

# THESE

*présentée à*

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES  
ET TECHNIQUES DE LILLE

*pour obtenir le grade de*

DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

*par*

Jean-Louis FARVACQUE

\*

## « Influence des Dislocations sur la Conductivité du Tellure »



*Soutenue le 26 avril 1977 devant la Commission d'examen*

*Membres du Jury*

*Président : M. le Professeur B. ESCAIG*  
*Rapporteurs : M. le Professeur J.C. DOUKHAN*  
*M. le Professeur J. FRIEDEL*  
*M. le Professeur P. GROSSE*  
*M. P. LENGART Maitre de Recherche*  
*Examineurs : M. le Professeur C. BENOÎT-A-LA GUILLAUME*  
*M. le Professeur W. SCHRÖTER*

DOYENS HONORAIRES de l'Ancienne Faculté des Sciences

MM. R. DEFRETIN, H. LEFEBVRE, M. PARREAU.

PROFESSEURS HONORAIRES des Anciennes Facultés de Droit  
et Sciences Economiques, des Sciences et des Lettres

M. ARNOULT, Mme BEAUJEU, MM. BROCHARD, CHAPPELON, CHAUDRON, CORDONNIER, CORSIN, DEHEUVELS, DEHORS, DION, FAUVEL, FLEURY, P. GERMAIN, HEIM DE BALSAC, HOCQUETTE, KAMPE DE FERIET, KOUGANOFF, LAMOTTE, LASSERRE, LELONG, Mme LELONG, MM. LHOMME, LIEBAERT, MARTINOT-LAGARDE, MAZET, MICHEL, NORMANT, PEREZ, ROIG, ROSEAU, ROUBINE, ROUELLE, SAVART, WATERLOT, WIEMAN, ZAMANSKI.

PRESIDENTS HONORAIRES DE L'UNIVERSITE  
DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

MM. R. DEFRETIN, M. PARREAU.

PRESIDENT DE L'UNIVERSITE  
DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

M. M. MIGEON.

PROFESSEURS TITULAIRES

M. BACCHUS Pierre	Astronomie
M. BEAUFILS Jean-Pierre	Chimie Physique
M. BECART Maurice	Physique Atomique et Moléculaire
M. BILLARD Jean	Physique du Solide
M. BIAYS Pierre	Géographie
M. BONNEMAN Pierre	Chimie Appliquée
M. BONNOT Ernest	Biologie Végétale
M. BONTE Antoine	Géologie Appliquée
M. BOUGHON Pierre	Algèbre
M. BOURIQUET Robert	Biologie Végétale
M. CELET Paul	Géologie Générale
M. COEURE Gérard	Analyse
M. CONSTANT Eugène	Electronique
M. DEBOURSE Jean-Pierre	Gestion des Entreprises
M. DELATTRE Charles	Géologie Générale
M. DELHAYE Michel	Chimie Physique
M. DERCOURT Jean	Géologie Générale
M. DURCHON Maurice	Biologie Expérimentale
M. FAURE Robert	Mécanique
M. FOURET René	Physique du Solide
M. GABILLARD Robert	Electronique
M. GONTIER Gérard	Mécanique
M. GRANELLE Jean-Jacques	Sciences Economiques
M. GRUSON Laurent	Algèbre
M. GUILLAUME Jean	Microbiologie
M. HEUBEL Joseph	Chimie Minérale
M. LABLACHE-COMBIER Alain	Chimie Organique
M. LACOSTE Louis	Biologie Végétale
M. LANSRAUX Guy	Physique Atomique et Moléculaire
M. LAVEINE Jean-Pierre	Paléontologie
M. LEBRUN André	Electronique
M. LEHMANN Daniel	Géométrie

Mme LENOBLE Jacqueline	Physique Atomique et Moléculaire
M. LINDER Robert	Biologie et Physiologie Végétales
M. LOMBARD Jacques	Sociologie
M. LOUCHEUX Claude	Chimie Physique
M. LUCQUIN Michel	Chimie Physique
M. MAILLET Pierre	Sciences Economiques
M. MONTARIOL Frédéric	Chimie Appliquée
M. MONTREUIL Jean	Biochimie
M. PARREAU Michel	Analyse
M. POUZET Pierre	Analyse numérique
M. PROUVOST Jean	Minéralogie
M. SALMER Georges	Electronique
M. SCHILTZ René	Physique Atomique et Moléculaire
Mme SCHWARTZ Marie-Hélène	Géométrie
M. SEGUIER Guy	Electrotechnique
M. TILLIEU Jacques	Physique Théorique
M. TRIDOT Gabriel	Chimie Appliquée
M. VIDAL Pierre	Automatique
M. VIVIER Emile	Biologie Cellulaire
M. WERTHEIMER Raymond	Physique Atomique et Moléculaire
M. ZEYTOUNIAN Radyadour	Mécanique

