les états atomiques des couches minces. Dans l'année suivante, Hellman proposa que cette méthode puisse être utilisée pour obtenir les niveaux énergétiques des atomes des métaux alcalins. Cependant, c'est à partir de 1950 que son utilisation fût généralisée et ceci grâce à Phillips et Kleinman en 1959 qui se sont basés sur la méthode des ondes planes orthogonalisées (O.P.W ; Orthogonalized Plane Waves). L'intérêt de cette méthode est que seuls les électrons de valence seront pris en compte. Les électrons du cœur seront supposés "gelés" et seuls les électrons de valence se déplacent dans un potentiel électronique. Les coefficients utilisés dans la méthode O.P.W. pour assurer l'orthogonalité de l'onde plane aux états du cœur, peuvent être utilisés pour construire un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car son effet est de repousser les électrons de valence loin du cœur. Et on obtient

par effet d'annulation un potentiel faible ou "pseudopotentiel" Ce dernier peut être traité en utilisant la méthode des électrons presque libres (N.F.E.M) ou toute autre méthode standard pour résoudre l'équation de Schrödinger [2].

### 2.3. Le concept du pseudopotentiel

Dans un atome ou dans un solide le potentiel agissant sur un électron de valence est très attractif à l'intérieur du cœur. Dans cette région la fonction d'onde oscille rapidement, ce qui se traduit par une énergie cinétique élevée, et où l'énergie potentielle est très faible ; une manifestation du principe de Pauli qui exige que la fonction d'onde soit orthogonale aux orbitales des électrons du cœur [3].

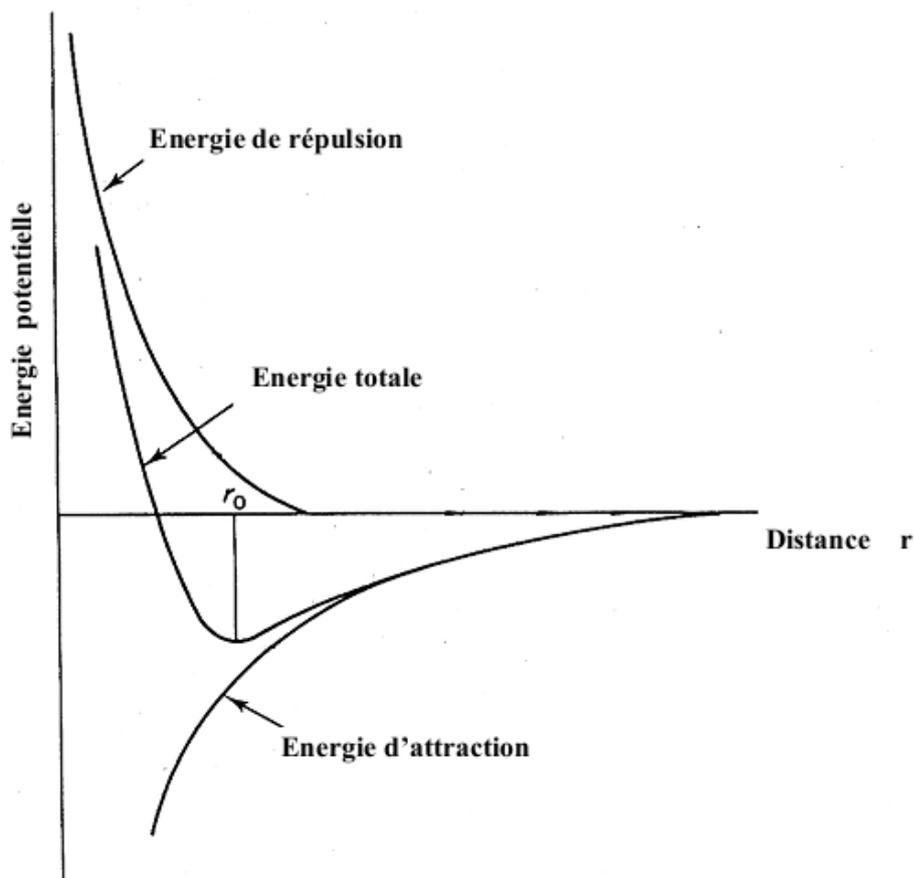


Fig. 2.1. Potentiel d'interaction de deux atomes en fonction de la distance interatomique.

Phillips et Kleinman [4,5] remarquèrent que l'effet de cette orthogonalité se traduit par un terme répulsif qui tend à annuler le fort potentiel attractif  $U(r)$ . La description de la théorie de Phillips et Kleinman [4, 5] est la suivante :

La fonction d'onde réelle  $\psi$  est composée d'une partie lisse qui peut être développée en

ondes planes et une partie qui peut être développée en une somme des états du cœur  $\Phi_c$  c'est-à-dire :

$$\psi = \Phi + \sum_c \alpha_c \Phi_c \quad (2.1)$$

Reportant cette expression dans l'équation de Schrödinger :

$$H \psi = E \psi \quad (2.2)$$

Nous aboutissons à la pseudo équation d'onde, qui aura comme caractéristiques :

- La faiblesse du potentiel, c'est le pseudopotentiel.
- L'absence des oscillations à l'intérieur du cœur .

Des transformations mathématiques de l'équation (2.1), nous amènent à écrire :

$$H \Phi + \sum_c \Phi_c (E - E_c) \langle \Phi_c | \Phi \rangle = E \Phi \quad (2.3)$$

Dans laquelle la sommation s'étend sur tous les états du cœur saturés, elle représente un opérateur non local agissant sur la partie  $\Phi$  de la fonction d'onde. Cet opérateur est comme un potentiel purement répulsif  $V_R$  puisque les termes d'orthogonalisation ont l'effet de maintenir les électrons de valence à l'exercice du cœur (principe de Pauli).

$$V_R = E \sum_c (E - E_c) \Phi_c \langle \Phi_c | \Phi \rangle \quad (2.4)$$

Par suite l'équation (2.3) devient :

$$\left( \frac{p^2}{2m} + V_{ps} \right) \Phi = E \Phi \quad (2.5)$$

Où :  $V_{ps} = V_R + V_C \quad (2.6)$

Avec :

$V_C$  Le potentiel ionique du cœur, il est puissant et négatif, tandis que  $V_R$  est un potentiel répulsif positif, leur sommation réduit ainsi la valeur de  $V_{ps}$  . La petitesse de  $V_{ps}$  (pseudopotentiel) rend la méthode extrêmement avantageuse (réduction des complications de calcul).

Généralement la relation (2.5) s'écrit comme suit :

$$H_{ps} \Phi = E \Phi \quad (2.7)$$

La plus importante amélioration qui a été faite dans cette dernière décennie, consiste à utiliser les pseudopotentiels ab initio [6].

#### 2.4. Méthode des pseudopotentiels

La méthode du pseudopotentiel est basée principalement sur des données expérimentales telles que l'analyse des paramètres cristallins aux rayons X, la réflexion et l'absorption des cristaux [7]. Il existe deux sortes de pseudopotentiel : le pseudopotentiel local (EPM local) et le pseudopotentiel non local (EPM non local) dont le développement sera donné ci-après.

