



Revue des Matériaux & Energies Renouvelable

Journal home: <https://www.univ-relizane.dz>

ISSN : 2507-7554

E- ISSN : 2661-7595



FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE, UNIVERSITE DE RELIZANE.

Etude des propriétés électroniques et structurales des composés InX (X=As, Sb, P)

Open
Access

Toufik Dirmi^{1,2}

¹ Département de physique, Faculté des Sciences, Université Mira Abderahman, Bejaia, Alegria

² Laboratoire des matériaux inorganiques, Département de chimie, Faculté des sciences, Université Mohamed Boudiaf, M'sila, Alegria

RESUME

Article history:

Received 22 August 2020.

Received in revised form 04 November 2020.

Accepted 05 July 2021.

Keys word: Ionicité; Pseudopotentiel;
Semiconducteur; Indium

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques (la structure de bande électronique, densité de charge) et structurales (la polarité, la facteur d'ionicté) de trois composés de types III-V à base de l'Indium (InAs, InSb, InP) dans la phase zinc blende. Dans toute l'étude, nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empiriques EPM. Le but de ce travail est d'étudier la variation des facteurs de forme symétriques $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$, et antisymétriques $V_a(3)$, $V_a(4)$, $V_a(11)$, des pseudopotentiels en fonction de l'ionicté dans les semiconducteurs suivants : InSb, InAs, InP. Dans cette étude, Nos calculs ont montré que le gap antisymétrique dans des résultats plus proches à ceux de littérature.

Copyright © 2021 - All rights reserved

1. Introduction

L'étude des structures de bandes permet d'interpréter plusieurs phénomènes physiques, qui se déroulent dans les corps solides. Dans ces corps, cette structure peut être obtenue en tenant compte de toutes les interactions existant entre les noyaux et les électrons. Les résolutions des équations générales sont impossibles, mais on peut toujours adopter des modèles simplifiés pour pouvoir obtenir des solutions approchées.

Vu l'épanouissement de la technologie, de l'information et les besoins de l'industrie, les composés semi-conducteurs III-V cristallisant dans la structure Zinc blende ont été un sujet de spéculation et extrapolation, en particulier à cause de leurs applications potentielles dans la réalisation et le développement des dispositifs optiques et optoélectroniques. Par exemple, haute électron mobilité, transistors bipolaires à hétérojonction, modulateurs électro-optiques, photodétecteurs, diode laser et diode électroluminescente [1].

Plusieurs méthodes théoriques ont été développées pour l'étude des propriétés chimiques et physiques des matériaux. Cependant la méthode empirique des pseudopotentiels reste la méthode la plus simple qui offre les résultats les plus compatibles à l'expérience.

* Corresponding author. E-mail address: dirmi2826@gmail.com

Cette étude a pour but de contribuer à la détermination des propriétés structurales et électroniques de composés binaires (InAs, InSb, InP) de type zinc blende. En utilisant la méthode empirique des pseudopotentiels EPM qui donne des résultats raisonnables avec ceux trouvés par l'expérience [2, 3].

2. Etude des propriétés électroniques :

Le pseudopotentiel empirique est définie comme étant la superposition des pseudopotentiels atomiques de la forme:

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

Où

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

Dans notre travail, on a pris en considération que la partie locale de telle sorte que la relation (III- 1) devient :

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

Avec

$S(G)$ sont les facteurs de structure et $V(G)$ les facteurs de forme, ces derniers ont été au départ tirés de la littérature, ensuite ajustés par la méthode non linéaire des moindres carés [4], dont tous les paramètres sont optimisés sous un critère consistant à minimiser la moyenne de la racine carrée de l'écart des gaps des niveaux d'énergie calculés par la méthode des pseudopotentiels par rapport à ceux trouvés expérimentalement, définie par:

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

Où

$$\Delta E_{i,j} = E_{i,j}^{exp} - E_{i,j}^{cal}$$

$E_{i,j}^{exp}$, $E_{i,j}^{cal}$ sont respectivement les énergies observées et calculées entre l' $i^{ième}$ état correspondant au vecteur d'onde ($k=k_i$) et l' $j^{ième}$ état en ($k=k_j$) du $m^{ième}$ paire choisi (i,j), N est le nombre des paramètres du pseudo potentiel empirique à déterminer.