#### PROFESSEURS SANS CHAIRE

M. BELLET Jean	Physique Atomique et Moléculaire
M. BKOUCHE Rudolphe	Algèbre
M. BODARD Marcel	Biologie Végétale
M. BOILLET Pierre	Physique Atomique et Moléculaire
M. BOILLY Bénoni	Biologie Animale
M. BRIDOUX Michel	Chimie Physique
M. CAPURON Alfred	Biologie Animale
M. CORTOIS Jean	Physique Nucléaire et Corpusculaire
Mme DACHARRY Monique	Géographie
M. DEPREZ Gilbert	Physique Théorique
M. DEVRAINNE Pierre	Chimie Minérale
Mme EVRARD Micheline	Chimie Appliquée
M. GOSSELIN Gabriel	Sociologie
M. GOUDMAND Pierre	Chimie Physique
M. GUILBAULT Pierre	Physiologie Animale
M. HERMAN Maurice	Physique Spatiale
Mme LEHMANN Josiane	Analyse
M. LENTACKER Firmin	Géographie
M. LEROY Jean-Marie	Chimie Appliquée
M. LOUAGE Francis	Electronique
M. MAIZIERES Christian	Automatique
Mlle MARQUET Simone	Probabilités
M. MIGEON Michel	Chimie Physique
M. MONTEL Marc	Physique du Solide
M. MONTUELLE Bernard	Biologie Appliquée
M. NICOLE Jacques	Chimie Appliquée
M. PAQUET Jacques	Géologie Générale
M. RACZY Ladislas	Electronique
M. ROUSSEAU Jean-Paul	Physiologie Animale
M. SLIWA Henri	Chimie Organique
M. WATERLOT Michel	Géologie Générale

#### MAITRES DE CONFERENCES (Et Chargés d'Enseignement)

M. ADAM Michel	Sciences Economiques
M. ANTOINE Philippe	Analyse
M. BART André	Biologie Animale
Mme BATTIAU Yvonne	Géographie

M.	BEGUIN Paul	Mécanique
M.	BONNELLE Jean-Pierre	Chimie
M.	BOSCQ Denis	Probabilités
M.	BREZINSKI Claude	Analyse Numérique
M.	BRUYELLE Pierre	Géographie
M.	CARREZ Christian	Informatique
M.	COQUERY Jean-Marie	Psycho-Physiologie
M.	CORDONNIER Vincent	Informatique
M.	COUTURIER Daniel	Chimie Organique
M.	CRAMPON Norbert	Géologie
M.	CROSNIER Yves	Electronique
M.	DEBRABANT Pierre	Géologie Appliquée
M.	DEGAUQUE Pierre	Electronique
M.	DELORME Pierre	Physiologie Animale
M.	DE PARIS Jean-Claude	Mathématiques
M.	DHAINAUT André	Biologie Animale
M.	DELAUNAY Jean-Claude	Sciences Economiques
M.	DERIEUX Jean-Claude	Microbiologie
M.	DOUKHAN Jean-Claude	Physique du Solide
M.	DUBOIS Henri	Physique
M.	DUEE Gérard	Géologie
M.	DYMENT Arthur	Mécanique
M.	ESCAIG Bertrand	Physique du Solide
M.	FAKIR Sabah	Algèbre
M.	FLAMME Jean-Marie	Technologie de Construction
M.	FOCT Jacques	Génie Mécanique
M.	FONTAINE Hubert	Physique
M.	FONTAINE Jacques	Electronique
M.	FOURNET Bernard	Biochimie
M.	GAMBLIN André	Géographie
M.	GERVAIS Michel	Gestion des Entreprises
M.	GOBLOT Rémi	Algèbre
M.	HECTOR Joseph	Géométrie
M.	JACOB Gérard	Informatique
M.	JOURNEL Gérard	Physique Atomique et Moléculaire
M.	KREMBEL Jean	Biochimie
M.	LAURENT François	Automatique
M <sup>lle</sup>	LEGRAND Denise	Algèbre
M <sup>lle</sup>	LEGRAND Solange	Algèbre
M.	LEROY Yves	Electronique
M.	LHENAFF René	Géographie
M.	LOCQUENEUX Robert	Physique théorique
M.	MACKE Bruno	Physique
M.	MAHIEU Jean-Marie	Physique Atomique et Moléculaire
M.	MESSELYN Jean	Physique Atomique et Moléculaire
M.	MIGNOT Fulbert	Analyse Numérique
M.	N'GUYEN VAN CHI Régine	Géographie
M.	NOTELET Francis	Electrotechnique
M.	NUSSEMBAUM Maurice	Sciences Economiques
M.	PARSY Fernand	Mécanique
M.	PAUPARDIN Colette	Biologie Physiologie Végétales
M.	PECQUE Marcel	Chimie Physique
M.	PERROT Pierre	Chimie Appliquée
M.	PERTUZON Emile	Physiologie Animale
M.	PETIT Francis	Chimie Organique
M.	PONSOLLE Louis	Chimie Physique
M.	POVY Lucien	Automatique
M.	RICHARD Alain	Biologie
M.	ROGALSKI Marc	Analyse
M.	ROY Jean-Claude	Psycho-Physiologie
M.	SIMON Michel	Sociologie
M.	SOMME Jean	Géographie

M<sup>lle</sup> SPIK Geneviève  
M. STANKIEWICZ François  
M. STERBOUL François  
M. TAILLEZ Roger  
M. THERY Pierre  
M. TOP Gérard  
M. TOULOTTE Jean-Marc  
M. TREANTON Jean-René  
M. VANDORPE Bernard  
M. VILLETTE Michel  
M. WALLART Francis  
M. WERNER Georges  
M<sup>me</sup> ZIN-JUSTIN Nicole

Biochimie  
Sciences Economiques  
Informatique  
Biologie  
Electronique  
Sciences Economiques  
Automatique  
Sociologie  
Chimie Minérale  
Mécanique  
Chimie  
Informatique  
Algèbre

*A ma Femme,*

*Ce travail a été effectué au Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide, associé au C.N.R.S., de l'Université des Sciences et Techniques de Lille.*

*J'exprime ma respectueuse gratitude à Monsieur le Professeur C. Benoît-la Guillaume et à Monsieur le Professeur W. Schröter qui ont accepté de faire partie du jury de cette thèse.*

*Je suis particulièrement reconnaissant à Monsieur le Professeur Friedel pour l'intérêt et les différentes critiques constructives qu'il a portés à ce travail.*