##### 2.4.1. La méthode du pseudo-potentiel local

La méthode du pseudopotentiel local [8] est basée sur deux types de données : les pseudopotentiels atomiques et les facteurs de structures qui donnent aux potentiels atomiques les positions appropriées dans le cristal.

L'équation de Schrödinger pour une seule onde est donnée par :

$$(T+V_{\text{Pseudo}}) \psi_{nk}(r) = E_{nk} \psi_{nk}(r) \quad (2.8)$$

Une seule onde plane on peut se mettre sous la forme :

$$\Psi(r) = C e^{i(k+G)r} \quad (2.9)$$

Où  $k$  est le vecteur d'onde de la zone de Brillouin et  $G$  est le vecteur de translation dans l'autre zone de Brillouin.

La fonction d'onde  $\psi_{nk}(r)$  peut être développée en série de Fourier :

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{V} \sum_G (C_{nk}(G) e^{i(K+G)r}) \quad (2.10)$$

Alors :

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{V} \sum_G C_{nk}(G) \Phi_G \quad (2.11)$$

Avec

$$\Phi_G = \frac{1}{V} e^{i(K+G)r} \quad (2.12)$$

La fonction d'onde  $\psi_n(k)$  satisfait à l'équation de Schrödinger suivante :

$$H\psi_{nk}(r) = E_{nk} \psi_{nk}(r) \quad (2.13)$$

C'est-à-dire :

$$\langle \psi_{nk}(r) | T | \psi_{nk}(r) \rangle + \langle \psi_{nk}(r) | V_{PS} | \psi_{nk}(r) \rangle - E \langle \psi_{nk}(r) | \psi_{nk}(r) \rangle = 0 \quad (2.14)$$

Si on remplace la fonction d'onde  $\psi_{nk}(r)$  par son expression donnée dans l'équation (2.13), alors on aura

$$\sum_G C(G) [\langle \Phi_G | T | \Phi_{G'} \rangle + \langle \Phi_G | V_{PS} | \Phi_{G'} \rangle - E \langle \Phi_G | \Phi_{G'} \rangle] = 0 \quad (2.15)$$

Avec :  $\langle \Phi_G | T | \Phi_{G'} \rangle = \frac{1}{V} \int \Phi_G^* T \Phi_{G'} dr^3 \quad (2.16)$

Alors:  $\langle \Phi_G | T | \Phi_{G'} \rangle = \frac{1}{V} \int e^{i(K+G)r} \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \right] e^{i(K+G')r} dr^3 \quad (2.17)$

D'où:

$$\langle \Phi_G | T | \Phi_{G'} \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} (K+G)^2 \delta_{GG'} \quad (2.18)$$

En utilisant la même démarche, on trouve :

$$E \langle \Phi_G | \Phi_{G'} \rangle = E \delta_{GG'} \quad (2.19)$$

Si on pose:

$$E \langle \Phi_G | V^L(r) | \Phi_{G'} \rangle = V(G-G') \quad (2.20)$$

$V(G-G')$  représente le potentiel cristallin.

Par ailleurs, on connaît la relation entre les potentiels cristallin et atomique :

$$V^1(r) = \sum_n \sum_i V_i(r - R_n - T_i) \quad (2.21)$$

Où:

$n$  est le nombre de cellules primitives,

$i$  : est le nombre d'atomes par cellule unité,

$R_n$  est un vecteur du réseau de Bravais,

$T$  est le vecteur de translation.

Si on pose  $G-G' = q$ , alors

$$\langle \Phi_G | V(r) | \Phi_{G'} \rangle = \frac{1}{V} \int \sum_n \sum_i V(r - R_n - T_i) e^{-iqr} dr^3 \quad (2.22)$$

$$= \frac{1}{V} \int \sum_n e^{-iqR_n} \sum_i e^{-iqT_i} V_i(r') e^{-iqr'} dr'^3 \quad (2.23)$$

$$\langle \Phi_G | V'(r) | \Phi_{G'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_n e^{-iqR_n} \frac{1}{2} \sum_i e^{-iqT_i} \frac{1}{V_n} \mathcal{N}_i(r') e^{-iqr'} dr'^3 \quad (2.24)$$

$$\langle \Phi_G | V(r) | \Phi_{G'} \rangle = \frac{1}{2} [e^{-iqT_1} V_1(q) + e^{iqT_2} V_2(q)] \quad (2.25)$$

$T_1 = -T_2$  où  $T_1$  et  $T_2$  sont les positions des deux atomes présents dans la maille primitive.

Dans le cas de la structure zinc-blende,  $T_1 = -T_2 = (a/8)(1,1,1)$ .

L'on posera alors :

$$V^S(G) = \frac{1}{2} [V_1(G) + V_2(G)] \quad (2.26)$$

$$V^A(G) = \frac{1}{2} [V_1(G) - V_2(G)] \quad (2.27)$$

Par conséquent, on obtient :

$$V_1(G) = V^S(G) + V^A(G) \quad (2.28)$$

$$V_2(G) = V^S(G) - V^A(G) \quad (2.29)$$

$V^S(G)$  et  $V^A(G)$  étant, respectivement, les potentiels symétriques et antisymétriques. Donc, on aura :

$$V(G) = \frac{1}{2} [(V^S + V^A)e^{iGT} + (V^S - V^A)e^{-iGT}] \quad (2.30)$$

$$V(G) = V^s \cos(G.T) + iV^A \sin(G.T) \quad (2.31)$$

Avec :

$$\cos(G.T) = S^s(G)$$

$$\sin(G.T) = S^A(G)$$

Puisque le réseau cristallin est périodique, la connaissance du pseudopotentiel est nécessaire en certains points spécifiques dans le réseau réciproque [9] (voir figure 2.2 et 2.3).

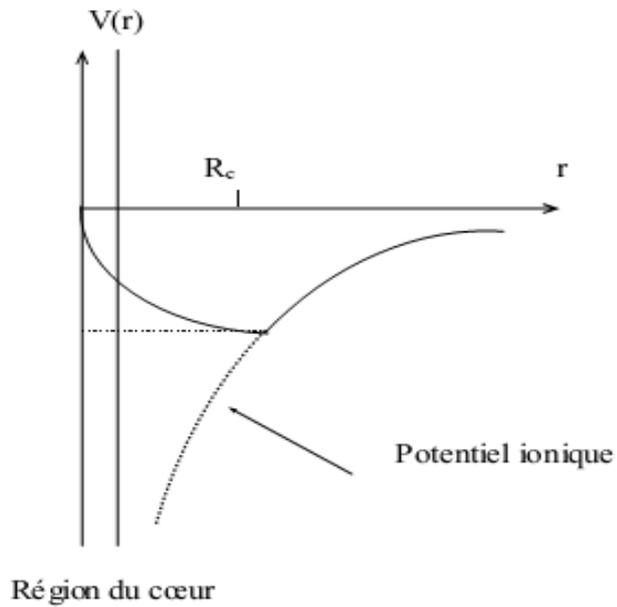


Fig 2.2. Représentation du pseudo-potentiel dans l'espace réel.