Les valeurs des paramètres induits au départ seront améliorées par itérations successives jusqu'à ce que δ soit minimale. Les facteurs de formes symétriques et antisymétriques ajustés en (Ryd) ainsi que leurs paramètres du réseau des composés binaire semiconducteurs InX (X=As,Sb,P) dans la phase zinc-blende sont présentés dans le tableau 1.

Tableau 1. Les facteurs de forme symétrique et antisymétrique ajustés en (Ryd) des composés binaires semiconducteurs (InAs.InSb.InP) dans la phase zinc- blende.

composés	Facteurs de formes (Ryd)						a (u. a)
	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$	
InAs	-0.182147	0.00	0.047107	0.094714	0.05	0.03	11.4478
InSb	-0.201822	0.01	0.028443	0.64645	0.03	0.015	12.2641
InP	-0.213862	0.00	0.070499	0.088818	0.06	0.03	11.0906

En utilisant ces facteurs de formes, le calcul des gaps d'énergies pour les composés binaires (InAs.InSb.InP) sont illustrés dans le tableau 2. Nos résultats sont en très bonne accord avec l'expérience.

Tableau 2 : gap d'énergie des composés binaires (InAs. InSb. InP)

composés	Gap d'énergie (ev)					
	E_{Γ}^V		E_{Γ}^X		E_{Γ}^C	
	Cal	Exp[5]	Cal	Exp[5]	Cal	Exp[5]
InAs	0.35986	0.36	1.36974	1.37	1.06984	1.07
InSb	0.18517	0.18	1.64328	1.63	0.94008	0.93
InP	1.34992	1.35	2.20996	2.21	2.04994	2.05

2-1. Structure de bande d'énergie

Les propriétés essentielles du solide sont déterminées par la répartition des niveaux d'énergie ce qu'on appelle « la structure de bande ».

Les figures 1 représentent les structures de bandes électroniques des composés binaires (InAs.InSb.InP). la référence zéro d'énergie est le maximum de la bande de valence. ces trois figures nous indiquent 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 , les binaires InAs, InSb et InP sont au gap direct E (Γ - Γ).