*Je tiens à exprimer tous mes remerciements à Monsieur le Professeur B. Escaig qui m'a accueilli dans son Laboratoire et qui a bien voulu accepter de présider le jury de cette thèse. Je le remercie également pour ses nombreux conseils et encouragements.*

*L'intérêt et l'amitié que m'a témoignés Monsieur Lengart, Maître de Recherche, ont été pour moi un soutien efficace au cours d'un travail parfois ardu. Je le remercie très vivement pour nos échanges nombreux et fructueux.*

*La direction de ce travail a été assurée par Monsieur le Professeur Doukhan à qui revient l'idée de cette recherche et qui m'a assisté d'une aide amicale et dynamique aux divers moments de sa réalisation. Je lui en suis très reconnaissant.*

*Je remercie très chaleureusement Monsieur le Professeur Grosse qui, en m'accueillant dans son Laboratoire, a permis de mener à bien ce travail. Le dynamisme qu'il a créé à l'intérieur de son équipe a favorisé une collaboration très fructueuse entre nos deux groupes. Il a de plus porté un intérêt constant à cette recherche. Les très nombreuses discussions que nous avons eues m'ont beaucoup appris sur la physique du tellure.*

*Mademoiselle Chombart s'est chargée de la frappe et de la mise en page du manuscrit. Je voudrais mentionner ici son esprit clair et sa grande compétence qui font d'elle une collaboratrice très appréciée.*

*Que tous mes camarades, chercheurs et techniciens, soient remerciés ici pour leur aide amicale et l'ambiance sympathique qu'ils ont su créer.*

*Je remercie la D.F.G. et l'Institut Max Planck qui ont financé mes différents séjours en Allemagne.*

- TABLE DES MATIERES -

\* \* \*

<b>Chapitre I - <u>Introduction</u></b> .....	1
<b>Chapitre II - <u>Recherche de sous-structures simples de dislocations</u></b>	
§-1. Généralités .....	8
§-2. Propriétés plastiques du tellure et du selenium .....	9
1) <i>Le glissement <math>\bar{a}</math></i> .....	11
2) <i>Le glissement <math>\bar{c}</math></i> .....	12
§-3. Sous-structures obtenues par compression uniaxiale .....	13
3-1. <i>Le glissement <math>\bar{a}</math></i> .....	13
3-2. <i>Glissement <math>c</math> par compression uniaxiale</i> .....	19
§-4. Glissement $\bar{c}$ en cisaillement .....	21
4-1. <i>Résultats expérimentaux</i> .....	21
4-2. <i>Asymétrie du glissement des dislocations <math>\bar{c}</math> vis</i> .....	26
§-5. Conclusion .....	31
<b>Chapitre III - <u>Mesure des coefficients galvanomagnétiques. Résultats expérimentaux</u></b>	
§-1. Propriétés de transport du tellure .....	32
§-2. Etude phénoménologique de l'influence des dislocations sur les propriétés de transport .....	35
2-1. <i>Les dislocations <math>\bar{a}</math> coin</i> .....	36
2-2. <i>Les dislocations vis</i> .....	37
§-3. Préparation des échantillons .....	37
§-4. Résultats expérimentaux .....	40
4-1. <i>Dislocations <math>\bar{a}</math> coin</i> .....	40
4-2. <i>Dislocations <math>\bar{c}</math> vis</i> .....	51
§-5. Résumé des résultats expérimentaux .....	62
1) <i>Dislocations <math>\bar{a}</math> coin</i>	
2) <i>Dislocations <math>\bar{c}</math> vis</i>	
<b>Chapitre IV - <u>Mécanismes de diffusion des porteurs libres associés aux dislocations</u></b>	
§-1. Introduction .....	63
§-2. Effets de coeur .....	64
2-1. <i>Semi-conducteurs covalents</i> .....	65
2-2. <i>Le tellure</i> .....	66
§-3. Potentiel de déformation .....	67
3-1. <i>Généralités</i> .....	67
3-2. <i>Cas du tellure</i> .....	69
§-4. Effets piezoélectriques .....	70
§-5. Conclusion .....	73



<b>Chapitre V - <u>Calcul de la mobilité des porteurs libres associée aux dislocations par la méthode de l'énergie perdue</u></b>	
§-1. Introduction .....	74
§-2. Calcul de l'énergie perdue .....	77
§-3. Calculs de mobilités contrôlées par les dislocations .....	79
3-1. Diffusion des porteurs libres par les charges de cœur d'une dislocation .....	79
3-2. Potentiel de déformation .....	82
3-3. Effet piezoélectrique .....	86
§-4. Conclusion .....	90
<b>Chapitre VI - <u>Potentiel de diffusion associé aux champs de déformation hétérogène</u></b>	
§-1. Introduction .....	93
§-2. Problème du déplacement des singularités atomiques .....	94
§-3. Problème de la dilatation macroscopique du cristal .....	96
§-4. Cas d'une déformation quelconque .....	98
4-1. Cas du cristal uni-dimensionnel .....	99
4-2. Cas du cristal tri-dimensionnel .....	101
§-5. Transformée de Fourier du potentiel de diffusion .....	102
§-6. Evaluation de la mobilité réciproque induite par ce type de potentiel ...	103
6-1. Diffusion provoquée par une dislocation .....	104
6-2. Ordre de grandeur de $\mu^{-1}$ . Influence de la sous-structure .....	107
<b>Chapitre VII - <u>Conclusion</u></b> .....	111
<b>Annexe 1 - <u>Fonction diélectrique des porteurs extrinsèques d'un semi-conducteur</u></b>	
§-1. Fonction diélectrique des semi-conducteurs .....	113
§-2. Cas particulier du potentiel de déformation introduit au chapitre VI ...	117
<b>Annexe 2 - <u>Calcul du potentiel de déformation et du potentiel piezoélectrique dans le cas des cristaux anisotropes</u></b>	
§-1. Potentiels de déformation .....	120
§-2. Potentiel piezoélectrique .....	123
§-3. Fonction d'anisotropie .....	125
<b><u>Références</u></b> .....	127

