

## ANALYSIS OF A DATA BASE OF CHALCOPYRITE SEMICONDUCTORS IN 2 AND 3 DIMENSIONS

A. M. Ferouani\*, M. R. Merad Boudia, H. Hachemi

Université Aboubekr Belkaid de Tlemcen, Faculté des sciences, Département de physique, Unité de Recherche sur les Matériaux Energies Renouvelables, B.P 119, 13000 Tlemcen Algerie

Received: 15 November 2011 / Accepted: 27 December 2011 / Published online: 31 December 2011

### ABSTRACT

The analysis of the data is currently, in the statisticians, the object of a true phenomenon of mode, characterized at the same time by the passion and the rejection. To determine the characteristics of a whole of data is obviously not an end in itself, but this lapse of memory is unfortunate because the type of data available always influences the direction of research. The factorial analysis in normalized principal components (PCA), is particularly adapted to the reduction of tables of measurements, where one generally works on a matrix of correlation between characters. In this article we will report our results of analysis into 2 and 3 dimensions of the molecular weight and energy of plasmon of semiconductor chalcopyrites by using what one call the datamining materials. All information was presented in the tables envisaged by an ACP method of the semiconductors étudiés. L' analyse factoriel substitues for primitive measurements of new variables or factors (which are linear combinations of the primitive variables) with the help of which it is thus possible to optimize the visualization of the data in a restricted number of figures.

---

Author Correspondence, e-mail: [madjid\\_phy@yahoo.fr](mailto:madjid_phy@yahoo.fr)  
[ICID: 1020749](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10207-9)

Large at the modo we present, the results related to the development of new approaches of Datamining, Analysis in principal components (ACP), of the data-processing techniques which were applied to semiconductors and combined with metals to predict new materials or ultra stable coatings.

**Key words:** Ternary chalcopyrite, energy of plasmon, ionicity, PCA.

## 1. INTRODUCTION

Les semi-conducteurs ternaires de chalcopyrite ont obtenu l'importance considérable en raison de leurs applications potentielles dans les secteurs des diodes luminescentes, du système optique non-linéaire, des dispositifs photovoltaïques et de la cellule solaire [1-5]. La solution solide de ces semi-conducteurs ont été employées dans des dispositifs électro-optiques [6-9].

La conception de nouveaux revêtements nécessite un choix raisonnable de combinaisons de matériaux. De ce fait, plusieurs aspects dans la sélection de matériaux pour concevoir des revêtements durs et super durs ont été étudiés. La recherche des matériaux super durs est guidée par la curiosité scientifique des chercheurs d'explorer les possibilités de synthétiser de nouveaux matériaux dont l'énergie de plasmon pourrait approcher ou même excéder celle du diamant. Dans la plupart des applications d'usinage, l'énergie de plasmon est l'une des propriétés recherchée entre la résistance à l'oxydation, la stabilité chimique, un faible coefficient de frottement contre le matériau à usiner, une haute adhérence, une compatibilité avec le substrat et une faible densité [10-11].

## 2. THEORIE

L'énergie libre de plasmon d'électron des chalcopyrites ternaires est donnée par :

$$\hbar\tilde{S}_p = \frac{4fNe^2}{m} \quad (1)$$

Où N est le nombre efficace d'électrons libres participant à l'oscillation de plasma, e est la charge et m est la masse de l'électron. Dans les composés chalcopyrites le nombre d'électrons efficace de valence de l'individu à des propriétés comme suite

$$N_e^- = \frac{n_e^-}{v_b^-} \quad (2)$$

Là où

$$n_e^- = \frac{Z_r^-}{N_r^-} + \frac{Z_s^-}{N_s^-} \quad (3)$$

$n_e^-$  est le nombre d'électrons de valence par lien,  $Z_r^-$  et  $Z_s^-$  est le nombre d'électrons de valence d'atomes  $r$  et  $s$ .  $N_r^-$  et  $N_s^-$  sont le nombre de coordination d'atomes et  $v_b^-$  est le volume de la liaison. Le volume de liaison est

$$v_b^- = \frac{4d_{rs}^3}{3\sqrt{3}} \quad (4)$$

Pour la structure de chalcopyrite, où  $d_{rs}$  est la valeur moyenne de la longueur des liaisons A-C et B-C. L'énergie de plasmon peut être écrite comme