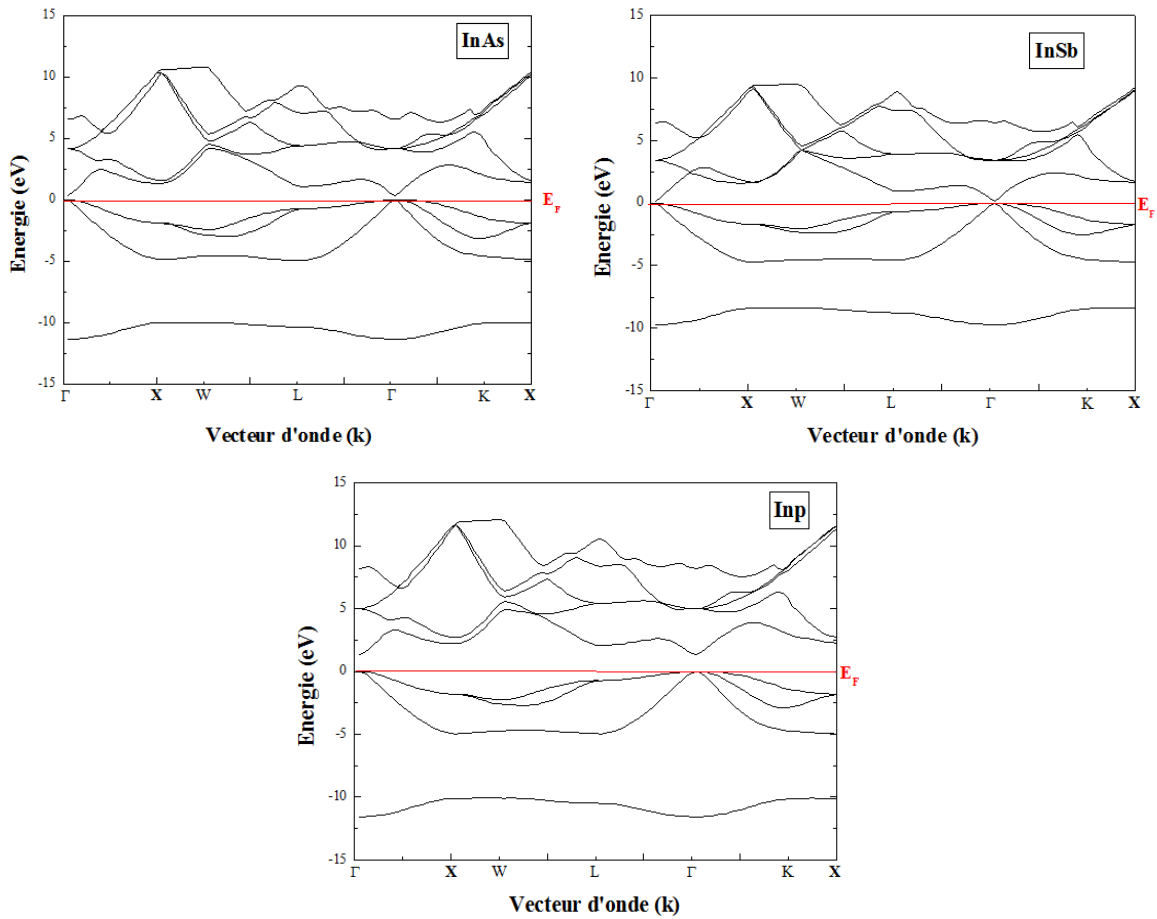


Figure 1 : La structure de bandes électroniques de InX (X=As, Sb, P)

2-2.Densité de charge

La densité de charge électronique est l'une des caractéristiques qui découle de la structure de bande, elle est d'une utilité primordiale, lorsque les propriétés chimiques et physiques présentent un intérêt dans les matériaux semiconducteur. Elle nous permet de connaître le type de liaisons établit entre les composants du matériau, d'où les propriétés optiques et électroniques.

Contrairement aux propriétés électroniques un grand intérêt est apporté récemment sur les propriétés structurales, et en particulier sur les propriétés de liaison des semiconducteurs et des isolants.

La fonction de la probabilité des électrons dans une région spatiale du volume $d\Omega$ est donnée par $|\Psi_{n,k}(r)|^2 d\Omega$ pour les électrons dans le bande n et état k . la densité de charge pour chaque bande de valence pot être écrite comme,

$$\rho_n(r) = \sum_k e |\Psi_{n,k}(r)|^2 \quad (4)$$

Ou la sommation est portée sur tous les états k dans la zone de Brillouin pour une bande donnée n .

Pour obtenir une convergence adéquate pour $|\Psi_{n,k}(r)|^2$, il est nécessaire d'exprimer la fonction d'onde sous forme d'un grand nombre d'onde planes et d'évalue cette fonction d'onde sur beaucoup de point dans la zone de Brillouin.

La densité de charge totale pour un semiconducteur peut être obtenue en ajoutant la densité de charge de toutes les bandes de valence,

$$\rho(r) = \sum_n \rho_n \quad (5)$$

Ou la somme est sur toutes les bandes occupées, Dans ce travail, nous ne somme pas intéressés à toute la densité de charge dans toute la zone de Brillouin, mais seulement au point de haut symétrie Γ .

Ainsi,

$$\rho(r) = e |\Psi_{n,k}(r)|^2, \quad (6)$$

Avec $k = \frac{2\pi}{a}(0,0,0)$ représente le point Γ (a est la constante de réseau).

Les figures 2 représentent la densité de charges électroniques au point Γ pour la somme des quatre bandes de valence des corps binaires InAs, InSb et InP.

Nous remarquons que ces densités de charges présentent à peu près les mêmes caractéristiques et sont caractérisées chacune par un maximum de charges qui se trouve légèrement déplacé vers le côté de l'anion. Une autre partie de charge significative se trouve localisée au voisinage de l'anion. Au niveau du cation, il existe une charge très faible. Par ailleurs une autre constatation peut être faite, c'est qu'il n'y a presque aucune charge au niveau des régions interstitielles.

La distribution de charge entre l'anion et le cation est le partage des électrons induit par l'effet de la mécanique quantique. La raison pour laquelle la densité de charge des semiconducteurs covalents est ainsi faible et que les plus proches voisins sont liés à travers un recouvrement des orbitales de type sp^3 . Le déplacement du maximum de la densité de charges vers le côté de l'anion est dû à une différence de potentiel du cation et de l'anion dans chaque cas du composé binaire.

Cependant, la densité de charges électroniques est légèrement asymétrique autour du centre de la liaison, ainsi le transfert important de charges du cation vers l'anion indique que l'anion possède un potentiel plus fort que celui du cation. Cette différence de potentiel est responsable du caractère de l'ionicté présent dans la liaison, mais avec un degré variant d'un matériau à un autre.