# I - INTRODUCTION

## §-1. GÉNÉRALITÉS

L'étude des propriétés électroniques des dislocations a débuté très peu de temps après que la théorie des dislocations ait été fermement établie et ait permis d'interpréter au moins semi-quantitativement les propriétés plastiques des cristaux. Dès 1949 apparaissent les premiers travaux de Koehler [1], puis ceux de Mackenzie et Sondheimer [2], Dexter et Seitz [3,4]. Ces auteurs interprètent l'incrément de résistivité des métaux écrouis en l'attribuant au champ de déformation des dislocations dont la densité augmente au cours de l'érouissage. Ils utilisent le théorème du potentiel de déformation introduit par Bardeen et Shockley [5] associant, ainsi, le champ de déformation élastique des dislocations à un potentiel électrique  $V(\vec{r})$  responsable de la diffusion des porteurs libres :

$$V(\vec{r}) = E_1 \operatorname{div} \vec{u}(\vec{r}) = E_1 \operatorname{tr} \overline{\overline{\epsilon}}(\vec{r}) \quad (\text{I-1.1})$$

où  $E_1$  est la constante du potentiel de déformation et  $\operatorname{tr} \overline{\overline{\epsilon}}(\vec{r})$  la dilatation introduite dans le cristal par la déformation.

Appliqué au cas de la dislocation coin, ce potentiel conduit à un effet de diffusion anisotrope autour de la ligne de dislocation. Aucun effet n'est prévu pour la dislocation vis dont le champ de déformation a une trace nulle dans les cristaux isotropes.

A la même époque, le grand développement de la technologie des semi-conducteurs conduit à l'élaboration de monocristaux presque parfaits de germanium et de silicium. Ceci permet à Pearson, Read et Morin (1954) d'évaluer expérimentalement l'influence des dislocations dans le germanium [6]. Ils constatent qu'en plus de la variation de mobilité des porteurs, déjà observée dans les métaux écrouis, leur densité extrinsèque est également très affectée.

Read interprète ces faits par le modèle des "électrons pendants" pour les dislocations "60°" caractéristiques de la structure diamant [7,8]. Ce type de dislocation coupe, en effet, les liaisons covalentes du cristal. Read suppose que ces états dépareillés correspondent à des niveaux d'énergie situés dans la bande interdite. Ces états localisés le long de la

dislocation peuvent s'ioniser en donnant ou en capturant des électrons. Il en résulte une forte variation du nombre de porteurs. De plus la ligne de dislocation chargée est un centre diffuseur efficace des porteurs libres.

De nombreux travaux expérimentaux effectués sur ces semi-conducteurs covalents : le germanium, le silicium et l'antimoniure d'indium, furent dès lors interprétés avec succès par le modèle de Read. Citons, en particulier, les travaux de Logan, Pearson et Kleinman (1959) [9], Van Weeren, Struickmans et Blok (1967) [10], Pödör (1966-1970) [11,12], Krylow et Auleytner (1969) [13], Glaenzer et Jordan (1969) [14].

L'effet de la charge de coeur des dislocations "60°" sur la mobilité des porteurs libres est fort. Il cache à ces expérimentateurs d'autres effets possibles de diffusion par les dislocations tels ceux que l'on peut relier au champ de déformation. Il faut attendre les travaux expérimentaux effectués à Göttingen par Haasen, Alexander, Schröter, Labusch, Weber et Düster [15 à 22] pour mettre, entre autres, en évidence ce type d'effet qu'ils relient au potentiel de déformation déjà utilisé par Dexter et Seitz.

Sur le plan théorique, Bonch - Bruevich [23] complète la formule de Bardeen et Shockley en ajoutant, phénoménologiquement, un terme supplémentaire attribué à la partie antisymétrique du tenseur de distorsion\* :

$$V(\vec{r}) = E_1 \operatorname{div} \vec{u}(\vec{r}) + E_2 (\vec{\xi} \cdot \operatorname{rot} \vec{u}(\vec{r})) \quad (\text{I-1.2})$$

où  $\vec{\xi}$  est un vecteur unitaire perpendiculaire à la ligne de dislocation. Cette expression permet un effet de diffusion des porteurs libres par les dislocations vis. Les effets de diffusion reliés à ces potentiels de déformation sont cependant petits devant les effets de la charge de coeur.

Vers 1966, l'hypothèse d'une diffusion par effet piezoélectrique est introduite par Merten [24,25] et par Levinson [26]. Dans ces premiers travaux, on néglige la correction apportée au champ de déformation des dislocations par le couplage piezoélectrique. Les potentiels de diffusion

---

\* Dans la suite, nous appelons tenseur de distorsion le tenseur dont les composantes sont les dérivées du déplacement  $\vec{u}(r)$  :  $w_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ . Le tenseur de déformation  $\bar{\epsilon}$  correspond à sa partie symétrique  $\epsilon_{ij} = 1/2 (w_{ij} + w_{ji})$ .

obtenus sont alors simples et permettent de calculer la réduction de la mobilité par les dislocations. Cependant les semi-conducteurs les plus étudiés : le germanium et le silicium, ne sont pas piezoélectriques et il faut attendre les premiers travaux expérimentaux sur le tellure pour redonner de l'intérêt à cette hypothèse.

