**Chapitre 3**

**RESULTATS & DISCUSSIONS**

**3.1. Introduction**

Dans ce chapitre, nous allons présenter les propriétés électroniques et optiques des quantum dots d’InAs obtenues par simulation numérique. Nos calcul ont été effectués moyennant la méthode empirique du pseudopotentiel (EPM) [1]. L’examen de l’effet du confinement quantique sur les propriétés électroniques et optiques de notre matériau étant l’objectif majeur de la présente étude. Un tel objectif est l’un des concepts les plus prometteurs pouvant conduire à une plus profonde compréhension de l’état solide à l’échelle nanométrique. En outre, les applications technologiques ne peuvent qu’en être servies.

**3.2. Propriétés électroniques**

**3.2.1. Gaps d’énergie**

La dépendance du gap direct EΓ-Γ (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), des gaps indirects EΓ-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 EΓ-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’InAs est présentée sur la Fig. 3.1. Par inspection de cette figure, l’on peut noter que les trois gaps considérés EΓ-Γ, EΓ-X et EΓ-L diminuent rapidement et de façon monotone avec l’augmentation du diamètre *d* du quantum dot jusqu’à une valeur *d* = 6nm. Au-delà de cette valeur ces gaps demeurent pratiquement inchangés. Ainsi, le confinement quantique se traduit par une ouverture des gaps d’énergie pour des tailles inférieures à 6*nm*. En outre, l’InAs nanostructuré demeure à gap direct pour toute la gamme des diamètres considérée de 1 à 10 nm. Un comportement qualitativement similaire a été rapporté pour des nanocristaux de GaN [2], GaAs [3] et d’AlN [4].

Vu le manque d’information expérimentale ou théorique sur les grandeurs étudiées, nos résultats sont des prédictions et peuvent servir de référence.



*Fig. 3.1. Variation des gaps direct EΓ-Γ et indirects EΓ-X et EΓ-L en fonction de la taille du noncristal d’InAs.*

**3.2.2. Largeur de la bande de valence**

La Fig. 3.2 montre la dépendance de la largeur de la bande de valence des nanocristaux d’InAs du diamètre de ces nanocristaux. Cette largeur de 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 peut être considérée comme un indice reflétant la diminution de l’ionicité du cristal en passant de l’InAs massif à l’InAs nanostructuré. 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’InAs.*

**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] :

 (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’InAs nanostructuré représentées sur les Figs. 3.3 et 3.4, diminuent très rapidement lorsque la taille du nanocristal augmente de 1 à ≈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 m0)*

 *en fonction de la taille du nanocristal d’InAs.*



*Fig. 3.4. Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de m0)*

 *en fonction de la taille du nanocristal d’InAs.*

**3.2.4. Facteur d’ionicité**

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

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

 (3.2)

où  représente la polarité du matériau.

Le facteur d’ionicité des quantum dots d’InAs a été calculé en fonction du diamètre de ces quantum dots pris dans l’intervalle 1-10 nm. Les résultats obtenus sont reportés sur 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 ionicité pour les boîtes quantiques de diamètre 1 nm pour les quelles on est véritablement en présence d’un atome *artificiel*.



*Fig. 3.5. Variation de l’ionicité en fonction de la taille du nanocristal d’InAs.*

**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 à hétérostructures ainsi que d'autres dispositifs à guidage d'onde. Ceci nous a incités à déterminer cet indice de réfraction dans le cas de notre matériau pour des tailles du nanocristal allant de 1 à 10nm.

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

  (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 l'indice de réfraction comme fonction de la taille du nanocristal d’InAs. On remarque que cet indice de réfraction augmente d’abord très rapidement entre 1 et 6 nm puis reste 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.



*Fig. 3.6. Variation de l’indice de réfraction en fonction de la taille du nanocristal d’InAs.*

**3.3.2. Constantes diélectriques**

La constante diélectrique constitue une information essentielle lors de la conception des capacitors 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  est déterminée comme le carré de l'indice de réfraction [14] :

 (3.4)

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

 (3.5)

où

 (3.6)

 et  étant respectivement la polarité et la covalencité du matériau reliées par [14] :

 (3.7)

Le comportement des constante diélectrique statique et de haute fréquence lorsque la taille du nanocrsital d’InAs augmente de 1 à 10 nm est illustré par la Fig. 3.7. Les deux constantes diélectriques augmentent rapidement entre 1 et 6 nm puis tendent à devenir pratiquement constantes et valent respectivement 20.7et 13.9 en accord avec les vlaeurs rapportés pour l’InAs massif. 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’InAs 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’InAs.*

**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{∆z}{2}+\frac{4α\_{p}}{1+α\_{p}^{2}} $ (3.8)

Où : $∆z=-z Ga+zAs ,$ avec $z$ étant la valence.

La variation de la charge effective transverse avec le diamètre du nanocristal d’InAs 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’InAs nanostructuré à l’InAs massif. Le confinement dans l’InAs conduit par conséquent à une réduction de$ e\_{T}^{\*}$. Ce comportement est similaire avec celui trouvé pour les qunatum dots de GaN[2].



*Fig. 3.8. Variation de la charge effective transverse en fonction de la taille*

*du nanocristal de InAs.*

**3.4. Conclusion**

Dans ce chapitre, ont été présentées les propriétés électroniques et optiques des nanocristaux d’InAs ainsi que leur variation en fonction de la taille des nanocristaux, au vu d’examiner 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.

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

**REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

|  |  |
| --- | --- |
| [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, A1As and their ternary compounds, Physica B 210 (1995) 1. |
| [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. |