$$\hbar\check{S}_p = 28.8 \sqrt{\frac{Zt}{M}} \quad (eV) \quad (5)$$

là où  $Z$  est le nombre efficace d'électrons de valence participant à l'oscillation de plasma,  $t$  est la densité et  $M$  est le poids moléculaire.  $\hbar\check{S}_p$  est la valeur moyenne de

l'énergie de plasmon de la longueur de liaison de l'individu,  $\hbar\check{S}_p = \frac{(\hbar\check{S}_{pA-C} + \hbar\check{S}_{pB-C})}{2}$  et  $d$

est la valeur moyenne de la longueur de liaison  $d = \frac{(d_{A-C} + d_{B-C})}{2}$ .

Le rapport empirique suivant est trouvé approprié à l'évaluation du module de compressibilité ( $B$ ) et de l'énergie de plasmon  $\hbar\check{S}_p$

$$B = r(\hbar\check{S}_p)^{-s} \quad (6)$$

et le  $\rho$  sont les constantes et leurs valeurs numériques sont comme  $\rho = 10 \text{ GPa}_e\text{V}$  et  $\rho = 85$  et  $75 \text{ MPA}$  pour les deux chalcopyrites ternaires et l'indice de réfraction est estimé par l'équation proposée suivante

$$n = Ae^{-rB} \quad (7)$$

là où  $n$  est l'indice de réfraction des matériaux et  $A, B$  sont des constantes et leurs valeurs sont  $A = 5.976, B = 0.009$  pour les semi-conducteurs II-IV-V et le  $A = 6.4998, B = 0.01$ , pour des semi-conducteurs I-III-VI respectivement.

Récemment Reddy et autres [6] ont proposé une relation entre l'indice de réfraction ( $n$ ) et le polarisability électronique ( $r$ ) comme suit :

$$r = 0.395 \times 10^{-24} \left[ \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right] \times \frac{M}{d} \quad \text{cm}^3 \quad (8)$$

Là où  $M$  et  $d$  sont le poids et la densité moléculaires de la substance.

### 3. DISCUSSION

Le problème posé est l'étude du comportement d'une population dont on dispose d'un échantillon formant un ensemble fini  $I$ , vis à vis d'un ensemble fini  $V$  de variables numériques. L'ensemble des lignes du tableau des données est indexé par  $I$  de taille  $n$  et celui des colonnes par  $V$  de taille  $m$ ,  $x_{ij}$  est la mesure de la  $j^{\text{ème}}$  variable  $V_j$  sur le  $i^{\text{ème}}$  élément  $i$  de  $I$ .

Ainsi donc, la distance entre deux éléments  $i$  et  $i'$  de  $I$  s'écrit [12]:

$$d^2(i, i') = \sum_{1 \leq j \leq m} (X_{i,j} - X_{i',j}) \quad (9)$$

Cela nous permet de faire une analyse en composantes principales (A.C.P.) et d'obtenir des résultats de la base de donnée[13] présentés sous forme de représentation graphique.