Les calculs théoriques de Faivre et Saada (1971) [27,28] tiennent compte du couplage piezoélectrique. Leurs résultats montrent cependant que ce couplage n'influence pas beaucoup le champ de déformation des dislocations. Ils justifient, en quelque sorte, le découplage des équations qu'avait a priori, proposé Merten.

Dans les semi-conducteurs où il existe des charges libres, les différents potentiels électriques que l'on attribue aux dislocations sont écrantés par la modification qu'ils apportent à la distribution  $\rho_0(\bar{r})$  des porteurs libres, ou à plus basse température au taux d'ionisation des impuretés. Comme le montrent Faivre et Saada, cette nouvelle répartition  $\rho(\bar{r})$  doit être déterminée, dans le cas piezoélectrique, de manière auto-cohérente avec le potentiel puisque  $\rho(\bar{r})$  intervient dans l'équation reliant le champ de déformation au potentiel cherché.

## §-2. LE CAS DU TELLURE

Le tellure et le selenium sont deux semi-conducteurs polaires présentant la même structure cristalline décrite par le groupe  $P3_12_1$  dans la notation internationale.

Bien que leur intérêt technologique soit grand, leur exploitation reste, cependant, délicate car les diverses mesures expérimentales de leurs propriétés physiques ne sont pas très reproductibles. Ces matériaux ne sont pas fiables.

La fabrication de monocristaux de tellure, par des méthodes traditionnelles (Czochralski) est cependant assez facile et conduit à des monocristaux de qualité relativement bonne tant au point de vue pureté qu'au point de vue de la perfection cristalline. Ce n'est pas encore le cas du selenium dont l'élaboration exige des méthodes plus complexes [29]

et conduit à des monocristaux dont la densité de dislocations atteint fréquemment  $10^8$  à  $10^9$   $\text{cm}^{-2}$  [30]. Le tellure est donc le semi-conducteur le mieux connu de cette famille. Ses propriétés physiques souffrent cependant d'un certain nombre d'anomalies :

- Les mesures galvanomagnétiques ne sont reproductibles que si le cristal est suffisamment dopé ( $p \geq 10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ ) [31,32,33].
- Lors des mesures d'absorption optique, apparaissent parfois des pics d'absorption supplémentaires, en bord de bande [34] attribués à la présence d'excitons [35].
- Dans les expériences de résonance cyclotron, le mode inactif est quelquefois aussi absorbant que le mode actif [36], etc...

Ces anomalies qualitativement attribuées aux défauts de réseau ont incité divers groupes à étudier les dislocations et la déformation plastique du tellure. Ces études entreprises par Blackmore, Schultz, Nomura [37] à la compagnie Bell telephon (U.S.A.), par Stokes, Johnston et Li [38] ont été efficacement reprises par le groupe de Lille [39 à 46]. Nous avons pu également effectuer une étude partielle de la déformation plastique du selenium. Cette étude indique une profonde similitude dans le comportement plastique de ces deux semi-conducteurs [47].

Le tellure est très ductile. A la température ambiante la limite élastique de son système de glissement le plus facile est de l'ordre de 20 à 40  $\text{g mm}^{-2}$ . Dès que la limite élastique est franchie, on obtient rapidement une densité élevée de dislocations ( $10^7$  à  $10^9$   $\text{cm}^{-2}$ ) qui se polygonisent sous différentes formes de sous-structures. Lors de la préparation des échantillons, il est donc possible d'introduire involontairement une densité élevée de dislocations.

Seule l'utilisation systématique du polissage et du découpage chimique permet d'obtenir des échantillons où la densité de dislocations est minimum ( $10^4$  à  $10^5$   $\text{cm}^{-2}$ ).

La comparaison d'échantillons soigneusement préparés et d'échantillons volontairement déformés permet, ces dernières années, de montrer clairement :

- que les niveaux liés aux excitons sont en fait des niveaux liés aux dislocations (v. Alpen (1973) [48,49]),
- que l'absorption dans le mode inactif de la résonance cyclotron n'est observée que dans des échantillons contenant une densité élevée de dislocations  $> 10^6 \text{ cm}^{-2}$  Bauer et all (1975) [50,51],
- que la conductivité électrique est fortement influencée par la présence des dislocations : Faivre [52,53], Abakarov et all [54,55], la présente étude [de 56 à 63].

Les dislocations introduites dans le tellure, par déformation plastique, ne coupent pas les liaisons fortes du semi-conducteur. Le tellure est donc, a priori, un cas "idéal" où l'on peut s'attendre à observer, plus facilement que dans le cas des semi-conducteurs covalents, les effets de diffusion liés au champ de déformation. En outre le tellure est piezoélectrique. En dehors de tout intérêt technologique, l'étude des propriétés électriques de ses dislocations est donc fondamentale.

Nous décrivons, dans ce travail, l'influence des dislocations sur les propriétés galvanomagnétiques du tellure.

De façon à observer sans ambiguïté les effets spécifiques à différents types de dislocations, une grande partie de ce travail a consisté en une recherche systématique de sous-structures de dislocations les plus simples possibles. Elles sont obtenues par divers procédés de déformation (compression, cisaillement). Certaines de ces expériences (cisaillement) ont également permis de préciser les propriétés de certains systèmes de glissement telle l'asymétrie du glissement des dislocations  $\bar{c}$ . Ce travail préliminaire, que l'on décrit au second chapitre conduit à l'étude possible de deux cas typiques où les sous-structures de dislocations sont très simples :

- 1) Les dislocations  $\bar{a}$  coin ( $b = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ ) toutes parallèles à l'axe d'ordre 3, engagées dans deux types de sous-structure.
- 2) Les dislocations  $\bar{c}$  vis ( $b = \langle 0001 \rangle$ ) homogènement réparties dans le cristal.