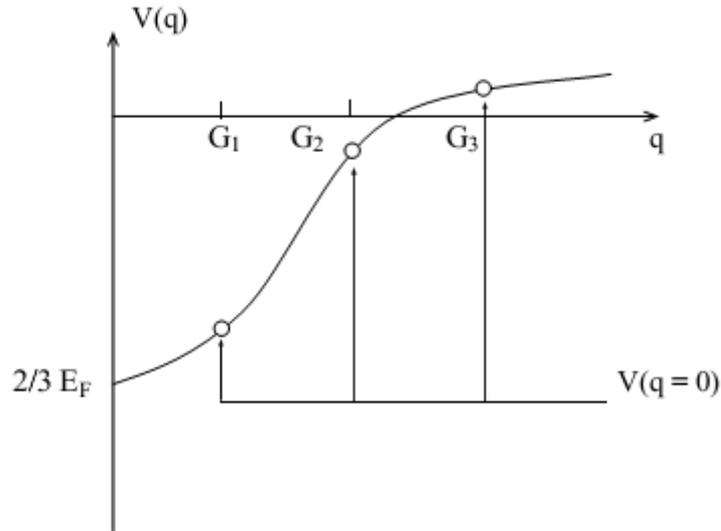


Fig 2.3. Représentation du pseudo-potential dans l'espace réciproque.

L'équation séculaire sera donnée par :

$$\left\| \frac{\hbar^2}{2m} (K + G)^2 \delta_{GG'} + V^S (G - G') \cos(G - G')T + iV^A \sin(G - G')T - E_K \delta_{GG'} \right\| = 0 \quad (2.32)$$

Cette équation possède une solution si et seulement si le déterminant est nul.

$$\text{Det} \| H_{GG'} - E_K \delta_{GG'} \| = 0 \quad (2.33)$$

$$H_G = \frac{\hbar^2}{2m} (K + G)^2 \delta_{GG'} + V(G - G') \quad (2.34)$$

Il est clair que les facteurs de forme antisymétriques  $V_A$  s'annulent dans la structure diamant. Le facteur  $\text{Cos}(G.T)$  est le facteur de structure du diamant défini dans l'équation (2.31). Dans la structure diamant et zinc-blende, les vecteurs du réseau réciproque, sont dans l'ordre croissant du module (en unité  $2\pi/a$ ) :

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

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

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

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

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

On peut négliger les facteurs de forme avec  $G^2 > 11 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$  car  $V_G$  diminue en  $1/G^2$  pour les larges  $G$ .

Le facteur de forme  $V_0$  correspondant à  $G_0$  est constant, et par un choix convenable de l'origine, peut être pris comme nul. Les facteurs de forme pour les vecteurs équivalents du réseau réciproque  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ , avec le module  $3\left(\frac{2\pi}{a}\right)$  sont égaux par symétrie et seront notés par  $V_3$ . Le facteur de structure correspondant à  $G_4$  est nul car  $\cos(G.T) = 0$ , pour  $G = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(0,0,2)$ . Il y a seulement trois importants facteurs de forme pour la structure diamant [10]:  $V_S(3)$ ,  $V_S(8)$ ,  $V_S(11)$ . Dans le cas de la structure zinc-blende,  $V_A(8)$  est nul car  $\sin(G.T) = 0$ , donc il y a seulement six facteurs de forme :  $V_S(3)$ ,  $V_S(8)$ ,  $V_S(11)$  et  $V_A(3)$ ,  $V_A(4)$ ,  $V_A(11)$ . Notons que le signe du facteur de forme antisymétrique dépend du choix du cation ou de l'anion. Notons aussi que le module de  $V_S(3)$  est le plus important.

La procédure de calcul de la méthode E.P.M est montrée dans le diagramme de la Fig 2.4.

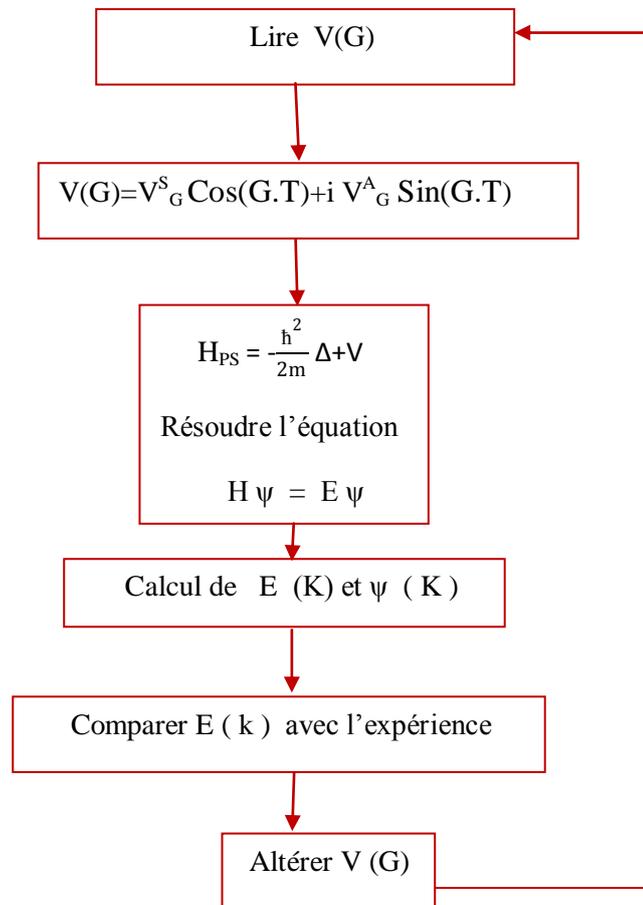


Fig .2.4 . Diagramme bloc de la méthode E. P.M local

### 2.4.2. Les Modèles du pseudopotentiel non local :

Le but de l'approche non-locale est de combler les insuffisances de l'approche précédente. Des expériences utilisant les rayons X ont prouvé que la technique du pseudopotentiel local ne donne pas de bons résultats concernant la densité de charge de quelques composés [11,12]. Cette approche a fait son apparition à partir des années 1976 [13,14] pour apporter une correction de la dépendance énergétique du potentiel répulsif.

Chaque matériau possède sa propre correction qui dépend de la configuration des électrons par rapport au cœur ionique. Cette correction non locale est introduite pour évaluer l'influence du cœur ionique sur les électrons. Elle est déterminée pour chaque moment angulaire ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) par la relation :

$$V_{NL}(r) = \sum_l A_l(E) f_l(r) P_l \quad (2.35)$$

où:

$A_l(E)$  représente la constante de la dépendance du pseudopotentiel en énergie des états du cœur,

$P_l$  est l'opérateur de projection de la  $l^{\text{ème}}$  composante du moment angulaire,

$f_l(r)$  est une fonction qui représente l'effet de l'état du cœur et qui a plusieurs formes dont celle d'Ashcroft, de Heine-Abarenkov et la forme gaussienne.

Dans cette approche non-locale trois modèles simulant la fonction  $f_l(r)$  ont été extrêmement utilisés.

#### a. Modèle d'Aschcroft [15,16]

Dans ce modèle :  $f_l(r) = 0$  (2.36)

Voir (fig 2.5.a).