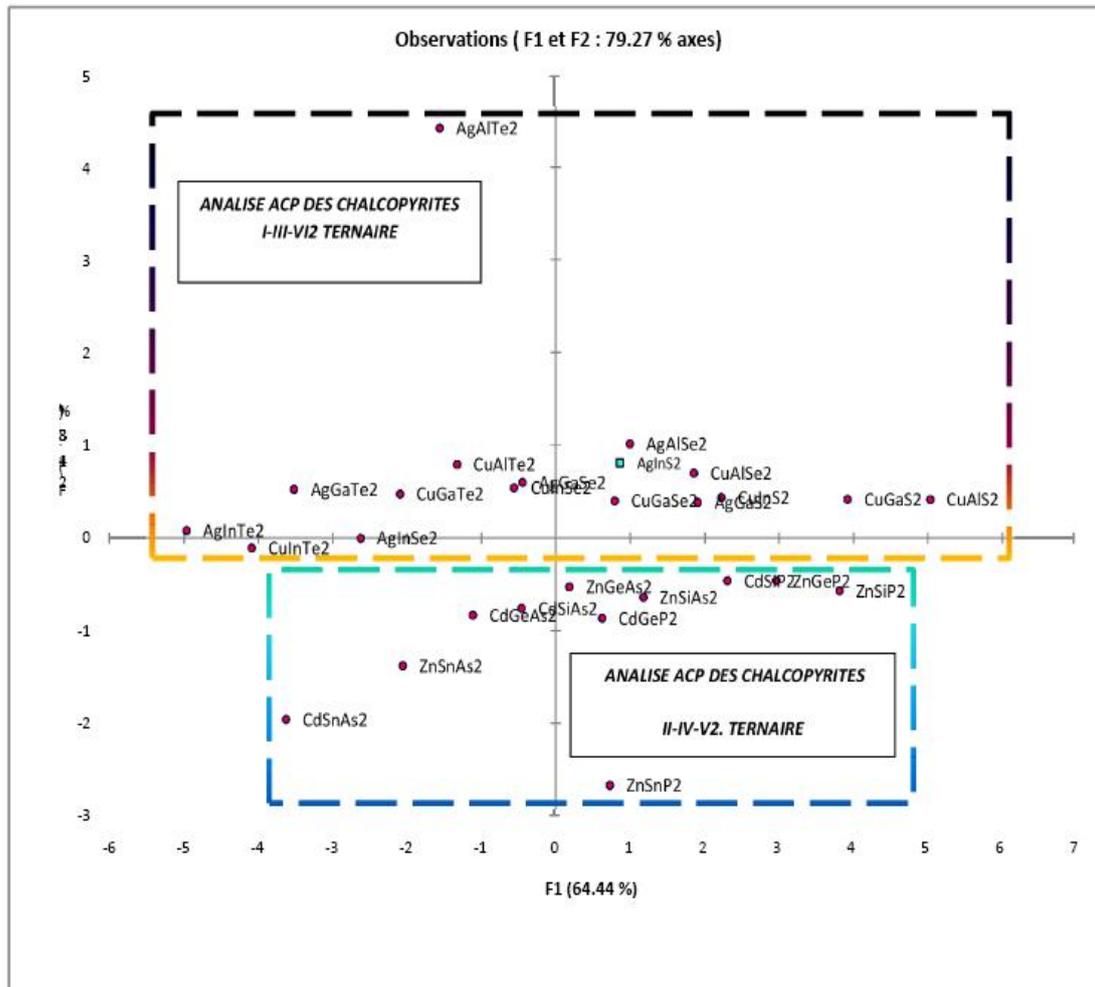
**Tableau 1.** Base de données des chalcopyrites ternaire II-IV-V<sub>2</sub>.

<i>compounds</i>	$\hbar\tilde{S}_p$ (eV)	<b>Mol Weight (g)</b>	<b>Density (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>electronic polarisability Eq.8.</b>	<b>electronic polarisability Known</b>
<i>ZnSiP2</i>	17.015	155.4	3.39	10.194	12.27
<i>ZnSiAs2</i>	16.085	242.2	4.7	12.261	15.04
<i>ZnGeP2</i>	16.638	199.9	4.179	10.93	13.54
<i>ZnGeAs2</i>	15.663	248.8	5.32	11.39	16.82
<i>ZnSnP2</i>	15.55	246	3.165	19.06	14.54
<i>ZnSnAs2</i>	14.825	333.9	5.53	15.42	19.1
<i>CdSiP2</i>	16.194	202.43	4	11.92	13.58
<i>CdSiAs2</i>	15.35	290.34	5.154	16.86	14.16
<i>CdGeP2</i>	15.517	246.94	4.48	13.54	16.05
<i>CdGeAs2</i>	14.898	334.83	5.6	15.21	18.43
<i>CdSnAs2</i>	14.092	380.93	5.72	17.63	21.33