Après avoir résumé les propriétés galvanomagnétiques du tellure non déformé, dont la connaissance est nécessaire à la compréhension de notre travail, nous présentons au chapitre III une étude phénoménologique préliminaire de l'influence des dislocations sur ces propriétés puis nous décrivons les mesures expérimentales de conductivité et d'effet Hall obtenues sur des échantillons déformés.

La comparaison avec des mesures obtenues sur des échantillons non déformés permet de dégager les faits principaux suivants :

- 1) Les dislocations  $\bar{a}$  coin affectent la mobilité des porteurs libres et provoquent une diffusion anisotrope autour de la ligne de dislocation. Bien que ce type de dislocation induise des états électroniques à l'intérieur de la bande interdite [48], nos mesures galvanomagnétiques ne montrent aucune variation notable de la densité de porteurs libres liée à la présence de ces dislocations.
- 2) Les dislocations  $\bar{c}$  vis affectent la densité de porteurs libres ainsi que leur mobilité. La corrélation des mesures galvanomagnétiques avec des mesures d'absorption optique montre clairement que ces dislocations introduisent un niveau accepteur à  $\sim 1$  meV de la bande de valence.

Afin d'interpréter les variations de mobilité dues à ces deux types de dislocations, nous présentons au chapitre IV les différents mécanismes de diffusion proposés dans la littérature antérieure :

- Les effets de coeur (lignes chargées)
- Les effets de potentiel de déformation
- Les effets de diffusion piezoélectriques

que nous adaptons au cas du tellure.

Développant, alors, au chapitre V le calcul de la mobilité des porteurs par la méthode de l'énergie perdue, puis l'appliquant pour chaque type de potentiel diffuseur aux cas des  $\bar{a}$  coin et des  $\bar{c}$  vis, nous constatons que le cas expérimental des dislocations  $\bar{c}$  vis peut être correctement décrit en supposant la présence de charges le long de la dislocation. Par



contre le cas des dislocations  $\bar{a}$  coin ne trouve aucune description théorique pleinement satisfaisante.

Cet échec partiel des théories proposées dans la littérature nous conduit à analyser, au chapitre VI, l'origine du potentiel de déformation et à en proposer une nouvelle formulation. Cette nouvelle façon de procéder permet de rendre compte de l'effet expérimental de diffusion de la dislocation  $\bar{a}$  coin. Nous montrons également dans ce chapitre, le rôle important, mais jusqu'à présent négligé dans la littérature, de la présence de la sous-structure en introduisant, dans le cas des potentiels reliés au champ de déformation, un facteur de "sous-structure" quantitatif que nous évaluons dans quelques cas simples.

Nous concluons au chapitre VII.

**II - RECHERCHE DE  
SOUS-STRUCTURES  
SIMPLES DE DISLOCATIONS**

## §-1. GÉNÉRALITÉS

Les propriétés électriques des dislocations sont multiples mais spécifiques du type de dislocation considéré. Aussi, lorsque l'on veut caractériser, sans ambiguïté, les propriétés d'une de leurs familles, il est nécessaire de pouvoir l'introduire de façon sélective dans le cristal. La solution que l'on apporte à ce problème est fondamentale. Elle est bien souvent la source de difficultés dans l'interprétation des divers résultats expérimentaux.

L'étude de la déformation plastique du tellure, antérieure à ce travail, n'avait pas pour but la recherche de chemins de déformation particuliers aboutissant à l'installation de sous-structures simples. Les observations topographiques effectuées dans différents cas ont d'ailleurs montré que les sous-structures obtenues sont généralement stabilisées par des glissements secondaires. Les dislocations secondaires ne contribuent pas notablement à la déformation plastique du cristal. Néanmoins leur densité est souvent du même ordre de grandeur que celle des dislocations primaires.

Pour pallier cet inconvénient, nous avons mis au point différents procédés tels : le traitement thermique des échantillons déformés (recuit), la méthode de déformation par cisaillement. Ces techniques ont abouti à quelques cas simples.

La recherche de ces méthodes est fondée sur la connaissance de la déformation plastique. Aussi, nous rappelons brièvement ce qui est connu de la plasticité du tellure. Parallèlement, nous indiquons, chaque fois qu'il est possible, les résultats que nous avons obtenus sur le selenium.

Les sous-structures obtenues par différents chemins de déformation ont été contrôlées au moyen de la microscopie électronique et de la technique de Berg - Barrett (topographie par réflexion des Rayons X). Nous les décrivons dans le second paragraphe. Le microscope électronique fournit une observation directe mais très locale et partielle de la sous-structure des dislocations. Son grossissement trop élevé rend difficile l'observation d'une sous-structure de polygonisation dès que celle-ci est grossière et diffuse dans l'échantillon. Cette polygonisation joue pourtant un rôle important dans les propriétés électriques du cristal macroscopique.

Les techniques d'observation par Rayons X fournissent, par contre, une image à l'échelle de l'échantillon. La caractérisation des parois, possible grâce à l'analyse des contrastes [45,64,65], est simple et schématique. Elle ne rend pas compte d'aspects locaux et non caractéristiques de la répartition des dislocations qui ne manquent pourtant pas de retenir l'attention de l'observateur au microscope électronique. Ces deux techniques d'observation sont donc complémentaires et toutes deux indispensables à une étude sérieuse de la caractérisation et de la répartition des dislocations.