L'indice zéro se réfère au paramètre non masqué. Cette dernière équation montre que le potentiel répulsif dû à l'orthogonalisation de la fonction d'ondes des électrons de conduc-

tion sur les états du cœur, annule très exactement le potentiel coulombien à l'intérieur du cœur ionique.

**b. Modèle de Heine-Abarenkov [3,17]**

Plutôt que d'utiliser le potentiel exact dû à l'ion, Heine et Abarenkov ont proposé une méthode pour obtenir un modèle de pseudopotentiel pour les métaux. L'information sur l'ion est déduite des niveaux d'énergie atomiques tirés des données spectroscopiques plutôt que d'un calcul élaboré de mécanique quantique. La fonction  $f_l(r)$  est définie comme suit :

$$f_l(r) = \theta(R_l - r)$$

$$\text{Avec : } \theta(R_l - r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r > R_l \\ 1 & \text{pour } r < R_l \end{cases} \quad (2.37)$$

Le potentiel ionique est approché par un pseudopotentiel non local déduit de l'expérience. Dans ce modèle le puits est de forme carrée (voir fig 2 .5.b).

Il faut connaître le niveau de Fermi en valeur absolue pour déterminer le pseudopotentiel aux énergies qui nous intéressent. Le pseudopotentiel s'écrit sous la forme suivante :

$$V_l(r) = A_l \theta(R_l - r) \quad (2.38)$$

Où  $R_l$  est le rayon effectif du cœur ionique.

Cette méthode n'exige qu'un minimum de calcul et donne de bons résultats pour les métaux normaux ; elle a enfin l'avantage de tenir compte automatiquement des corrélations interatomiques.

**c. Modèle de Gauss [18, 3, 19,20]**

C'est le modèle le plus réaliste, il s'approche de l'expérience c'est-à-dire que ses résultats convergent vers ceux trouvés expérimentalement. Dans ce modèle,

$$f_l(r) = \exp(-r/R_l)^2 \quad (2.39)$$

La forme du pseudopotentiel (voir fig 2.5.c) est :

$$V_{NI}=A_1 \exp (- r/R_1)^2 \quad (2.40)$$

Avec  $A_1$ : la profondeur du puits.  
 $R_1$ : le rayon du cœur ionique.

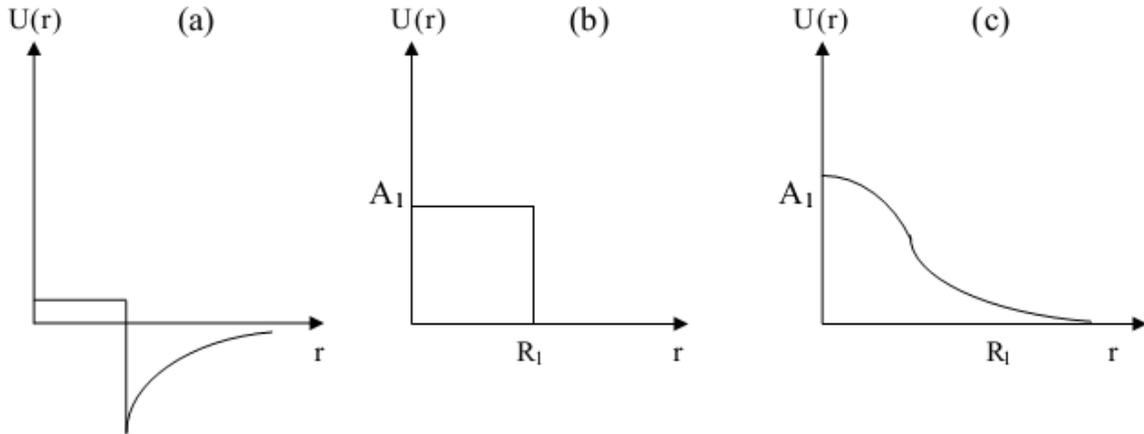


Fig 2.5. Les modèles du pseudo-potential non local.

## 2.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'essentiel de l'approche théorique adoptée pour la détermination des états électroniques dans les matériaux sous investigation, à savoir la méthode empirique des pseudopotentiels. Nous rappelons que toutes les propriétés étudiées dans ce travail découlent essentiellement de ces états électroniques. Le comportement de ces propriétés ainsi que leur dépendance de la taille de nos nanocristaux seront présentés dans le chapitre qui suit.

## REFERENCES

- [1] B. Bertrand , Génération de pseudopotentiel atomique pour les matériaux semi-conducteur, Rapport de stage , Université Claude Bernard Lyon1, 2009.
- [2] M.L.Cohen and J.R.Chelikosky, In electronic structure and optical proprieties of semiconducteurs , Springer ,New –York, 1988.
- [3] M. L. Cohen and V. Heine, Solid state physics 24, Eds, H. Enrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, Academic press, New-York , 1970.
- [4] J. C. Phillips and L. Kleinman,, Phys. Rev. 116, 287 , 1959.
- [5] J. C. Phillips. Phys. Rev. 112, 685 ,1958 , F. Bassano and V. Celli, J. Phys. Chem. Solid 20, 64 ,1961, M. L. Cohen and V. Heine, Phys. Rev. 122, 1821 ,1961, B. I. Austin, V. Heine and L. I. Shen, Phys. Rev. 127, 276 , 1962.
- [6] D. Brust and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett.9, 389 , 1962.
- [7] D. Brust, Phys. Rev. 134, A1337 , 1963, D. Brust and J. C. Phillips, Phys. Rev. Lett. 9, 94 , 1962.
- [8] M. Cardona, Phys. Rev. B 35, 6182, 1987.
- [9] M. L. Cohen and T. Bergestresser Phys. Rev. 141, 789 ,1966 , M. L. Cohen and T. Bergestresser Phys. Rev. 164, 1069, 1976.
- [10] R. Chelikowsky, M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 32, 674 ,1974, W. A. Harrison, Phys. Rev. B14, 702 , 1976.
- [11] J. C. Phillips and K.C. Pandey, Phys. Rev. Lett. 30, 787, 1973.
- [12] J. C. Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. 116, 287 , 1956.
- [13] P. K. Lam and M. L. Cohen, Phys. Rev. B25, 6139 ,1982.
- [14] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 31, 1582, 1973, J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 32, 674, 1974; J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B10, 5095 ,1974.
- [15] W. A. Harrison, Pseudopotentiels in theory of metals , Benjamin, New york ,1966.
- [16] N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 23, 48, 1966.

- [17] I. V. Abarenkov and V. Heine, Phil. Mag. 13, 529, 1965.
- [18] M. Gell and al. Phys. Rev. B35, 1196 , 1987.
- [19] H. Nara and T. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. 41, 1429, 1976.
- [20] H. Nara and A. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. 21, 1852, 1966.

# Chapitre 3

## RESULTATS & DISCUSSIONS

### 3.1. Introduction

Dans ce chapitre, l'effet du confinement optique sur les propriétés électroniques et optiques des quantum dots d'antimoniure d'indium (InSb) va être présenté. Cet effet a été étudié théoriquement dans le cadre de la méthode empirique des pseudopotentiels (EPM) [1]. Une telle étude constitue l'un des concepts les plus prometteurs pouvant conduire à une plus profonde compréhension de l'état solide à l'échelle nanométrique. En outre, tout un éventail d'applications technologiques allant du guidage des missiles (lasers spécifiques) aux cellules solaires de troisième génération est prévisible sur ce registre.