**Tableau 2.** Base de données des chalcopyrites ternaire I-III-VI<sub>2</sub>.

<i>compounds</i>	$\hbar\tilde{S}_p$ (eV)	<b>Mol Weight (g)</b>	<b>Density (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>electronic polarisability Eq.8.</b>	<b>electronic polarisability Known</b>
<i>CuAlS2</i>	17.25	154.65	3.47	10.43	10.82
<i>CuAlSe2</i>	15.845	248.45	4.7	11.43	13.76
<i>CuAlTe2</i>	14.53	345.73	5.5	12.22	19.1
<i>CuGaS2</i>	17.278	197.39	4.35	10.41	12.06
<i>CuGaSe2</i>	15.918	291.19	5.56	11.39	15.27
<i>CuGaTe2</i>	14.305	388.47	5.99	12.34	19.7
<i>CuInS2</i>	16.123	242.49	4.75	11.25	13.29
<i>CuInSe2</i>	15.09	336.29	5.77	11.91	16.42
<i>CuInTe2</i>	13.664	433.57	6.1	12.66	22.63
<i>AgAlSe2</i>	15.16	292.77	5.07	11.86	13.68
<i>AgAlTe2</i>	14.501	390.05	6.18	12.24	16.07
<i>AgGaS2</i>	16.098	241.71	4.72	11.27	14.43
<i>AgGaSe2</i>	15.199	335.51	5.84	11.86	16.57
<i>AgGaTe2</i>	13.621	432.79	6.05	12.68	21.73
<i>AgInS2</i>	15.209	286.78	5	11.83	14.45
<i>AgInSe2</i>	14.233	380.61	5.81	12.38	20.08
<i>AgInTe2</i>	13.037	447.89	6.12	12.95	24.08

A partir de la figure 1 on peut remarquer qu'à partir d'une analyse ACP on peut avoir deux ensembles de données l'un regroupe la majorité des alliages à base de d'Argent (le plus haut) et le deuxième regroupe la majorité des a semi-conducteurs à base de Zinc.



**Fig.1.** rassemblement générale et répartition des groupes de semi-conducteurs

En 2 dimensions comme il est montré dans les figures 2(a, b) les résultats d'analyse son assez claires chaque type d'alliage porte une couleur, par exemple les alliages à base de zinc portent la couleur rouge, les alliages à base de cuivre portent les couleurs orange et jaune, les alliages à base d'Argent portent les couleurs bleu et vert foncé, et les alliages à base de cadmium portent la couleur verte. La figure 2(a) présente sur l'axe des abscisses les quanta d'énergies (eV) des alliages et sur l'axe des ordonnées le poids moléculaire des alliages (g). La figure 2(b) présente sur l'axe des abscisses le poids moléculaire des alliages (g) des alliages et sur l'axe des ordonnées densité des alliages ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ).