Nous consacrons la dernière partie de ce chapitre à la description et l'interprétation des expériences de déformation par cisaillement. Dans ce type d'expérience le sens des forces appliquées est important puisque le tellure n'est pas centrosymétrique. Ce fait nous a permis de mettre en évidence le caractère asymétrique d'un des systèmes de glissement (le glissement  $\bar{c}$ ) du tellure.

## §-2. PROPRIÉTÉS PLASTIQUES DU TELLURE ET DU SELENIUM

Le tellure et le selenium appartiennent à la colonne VI-b du tableau de Mendeleiev. Ces atomes, possédant six électrons périphériques, peuvent former deux liaisons fortes et se regrouper ainsi en chaînes dans leur phase solide cristallisée. On peut décrire leur structure cristalline par un assemblage compact de chaînes hélicoïdales à trois atomes par tour, (figure 1) [66]. La liaison entre atomes voisins d'une même chaîne est forte (0,68 eV pour Te, 0,94 eV pour Se [67]), tandis que la liaison entre atomes voisins de différentes chaînes est plus faible (0,22 eV pour Te, 0,08 eV pour Se).

Cette structure particulièrement anisotrope détermine le comportement des dislocations qui évitent pendant leur glissement de couper les liaisons fortes des chaînes. Ce fait, expérimentalement bien établi pour le tellure, doit l'être, a fortiori, pour le selenium. Nous l'avons effectivement constaté dans le cas de son glissement  $\bar{a}$ .

Pour le tellure, l'expérience révèle deux classes de systèmes de glissement facilement activables dont les vecteurs de Burgers correspondent aux plus petites translations du réseau :

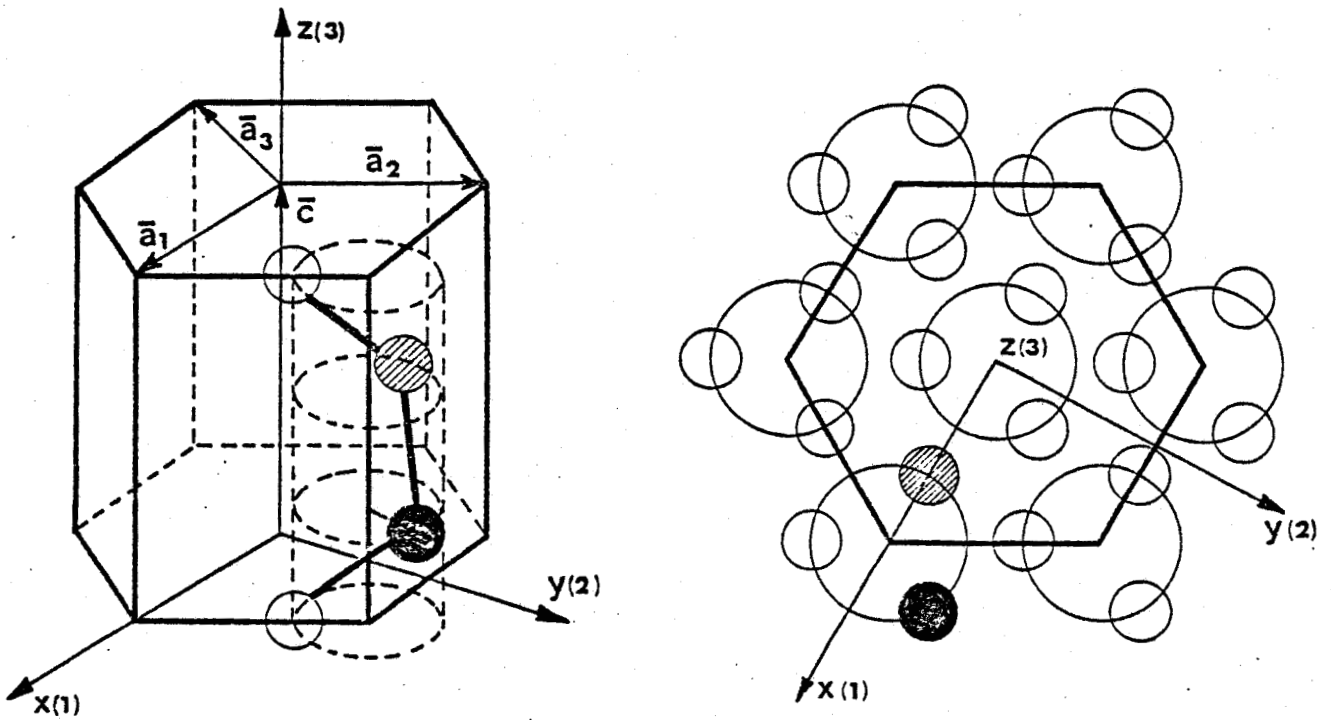


Figure 1 Structure cristallographique du tellure.

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a} = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle, \quad \bar{a} = 4,456 \text{ \AA} \\ \bar{c} = \langle 0001 \rangle, \quad \bar{c} = 5,927 \text{ \AA} \end{array} \right\} \text{ \AA } T = 300 \text{ K [68]}$$

et dont les plans de glissement sont les plans prismatiques de première espèce  $\{10\bar{1}0\}$ .

Faute de cristaux de taille suffisante, nous n'avons étudié que le glissement  $\bar{a}$  du sélénium.