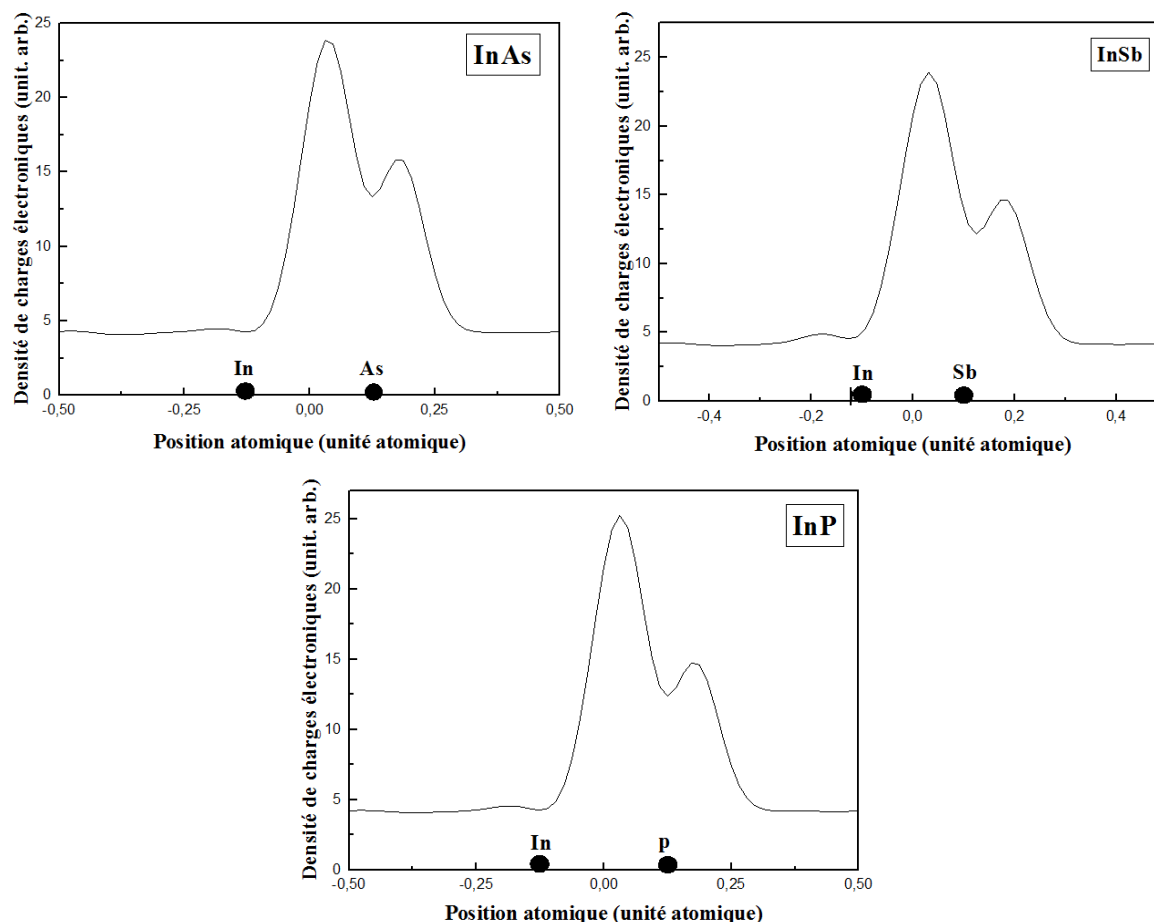


Figure 2 : La densité de charge de InX (X=As, Sb, P) au point Γ .

3. Etude des propriétés structurales :

3-1.La Polarité α_p

Pour déterminée la polarité α_p en utilisant la définition de Volg [6],

$$\alpha_p = \frac{-V_A(3)}{V_S(3)} \quad (7)$$

Avec $V_S(3)$ et $V_A(3)$ sont respectivement les facteurs de forme symétriques et antisymétriques.

La polarité des composés binaires InAs, InSb et InP est présentés dans le tableau 3.

Tableau 3 : les valeurs du polarité des composés binaires InAs, InSb et InP

composé	α_p	
	cal	théo[16]
InAs	0.519986	0.53
InSb	0.320307	0.51
InP	0.415305	0.58

3-2. la charge transverse effective e_T^*

La charge effective des ions est une quantité fondamentale dans l'étude de la dynamique de réseau cristallin qui est implicitement en rapport avec la polarité. Cette quantité peut être prise comme une mesure de son ionicité [7].