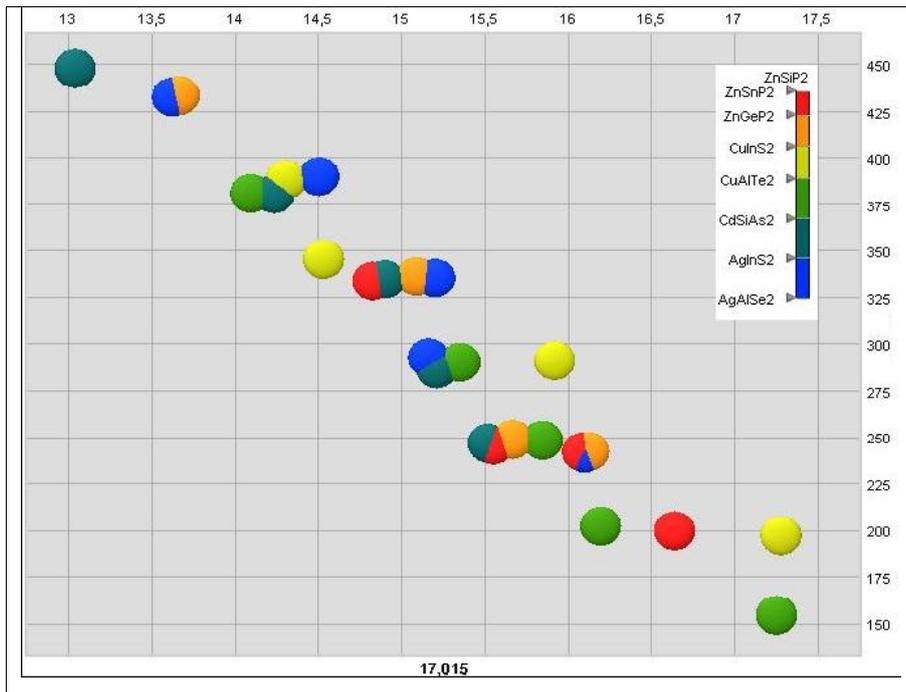


Fig.2a

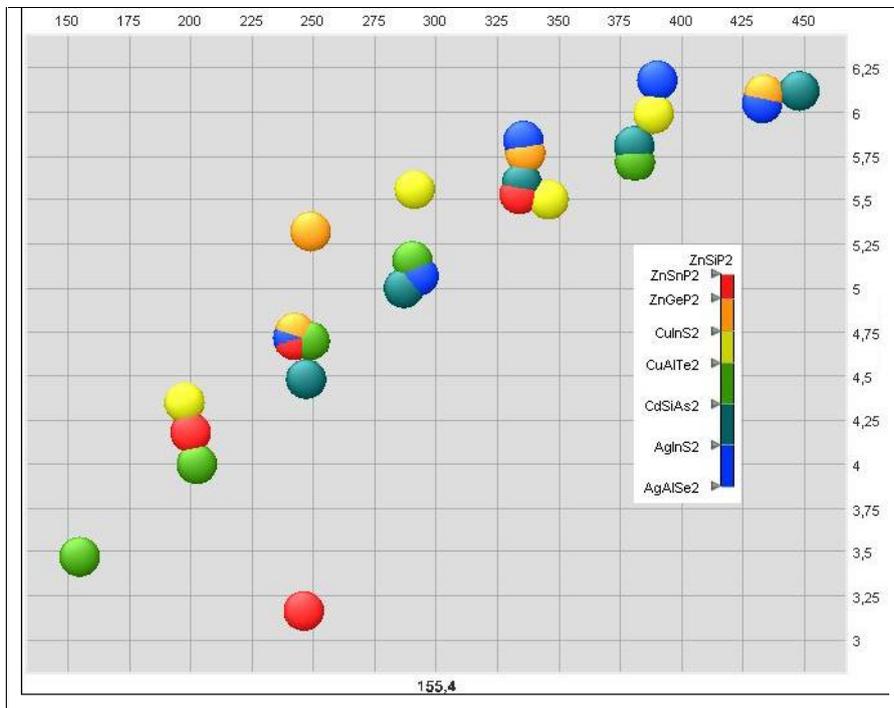


Fig.2b

En 3 dimensions comme il est montré dans les figures 3(a, b, c) les résultats d'analyse son plus claires comme en 2 dimensions chaque type d'alliage porte la même couleur et les même propriétés décrites précédemment sont réparties sur plusieurs positions.