### 3.2. Propriétés électroniques

#### 3.2.1. Gaps d'énergie

La Fig. 3.1 représente le gap direct  $E_{\Gamma-\Gamma}$  (correspondant à la transition entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin), et les gaps indirects  $E_{\Gamma-X}$  (entre le maximum de la bande de valence et l'énergie de la bande de conduction la plus basse au point de haute symétrie X) et  $E_{\Gamma-L}$  (entre le maximum de la bande de valence et l'énergie de la bande de conduction la plus basse au point de haute symétrie L) des quantum dot d'InSb comme fonctions de la taille de ces quantum dots. Il est clair que les trois gaps étudiés  $E_{\Gamma-\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma-X}$  et  $E_{\Gamma-L}$  diminuent rapidement et de façon monotone avec l'augmentation du diamètre  $d$  du quantum dot jusqu'à une valeur  $d = 6\text{nm}$ . Au-delà de cette valeur ces gaps restent pratiquement constants. Ce comportement est un effet direct du confinement quantique. L'on note aussi que quelque soit la taille des nanocristaux d'InSb dans la gamme étudiée (1 à 10 nm), notre

matériau demeure à gap direct. Un comportement qualitativement similaire a été rapporté pour des nanocristaux de GaN [2], GaAs [3] et d'AlN [4].

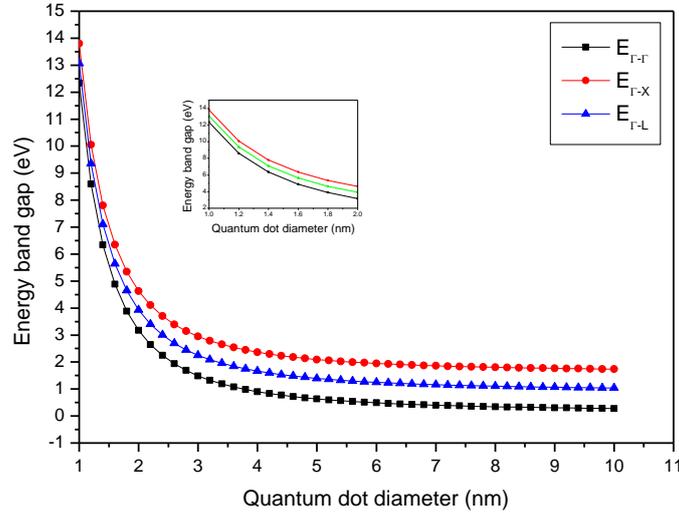


Fig. 3.1. Variation des gaps direct  $E_{\Gamma-\Gamma}$  et indirects  $E_{\Gamma-X}$  et  $E_{\Gamma-L}$  en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.2.2. Largeur de la bande de valence

La largeur de la bande de valence des quantum dots d'InSb a été calculée pour différentes tailles et est représentée sur la Fig. 3.2. On remarque que cette largeur de la bande de valence augmente d'abord très rapidement puis elle se stabilise lorsque la taille du nanocristal s'approche de 6nm. L'on peut conclure alors que le confinement quantique a pour effet de réduire la largeur de la bande de valence. Cette réduction de largeur de la bande de valence suggère une diminution de l'ionicité en passant de l'InSb massif à des quantum dots d'InSb. Un comportement qualitativement identique a été rapporté par Gueddim et al. [2].

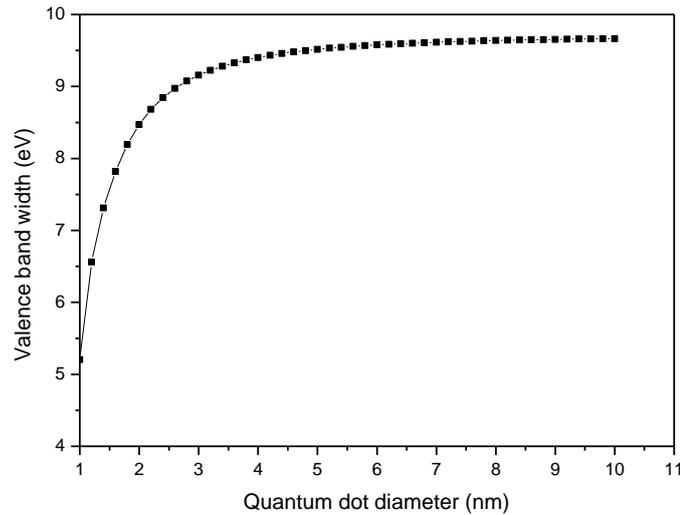


Fig. 3.2. Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.2.3. Masses effectives des porteurs

Les masses effectives des électrons et des trous lourds sont des paramètres déterminant la mobilité des porteurs. De cette manière, elles peuvent fournir d'importantes informations sur les propriétés de transport dans les semiconducteurs. Ces quantités sont habituellement déterminées théoriquement à partir de la structure des bandes d'énergie du matériau.

Théoriquement la masse effective est généralement un tenseur de rang 2 et dépend donc de la direction. Cependant, si l'on considère le cas idéal et simple où l'on se met dans l'approximation des bandes paraboliques, on peut déterminer les masses effectives au voisinage du maximum de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction, comme étant des scalaires, à partir de la courbure des bandes selon l'expression suivante [5] :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi}{h^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (3.1)$$

$k$  étant le vecteur d'onde et  $h$  la constante de Planck.

Les masses effectives des électrons et des trous lourds de l'InSb nanostructuré sont représentées sur les Figs. 3.3 et 3.4. Ces quantités diminuent très rapidement lorsque la taille du nanocristal augmente de 1 à  $\approx 6$  nm puis demeurent pratiquement inchangées au-delà de 6 nm. Un comportement similaire a été rapporté pour des quantum dots de GaN [2] et d'AlN [4].

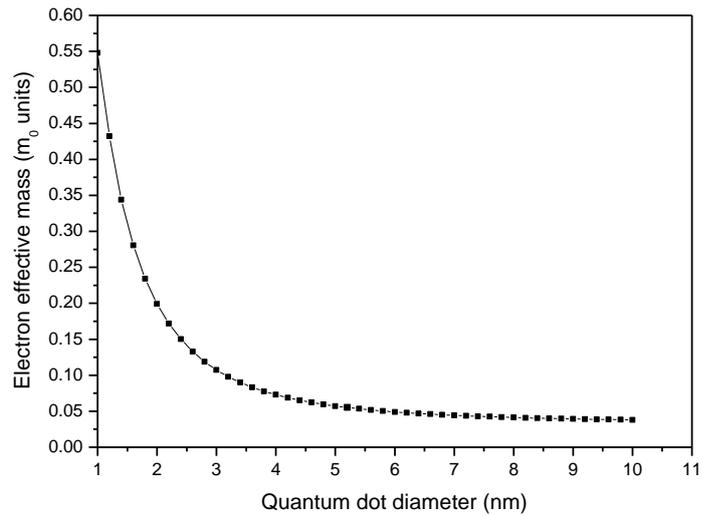


Fig.3.3. Variation de la masse effective des électrons (en unité de  $m_0$ ) en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

