

Mme TAYEBI Nadja

Spécialité : Physique

Option : *Science des matériaux*

Intitulé du sujet : « ***Etude des propriétés électroniques, optiques et structurales de l'alliage***

B_xGa_{1-x-y}In_yAs»

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés optoélectroniques et structurales des alliages semi-conducteurs binaires: BAs, InAs et GaAs; ternaires: B_xIn_{1-x}As, B_xGa_{1-x}As et Ga_xIn_{1-x}As ainsi que le quaternaire B_xIn_yGa_{1-x-y}As. Ces alliages ont un intérêt essentiel pour concevoir des dispositifs optoélectroniques tels que les diodes laser. Une attention particulière a été portée à l'effet du désordre sur les propriétés électroniques de ces alliages.

Nos calculs sont basés sur la méthode empirique tight binding (TB) combinée avec l'approximation du cristal virtuel (VCA). Ces méthodes sont simples et donnent des résultats rapides et raisonnablement fiables. Le présent travail montre que la simplicité de ces méthodes est commode dans les calculs et elle est aussi utile comme moyen efficace et précis pour prévoir les propriétés matérielles dans toute la gamme de composition des alliages.

Nos résultats concernant les gaps directs et indirects, les structures de bandes ainsi que les propriétés optiques et structurales des composés binaires BAs, InAs, GaAs et leurs alliages ternaires et quaternaires cristallisant dans la phase zinc-blende sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

ABSTRACT

In this work, we have investigated the optoelectronic and structural properties of the alloys semiconductors binaries: Bas, InAs and GaAs; ternaries: $B_xIn_{1-x}As$, $B_xGa_{1-x}As$, $Ga_xIn_{1-x}As$ and quaternary $B_xIn_yGa_{1-x-y}As$. These alloys have a significant interest to design optoelectronic devices such as the lasers diodes. A detailed attention was paid to the effect of disorder on the electronics properties of these alloys.

Our calculations are based on the empirical tight binding method (TB) combined with the virtual crystal approximation (VCA). These methods are simple and expected to give quick and reasonably reliable results. The present work demonstrates that the simplicity of these methods is not only convenient in computation but is also useful for providing an efficient and accurate means for predicting the materials properties in the full range of an alloys composition.

Our results, for the important direct and indirect band-gap energies, band structure and optical and structural properties of the binary compounds Bas, InAs , GaAs and their ternary and quaternary alloys in the cubic phase, agree well with the available experimental and theoretical data.

ملخص

في هذا العمل، درسنا الخواص الإلكترونية للسبائك نصف الناقلية الثنائية: BAs , $InAs$ و $GaAs$ و الثلاثية: $B_x In_{1-x} As$, $B_x Ga_{1-x} As$, $Ga_x In_{1-x} As$ و الرباعية $B_x In_y Ga_{1-x-y} As$. لهذه السبائك أهمية كبيرة لصنع الأجهزة الإلكترونية الضوئية كالديودات الليزرية. أعطينا أهمية خاصة للتأثير العشوائي على الخواص الإلكترونية لهذه السبائك.

حساباتنا معتمدة على طريقة العلاقات القوية المقرونة بتقريب البلورة الإفتراضية. هاته الطرق بسيطة و تعطي نتائج سريعة و جيدة. هذا العمل يبين أن بساطة هذه الطرق ليست ملائمة للحسابات فحسب بل كذلك مفيدة للتزود بوسائل فعالة و دقيقة للتنبؤ بالخصائص المادية في كل مجال تركيب السبيكة.

نتائجنا للنطاق الممنوع المباشر و غير المباشر و بنايات عصابات الطاقة و الخصائص الضوئية و التركيبية للمركبات: BAs , $InAs$, $GaAs$ و سبائكها الثلاثية و الرباعية المتبلورة بطور "كبريت — الزنك"، موافقة تماما للمعطيات التجريبية الموجودة و بعض الحسابات النظرية المتوفرة.