La charge effective transverse est déterminée par l'expression suivant:

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

Avec

α_p : est la polarité, et $\Delta Z = -(Z_{In} - Z_X)$ pour X=As, Sb, P.

Où : Z représente le nombre des électrons de valence des matériaux considérés.

Dans le tableau 4, on montre la charge effective transverse calculée [8] et comparée avec d'autres résultats disponibles dans la littérature.

Tableau 4: les valeurs de la charge effective transverse (e_T^*) pour les binaires (InAs, InSb, InP)

composé	e_T^*	
	Cal	Exp[6]
InAs	2.637254	2.53
InSb	2.162010	2.42
InP	2.416845	2.55

3-3. le facteur d'ionicité F_i

Les concepts empiriques, comme l'électronégativité et l'ionicité, sont d'une grande importance pour l'étude et la compréhension des propriétés de base des molécules et des solides. Cependant, l'un des problèmes posé pour évaluer l'ionicité d'une liaison est la difficulté de transformer un concept qualitatif ou verbal en une formule mathématique contenant des grandeurs physiques mesurables. Pour résoudre ce problème, plusieurs méthodes ont vu le jour.

En choisissant deux méthodes pour calculer les facteurs d'ionicité des binaires (InAs, InSb, InP).

3-3-1. Calcul le facteur d'ionicité à partir le gap E_g^x

Il a été rapporté dans la littérature que le gap antisymétrique E_g^x (le gap entre la première et la deuxième bande de valence au point x) est relié à l'ionicité du matériau [9].

Pour calculer les facteurs d'ionicité des binaires (InAs, InSb, InP) on applique la relation suivante [9]:

$$F_i = \left[\left(\frac{E_g^x}{E_g^x - 1} \right)^{-1} - 0.75 \right] - \left[\frac{l}{E_g^x} - 0.66 \right] \quad (9)$$

$$E_g^x = (E_2^x - E_1^x); \text{ Le gap antisymétrique au point x. } \quad l = 1 \text{ eV}$$

3-3-2. Calcul le facteur d'ionicité à partir la relation de Zaoui

Afin d'évaluer, F_i , Zaoui [11]. Récemment utilisé une représentation de l'ionicité basée sur la densité de charge de valence totale. Le facteur d'ionicité étant évalué de la façon suivante :

$$F_i = \left(\frac{S_A}{S_A + \lambda S_C} \right)^\lambda \quad (10)$$

Où :

S_A : la surface anionique S_C : la surface cationique λ : le paramètre sépare les éléments de forte ionicité des éléments de faible ionicité. Dans notre cas $\lambda = -1$ pour les composés des groupes III – V.

Nos calculs sont montrés dans le tableau 5. Pour la comparaison on a aussi exposé des résultats disponibles dans la littérature [12].

Tableau 5: le gap antisymétrique et les facteurs d'ionicté calculés du semiconducteur binaire (InAs,InSb,InP).

composé	E_g^x (ev)	F_i				
		Cal		Exp		
		1 ^{ère} méthode	2 ^{ème} méthode	Ionicté de Phillips[13]	Ionicté de Christensen[14]	Ionicté de Garcia[15]
InAs	5.15709	0.522183	0.486904	0.357	0.553	0.450
InSb	3.69991	0.410001	0.347411	0.321	0.303	0.294
InP	5.14557	0.521323	0.454761	0.421	0.534	0.506

4. CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques (la structure de bande électronique, densité de charge) et structurales (la polarité, la facteur d'ionicté) de trois composés de types III-V à base de l'Indium (InAs,InSb,InP) dans la phase zinc blende. Dans toute l'étude, nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels empiriques EPM.

Peut résumer les résultats principaux obtenus dans cette recherche dans les points suivants :

1. Dans les propriétés électroniques :

- nous constatons que les trois binaires (InAs,InSb,InP) on gap direct ou point Γ ce qui en accord avec l'expérience.
- nous avons trouvé que le déplacement des charges de InAs du coté de l'anion est analogue à celui qui avait été observé pour InSb et InP.

2. Dans les propriétés structurales, nous constatons que :

- les valeurs calculées de polarité α_p dans ce travail de notre façon de les composés semiconducteurs accord avec les calculs théoriques.

-En ce qui concerne la charge effective transverse, les valeurs que nous avons obtenu l'approbation des valeurs de calculs théorique et d'autres expérimentaux.