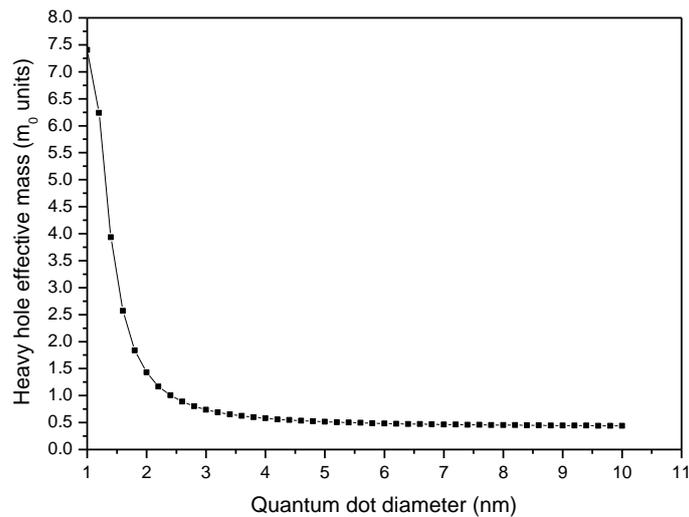


Fig. 3.4. Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de  $m_0$ ) en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.2.4. Facteur d'ionicté

Le caractère des liaisons covalent, ionique, ou covalo-ionique entre les atomes d'un cristal est généralement caractérisé par le facteur d'ionicté (ou plus simplement ionicté) du cristal considéré [6,7].

L'ionicté d'un semiconducteur est donnée par [8] :

$$f_i = 1 - (1 - \alpha_p^2)^{3/2} \quad (3.2)$$

où  $\alpha_p$  représente la polarité du matériau.

Le facteur d'ionicté des quantum dots d'InSb calculé en fonction du diamètre de ces quantum dots variant de 1 à 10 nm est représenté sur la Fig. 3.5. On note une augmentation non linéaire de ce paramètre avec l'augmentation de la taille du nanocristal. Ainsi, le caractère ionique de notre matériau augmente à mesure que la taille du nanocristal augmente. L'on note aussi la très faible ionicté pour les boîtes quantiques de diamètre 1 nm pour laquelle on est véritablement en présence d'un atome *artificiel*.

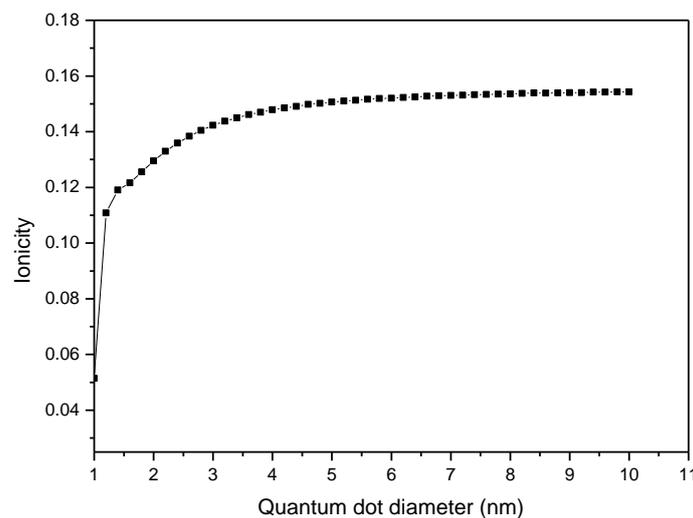


Fig. 3.5. Variation de l'ionicté en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.3. Propriétés optiques

#### 3.3.1. Indice de réfraction

La valeur de l'indice de réfraction est une importante information lors de la conception des composants optoélectroniques à hétérostructures ainsi que d'autres dispositifs à guidage d'onde. C'est pourquoi nous avons déterminé cet indice de réfraction dans le cas des quantum dots d'InSb de taille variable dans la gamme 1-10 nm.

L'indice de réfraction de notre matériau a été calculé en utilisant l'expression empirique de Hervé et Vandamme [9] :

$$n = \sqrt{1 + \left( \frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (3.3)$$

où  $A = 13.6$  eV et  $B = 3.4$  eV.

Nous avons adopté ce modèle car il est connu pour donner des résultats en meilleur accord avec l'expérience pour les semiconducteurs III-V que d'autres modèles [10,11].

La Fig. 3.6 représente la variation de l'indice de réfraction en fonction de la taille des quantum dots d'InSb. On remarque que cet indice de réfraction augmente d'abord très rapidement entre 1 et 6 nm puis se stabilise pratiquement entre 6 et 10 nm. On peut donc affirmer que toute augmentation de la taille du nanocristal entre 1 et 6 nm réduit considérablement le gap d'énergie et augmente sensiblement l'indice de réfraction.

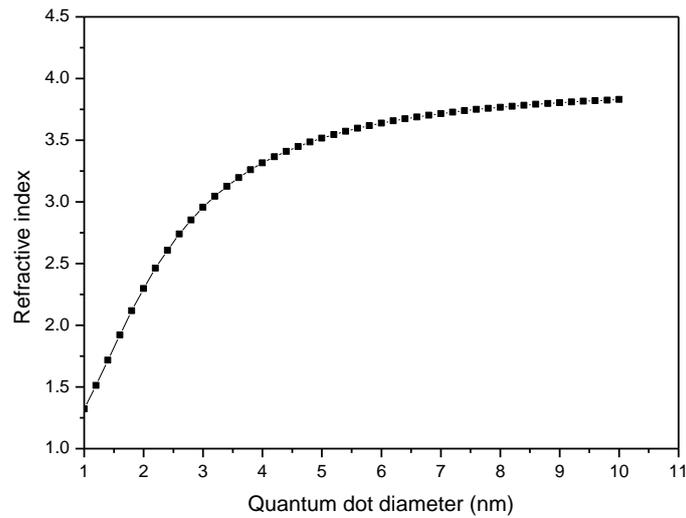


Fig. 3.6. Variation de l'indice de réfraction en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.3.2. Constantes diélectriques

La constante diélectrique constitue une information essentielle lors de la conception des condensateurs ainsi que dans d'autres conditions où un matériau devrait introduire une capacité dans un circuit. Dans les matériaux polaires les déplacements atomiques créent des dipôles. Le champ électrique macroscopique qui en résulte est déterminé par une contribution non analytique à la matrice dynamique [2,12,13]. Il s'agit du tenseur des charges effectives de Born ainsi que du tenseur de la constante diélectrique de haute fréquence. Au vu de la symétrie cubique, ces tenseurs se réduisent à des scalaires [2].