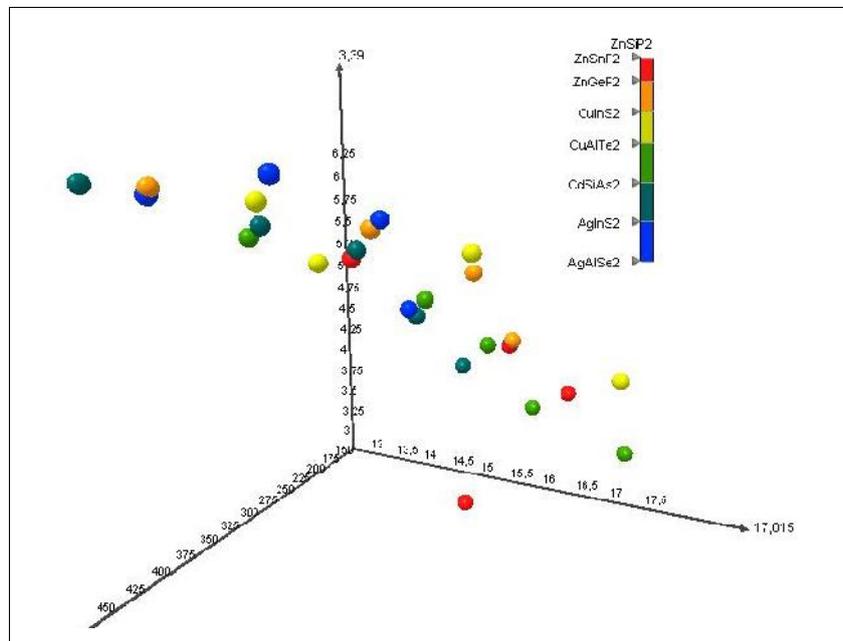


Fig.3a

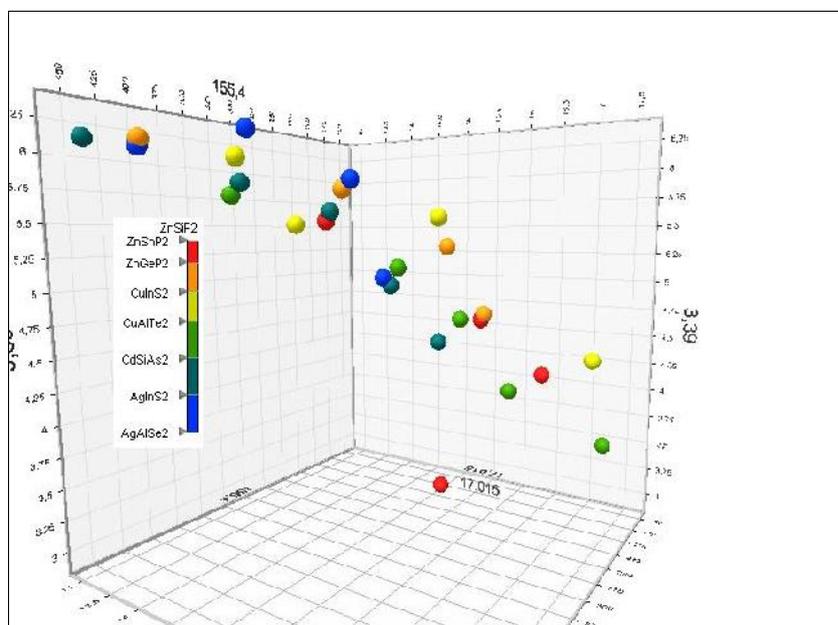


Fig.3b

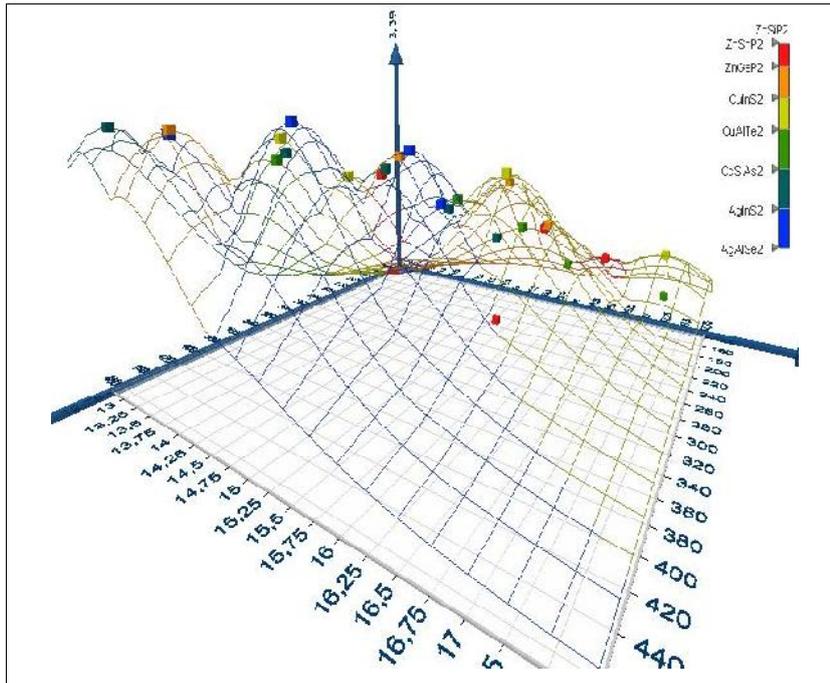


Fig.3c

#### 4. CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons présenté les résultats d'une étude d'analyse ACP pouvant conduire à la classification des paramètres caractérisant les semi-conducteurs chalcopyrites.