-Grâce à l'étude du facteur d'ionicté F_i de composés binaires (InAs,InSb,InP) par deux méthodes :

*la première méthode :on a utilise le gap antisymétrique (le gap entre la première et la deuxième bande de valence au point X)des matériaux étudiés : InAs(ionique), InSb(covalente), InP(ionique).

*la deuxième méthode : on a utilisé la méthode de Zaoui : InAs(covalente), InSb(covalente), InP(covalente).

Nous ne constatons que les résultats de facteur d'ionicté dans les deux méthodes plus proche.

*les facteurs de forme symétrique $V_s(3)$, $V_s(8)$, $V_s(11)$ varient d'une manière aléatoire avec l'augmentation de l'ionicté en appliquant la première méthode.

*le facteurs de forme antisymétrique $V_A(3)$ varie d'une manière uniforme avec l'augmentation de l'ionicté . Donc on peut dire que le facteur de forme $V_A(3)$ nous donne une idée sur l'ionicté.

La confrontation des résultats obtenus avec ceux disponibles dans les différentes littératures révèle une bonne concordance. Ce qui nous permet de conclure que la méthode adoptée dans cette étude est très valide dans la description des états électronique des matériaux étudiés dans le cadre de ce travail.

REFERENCES

- [1]- Ackland, G. J. (2001). High-pressure phases of group IV and III-V semiconductors. *Reports on Progress in Physics*, 64(4), 483
- [2]- Charifi, Z., & Bouarissa, N. (1997). The effect of the violation of Vegard's law on the optical bowing in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys. *Physics Letters A*, 234(6), 493-497.
- [3]- Bouarissa, N. (2003). Compositional dependence of the elastic constants and the Poisson ratio of $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Sb}$. *Materials Science and Engineering: B*, 100(3), 280-285.
- [4]- Bouarissa, N., Kobayasi, T., Nara, H., & Aourag, H. (1995). Pressure dependence of positron annihilation in germanium. *Solid state communications*, 96(9), 689-695.
- [5]- Adachi, S. (1987). Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- μm optoelectronic device applications. *Journal of applied physics*, 61(10), 4869-4876.
- [6]- Vogl, P. (1978). Dynamical effective charges in semiconductors: A pseudopotential approach. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 11(2), 251.
- [7]- Sze, S. M., & Ng, K. K. (1981). *Physics of semiconductor devices* John Wiley and Sons Inc. New York.
- [8]- Charifi, Z., Baaziz, H., Hassan, F. E. H., & Bouarissa, N. (2005). High pressure study of structural and electronic properties of calcium chalcogenides. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17(26), 4083.
- [9]- Chelikowsky, J. R., Wagener, T. J., Weaver, J. H., & Jin, A. (1989). Valence-and conduction-band densities of states for tetrahedral semiconductors: Theory and experiment. *Physical Review B*, 40(14), 9644.
- [10]- Al-Douri, Y., Abid, H., & Aourag, H. (2002). Calculation of bulk moduli of semiconductor compounds. *Physica B: Condensed Matter*, 322(1-2), 179-182.
- [11]- Zaoui, A., Ferhat, M., Khelifa, B., Dufour, J. P., & Aourag, H. (1994). Correlation between the ionicity character and the charge density in semiconductors. *physica status solidi (b)*, 185(1), 163-169.
- [12]- Baaziz, H., Charifi, Z., & Bouarissa, N. (2001). Ionicity and transverse effective charge in $\text{Ga}_{1-x}\text{As}_x\text{Sb}_{1-y}$ quaternary alloy semiconductors. *Materials chemistry and physics*, 68(1-3), 197-203.
- [13]- Phillips, J. C., & Van Vechten, J. A. (1970). Spectroscopic analysis of cohesive energies and heats of formation of tetrahedrally coordinated semiconductors. *Physical Review B*, 2(6), 2147.
- [14]- Christensen, N. E., Satpathy, S., & Pawlowska, Z. (1987). Bonding and ionicity in semiconductors. *Physical Review B*, 36(2), 1032.
- [15]- García, A., & Cohen, M. L. (1993). First-principles ionicity scales. I. Charge asymmetry in the solid state. *Physical Review B*, 47(8), 4215.
- [16]- Harrison, W. A., & Ciraci, S. (1974). Bond-orbital model. II. *Physical Review B*, 10(4), 1516.