La constante diélectrique de haute fréquence  $\varepsilon_\infty$  est déterminée comme le carré de l'indice de réfraction [14] :

$$\varepsilon_\infty = n^2 \quad (3.4)$$

Quant à la constante diélectrique statique  $\varepsilon_0$ , elle est reliée à celle de haute fréquence à travers le modèle de Harrison [14] :

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_\infty - 1} = 1 + \nu \quad (3.5)$$

où

$$\nu = \frac{\alpha_p^2(1+2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (3.6)$$

$\alpha_p$  et  $\alpha_c$  étant respectivement la polarité et la covalencité du matériau reliées par [14] :

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (3.7)$$

La Fig. 3.7 représente les variations des constantes diélectriques statique et de haute fréquence en fonction de la taille des nanocristaux d'InSb allant de 1 à 10 nm. Les deux constantes diélectriques augmentent rapidement entre 1 et 6 nm puis tendent à devenir pratiquement constantes et valent respectivement 17.17 et 14.67 en accord avec les valeurs rapportés pour l'InSb massif (17.2 et 15.3). Etant donné que les constantes diélectriques du matériau nanocristallin sont plus faibles que leurs homologues du matériau massif, l'on peut affirmer la diminution de l'aptitude du nanocristal à emmagasiner l'énergie électromagnétique [2]. Ce résultat pour l'InSb est en très bon accord avec ce qui a été rapporté pour des nanocristaux de nitrure de gallium [2].

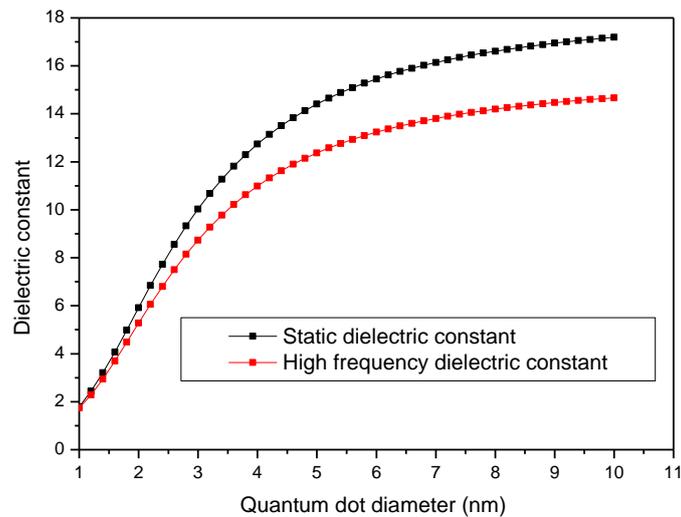


Fig. 3.7. Variation des constantes diélectriques statique et de haute fréquence en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### 3.3.3. Charge effective transverse

La charge effective transverse  $e_T^*$  est un paramètre de base permettant de caractériser les propriétés diélectriques des matériaux à l'état solide. C'est une grandeur dynamique exprimant les effets de covalencité par rapport à une certaine valeur ionique [2,15].

La charge effective transverse est calculée par [16] :

$$e_T^* = \frac{\Delta z}{2} + \frac{4\alpha_p}{1+\alpha_p^2} \quad (3.8)$$

Où :  $\Delta z = -z \text{ Ga} + z \text{ As}$ , avec  $z$  étant la valence.

La variation de la charge effective transverse avec le diamètre des nanocristaux d'InSb est montrée sur la Fig. 3.8. L'on remarque que lorsque le diamètre du nanocristal augmente  $e_T^*$  augmente d'abord rapidement jusqu'à environ 6 nm puis se stabilise pratiquement. On peut conclure alors que  $e_T^*$  augmente en allant de l'InSb nanostructuré à l'InSb massif. Le confinement quantique dans l'InSb conduit par conséquent à une réduction de  $e_T^*$ . Ce comportement est similaire avec celui trouvé pour les quantum dots de GaN [2].

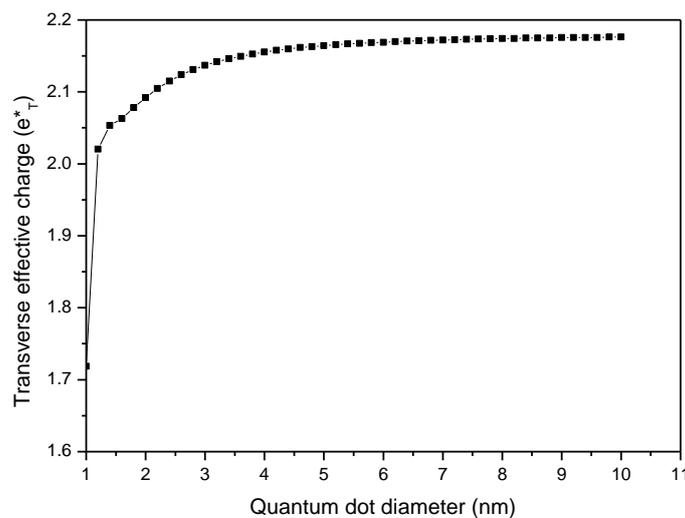


Fig. 3.8. Variation de la charge effective transverse en fonction de la taille du nanocristal d'InSb.

### **3.4. Conclusion**

Dans ce chapitre, ont été rapportés les propriétés électroniques et optiques des nanocristaux d'InSb ainsi que leur variation en fonction de la taille des nanocristaux, dans l'optique d'explorer l'effet du confinement quantique sur les propriétés étudiées. L'on a pu montrer que cet effet affecte toutes les propriétés du matériau sous investigation en deçà d'une taille caractéristique des nanocristaux (6nm).

Les résultats obtenus seront présentés et discutés dans la conclusion générale de notre travail.

## REFERENCES

- [1] M.L.Cohen and J.R.Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [2] A.Gueddim, T.Eloud, N.Messikine, N.Bouarissa, *Superlatt. and Microstruct.*, 77 (2015) 124.
- [3] N.H.M. El Wadiy, N.Bouarissa, M.A. khan, *Phys. Scr.* 84 (2011) 015704.
- [4] A.Hafaiedh, N.Bouarissa, *Physica E* 43 (2011) 1638.
- [5] W.Nakwaski, *Effective masses of electrons and heavy holes in GaAs, InAs, AlAs and their ternary compounds*, *Physica B* 210 (1995) 1 and references cited therein.
- [6] J.C.Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic, New York, 1976.
- [7] W.A.Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, San Francisco, 1980.
- [8] S.Y.Davydov, S.K.Tikhonov, *Semiconductors* 32 (1998) 947.
- [9] P.J.L.Herve, L.K.J.Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [10] V.P.Gupta, N.M.Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [11] N.M.Ravindra, S.Auluck, V.K.Srivastava, *Phys. Stat. Sol. (b)* 93 (1979) 155.
- [12] P.Giannozzi, S.Gironcoli, P.Pavone and S.Baroni, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 7231.
- [13] J.M.Wagner and F.Bechstedt, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 4526.
- [14] G.A.Samara, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 3494.
- [15] K.W.Lee and W.E.Pickett, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 085308.
- [16] N.Bouarissa, *Phys. Lett. A* 245 (1998) 285.