Nous remarquons que les résultats obtenus par la méthode d'analyse en composante principale sont essentiellement qualitatifs. Les méthodes de classification automatique obligent à une précision rigoureuse dans le choix des variables prises en compte et des critères d'agrégation. S'il est vrai que l'analyse des données en général ne révèle que des évidences, cela est finalement heureux et permet d'autant plus d'intégrer cet outil dans la démarche de recherche.

#### 5. REFERENCES

- [1] Shay J. L. and Wernik J. H. 1975, Ternary chalcopyrite semiconductors: Growth, electronic properties and application, Pergamon Press, Oxford.
- [2] Yamomoto N. and Miyauchi T. J. Phys. Collq. (Paris). 1975, 36, C3-155.
- [3] Gramire E. 1975, Integrated Optics, T Tanic, New York: Springer.
- [4] Mikkelson J. C. and Kildas H. J. Appl. Phys. 1978, 49, 271; *ibid.* 1988, 23, 97; *ibid.* 1988, 23, 531.

- [5] Neumann Cryst H. Res. Technol. 1987, 22, 271; *ibid.* 1988, 23, 97; *ibid.* 1988, 23, 531.
- [6] Reddy R. R., Nazeer Ahammed Y., Rama Gopal K. and Raghuram D. V. Indian J. Pure Appl. Phys. 1999, 37, 25.
- [7] Narain S. Phys. Stat. Solidi (b). 1994, 182, 273.
- [8] Moss T. S. Phys. Stat. Solidi (b). 1985, 131, 415.
- [9] Neumann Cryst H. Res. Technol. 1983, 18, 665.
- [10] Schedler M. 1988, Hartmetall für den Praktiker, VDI, Dusseldorf.
- [11] Davids J. R., Allen P., Lampman S. R. et al. 1990, Metals handbook, 10 th ed, ASM International, Metals Park, OH.
- [12] Benosman M. et Benyoucef B., Calculs Hiérarchisés des Paramètres et Caractéristiques Optimaux des Différents Matériaux Photovoltaïques.
- [13] Gorai S. K. Parmanand Mahto, Indian J. Phys. 2010, 84(5), 587-592.

## ANALYSE D'UNE BASE DE DONNEE DES SEMI-CONDUCTEURS CHALCOPYRITE EN 2 ET 3 DIMENSIONS

### RESUME

L'analyse des données est actuellement, chez les statisticiens, l'objet d'un véritable phénomène de mode, caractérisé à la fois par l'engouement et le rejet. Déterminer les caractéristiques d'un ensemble de données n'est évidemment pas une fin en soi, mais cet oubli est malencontreux car le type de données disponibles influence toujours la direction de la recherche. L'analyse factorielle en composantes principales normées (ACP), est particulièrement adaptée à la réduction de tableaux de mensurations, où l'on travaille le plus souvent sur une matrice de corrélation entre caractères. En cet article nous rapporterons nos résultats d'analyse en 2 et 3 dimensions du moléculaire et de l'énergie de plasmon des semi-conductrices chalcopyrites en utilisant ce qu'on appelle le datamining des matériaux. Toutes les informations ont été présentées dans les tables prévues par une méthode ACP des semi-conducteurs étudiés. L'analyse factorielle substitue aux mesures primitives de nouvelles variables ou facteurs (qui sont des combinaisons linéaires des variables primitives) à l'aide desquels il est donc possible d'optimiser la visualisation des données en un nombre restreint de figures. Gros au modo nous présentons, les résultats liés au développement de nouvelles approches du Datamining, l'Analyse en composantes principales (ACP), des techniques informatiques qui ont été appliqué sur des semi-conducteurs et alliés avec des métaux prédire de nouveaux matériaux ou revêtements ultra stable.

**Mots clés:** semi-conducteurs chalcopyrite, l'énergie de plasmon, ionicité , ACP.

### How to cite this article

Ferouani A M, Merad Boudia M R, Hachemi H. Analysis of a data base of chalcopyrite semiconductors in 2 and 3 dimensions. J Fundam Appl Sci. 2011, 3(2), 133-143.