# CONCLUSION

L'objectif que nous nous étions fixés dans le cadre du présent mémoire consistait en l'exploration des propriétés électroniques et optiques des quantum dots d'InSb ainsi que de l'effet du confinement optique sur ces propriétés a été pleinement atteint. En effet, nous avons étudié les propriétés électroniques telles que les différents gaps d'énergie, la largeur de la bande de valence, les masses effectives des porteurs, etc. et les propriétés optiques comme l'indice de réfraction, les constantes diélectriques statique et de haute fréquence, la charge effective transverse, etc en fonction de la taille des quantum dots prise dans l'intervalle 0-10 nm. Les calculs ont été menés en utilisant la méthode empirique du pseudopotentiel.

Les principaux résultats obtenus peuvent être résumés comme suit :

## Propriétés électroniques

- Les trois gaps considérés  $E_{\Gamma-\Gamma}$ ,  $E_{\Gamma-X}$  et  $E_{\Gamma-L}$  diminuent rapidement lorsque le diamètre  $d$  du quantum augmente de 1 à 6 nm. Au-delà de cette valeur ces gaps restent pratiquement inchangés.
- L'InSb nanostructuré demeure à gap direct quelque soit le diamètre des quantum dots (de 1 à 10 nm). Un comportement qualitativement similaire a été rapporté pour des nanocristaux de GaN [2], GaAs [3] et d'AlN [4].
- La largeur de bande de valence augmente d'abord très rapidement puis elle se stabilise lorsque la taille du nanocristal s'approche de 6nm. Le confinement quantique a pour effet donc de réduire la largeur de la bande de valence. L'on peut conclure alors l'augmentation de l'ionocité du cristal en passant de l'InSb massif à des quantum dots d'InSb. Un comportement qualitativement identique a été rapporté par Gueddim et al. [2].

- Les masses effectives des électrons et des trous lourds des quantum dots d'InSb diminuent très rapidement lorsque la taille du nanocristal augmente de 1 à  $\approx 6$  nm puis se stabilisent pratiquement au-delà de 6 nm. Un comportement similaire a été rapporté pour des quantum dots de GaN [2] et d'AlN [4].
- Le facteur d'ionicté des quantum dots d'InSb augmente non linéairement avec l'augmentation de la taille du nanocristal. L'on note aussi la très faible ionicté pour les boîtes quantiques de diamètre 1 nm pour laquelle on est véritablement en présence d'un atome *artificiel*.

### Propriétés optiques

- L'indice de réfraction augmente d'abord très rapidement entre 1 et 6 nm puis demeure pratiquement inchangé entre 6 et 10 nm. On peut donc affirmer que toute augmentation de la taille du nanocristal entre 1 et 5 nm réduit considérablement le gap d'énergie et augmente sensiblement l'indice de réfraction.
- Les deux constantes diélectriques statique et de haute fréquence augmentent rapidement entre 1 et 6 nm puis tendent à devenir pratiquement constantes et valent respectivement 17.17 et 14.67 en accord avec les valeurs rapportés pour l'InSb massif.
- La charge effective transverse augmente d'abord rapidement jusqu'à environ 6 nm puis se stabilise pratiquement. On peut conclure alors que  $e_T^*$  augmente en allant de l'état nanostructuré à l'état massif. Le confinement dans l'InSb conduit par conséquent à une réduction de  $e_T^*$ . Ce comportement est similaire avec celui trouvé pour les quantum dots de GaN [2].

Nos résultats concernant l'effet du confinement quantiques sur les propriétés électroniques et optiques des quantum dots d'InSb sont généralement en bon accord avec la tendance globale des données expérimentales et/ou théoriques disponibles dans la littérature pour d'autres nanomatériaux tels que le GaAs, l'AlN ou le CdS, et peuvent servir de complément pour les études déjà entreprises sur les quantum dots investis.

Finalemeht, il serait très intéressaht, comme perspective du présent travail de procéder à la mise ne application des quantum dots d'InSb dans les lasers ou encore les cellules solaires de troisième génération dont le rendement serait nettement amélioré par l'introduction des fils quantiques.

## REFERENCES

- [1] M.L.Cohen and J.R.Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [2] A.Gueddim, T.Eloud, N.Messikine, N.Bouarissa, *Superlatt. and Microstruct.*, 77 (2015) 124.
- [3] N.H.M. El Wadiy, N.Bouarissa, M.A. khan, *Phys. Scr.* 84 (2011) 015704.
- [4] A.Hafaiedh, N.Bouarissa, *Physica E* 43 (2011) 1638.
- [5] W.Nakwaski, *Effective masses of electrons and heavy holes in GaAs, InAs, AlAs and their ternary compounds*, *Physica B* 210 (1995) 1 and references cited therein.
- [6] J.C.Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic, New York, 1976.
- [7] W.A.Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Freeman, San Francisco, 1980.
- [8] S.Y.Davydov, S.K.Tikhonov, *Semiconductors* 32 (1998) 947.
- [9] P.J.L.Herve, L.K.J.Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [10] V.P.Gupta, N.M.Ravindra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 100 (1980) 715.
- [11] N.M.Ravindra, S.Auluck, V.K.Srivastava, *Phys. Stat. Sol. (b)* 93 (1979) 155.

## Abstract

Using the pseudopotential approach, we have undertaken a detailed study of the electronic and optical properties of zinc-blende InSb spherical quantum dots as a function of their diameter taken in the range 1–10 nm. Features such as energy levels, energy band gaps, electron and heavy hole effective masses, refractive index, dielectric constants and transverse effective charge have been investigated. The quantum confinement is found to be of major effect on all the studied quantities for quantum dot diameter below 6 nm. Beyond 6 nm, all properties of interest tend towards retrieving the bulk properties.

**Keywords:** Quantum dots, InSb, Quantum confinement, Empirical pseudo-potential method.

## Résumé

Les propriétés électroniques et optiques des quantum dots sphériques d' InSb dans la phase zinc-blende ont été étudiées, en fonction de leur diamètre pris dans la gamme 1–10 nm, en utilisant la méthode des pseudopotentiels. Les niveaux énergétiques, les différents gaps d'énergie, les masses effectives des électrons et des trous, les constantes diélectriques, l'indice de réfraction et la charge effective transverse ont tous été explorés. Le confinement quantique a été trouvé d'un grand effet sur toutes les grandeurs étudiées pour un diamètre des quantum dots en deçà de 6nm. Au-delà de 6 nm, toutes les propriétés examinées tendent à retrouver celles du bulk.

**Mots clés :** Nano-cristal, InSb, Confinement quantique, Méthode empirique du pseudo-potentiel.

## خلاصة

قمنا باستعمال التقريب شبه كموني، اد أخذنا بعين الاعتبار الدراسة الالكترونية والضوئية للنقاط الكم الكروية ل InSb دو البنية زنك بلند بدالة القطر المأخوذ في المجال 1-10 نانومتر. وقد تم حساب الفواصل الطاقوية المباشرة وغير المباشرة والكتل الفعالة للحوام ل وثابتي العزل السكوني و عالي التردد وقرينة الانكسار والشحنة الفعالة ال العرضية.

وقد وجدنا ان تأثير الحصر يتم لأجل اقطار اقل من 6 نانومتر وبعد هذه القيمة فإن كل المقادير

المدونة تؤول الى مقابلاتها الحجمية

. **كلمات مفتاحية :** نقاط كمومية , InSb , حصر كمومي. طريقة الكمون الكاذب.