L'étude systématique de ces glissements par compression uniaxiale montre :

- 1) que les glissements  $\bar{a}$  et  $\bar{c}$  du tellure, le glissement  $\bar{a}$  du sélénium sont fortement activés thermiquement (leur limite élastique varie très fortement avec la température),
- 2) que dans le cas du tellure, tout au moins, le glissement  $\bar{a}$  suit la loi de Schmid et Boas (c'est-à-dire que sa limite élastique résolue sur le

plan de glissement ne dépend pas de la direction de compression),

- 3) que le glissement  $\bar{c}$  du tellure, par contre, possède une limite élastique variant, à basse température, dans un facteur 2 suivant l'orientation de l'éprouvette.

Ces résultats expérimentaux ont été interprétés par deux types différents d'interaction avec le réseau.

### 1) Le glissement $\bar{a}$

Les dislocations  $\bar{a}$  ne peuvent se dissocier hors de leur plan de glissement sans couper de liaisons covalentes. L'origine du frottement de réseau ne résulte donc pas d'un phénomène de dissociation sessile des dislocations  $\bar{a}$  en dislocations de translation. Friedel a montré que l'on pouvait cependant considérer une dissociation sessile de la dislocation  $\bar{a}$  coin en deux dislocations de rotation [69]. Cette dissociation explique l'orientation préférentielle, parallèle à l'axe  $\bar{c}$ , de la dislocation  $\bar{a}$ . La nécessité de leur recombinaison lors du glissement serait à l'origine du frottement de réseau observé.

Di Persio, Doukhan et Saada [42], puis Crampon, Doukhan et Escaig [44,46,70] ont attribué ce frottement de réseau au fait que les dislocations  $\bar{a}$  provoquent au voisinage du coeur, une distorsion notable des chaînes covalentes excepté lorsque ces dislocations adoptent l'orientation coin. Ce type d'interaction avec le réseau se traduit par une force de Peierls qui favorise, à basse température, le caractère coin des dislocations. La propagation des dislocations  $\bar{a}$  nécessite alors la formation d'un double décrochement dans le plan de glissement. Ce phénomène est activé thermiquement. Appliqué aux cas du tellure et du selenium, ce modèle est quantitativement cohérent avec les mesures des paramètres d'activation [46,47].

L'énergie d'activation que nous avons trouvée pour le glissement  $\bar{a}$  du selenium ( $\sim 0,6$  eV [47]) est un peu plus élevée que celle qu'a mesurée Crampon pour le tellure (0,5 eV [46]). Ce fait ne nous permet pourtant pas, faute de calculs précis, de trancher entre l'hypothèse de la dissociation en deux disclinations et celle de la torsion des chaînes covalentes.

En effet, l'énergie de liaison entre chaînes est plus faible pour le selenium que pour le tellure (0,08 eV pour 0,22 eV). Ceci devrait favoriser, dans le cas du selenium, une plus grande largeur de dissociation donc une plus grande énergie d'activation correspondant à leur recombinaison. Les mesures expérimentales vont en ce sens. Considérant la seconde hypothèse, l'énergie de liaison entre atomes d'une même chaîne est plus élevée dans le cas du selenium (0,94 eV pour 0,68 eV). La création d'un double décrochement devrait donc conduire également à une énergie d'activation plus élevée dans le cas du selenium.

Remarquons que ces deux processus peuvent contribuer simultanément au frottement de réseau observé.

## 2) Le glissement $\bar{c}$

Les dislocations  $\bar{c}$  introduisent une faute ne concernant que l'arrangement des chaînes mais ne perturbent pas les chaînes elles-mêmes qui ne sont ni coupées, ni distordues. L'origine du frottement de réseau n'est donc pas analogue à celle du glissement  $\bar{a}$ . Par contre, les dislocations  $\bar{c}$  vis peuvent se dissocier dans les différents plans prismatiques suivant la réaction  $\bar{c} \rightarrow 1/3 \bar{c} + 1/3 \bar{c} + 1/3 \bar{c}$ . Cette situation est identique à celle des métaux cubiques centrés [71,72]. Par analogie, on suppose qu'elle peut aboutir à une configuration stable où deux plans de faute se rejoignent le long d'une partielle (figure 2). Le glissement de ces dislocations nécessite le pincement des rubans de faute : ce phénomène est activé thermiquement. En outre, la dissociation justifie la non conformité du glissement  $\bar{c}$  à la loi de Schmid et Boas car le repincement des rubans de faute dépend de la contrainte résolue sur les plans de faute et non sur le plan de glissement principal.

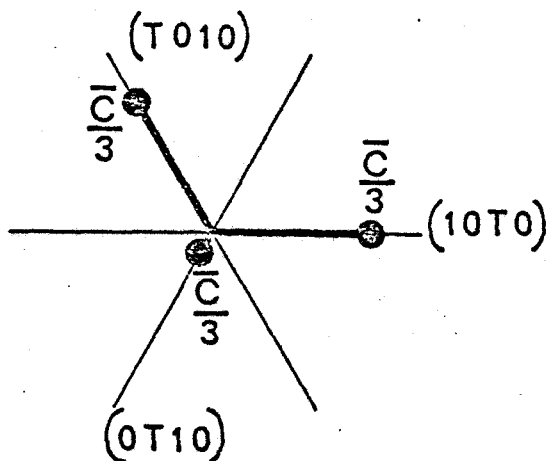


Figure 2 Dissociation de la dislocation  $\bar{c}$  vis en trois partielles.

§-3. SOUS-STRUCTURES OBTENUES PAR COMPRESSION UNIAXIALE

La sous-structure laissée dans le cristal, après déformation, peut dépendre de l'orientation de la contrainte appliquée, même lorsque le glissement vérifie la loi de Schmid et Boas. Certaines orientations peuvent en effet favoriser la participation de glissements secondaires. Avant de décrire les différentes sous-structures obtenues, nous précisons sur le triangle standard l'orientation de compression choisie.

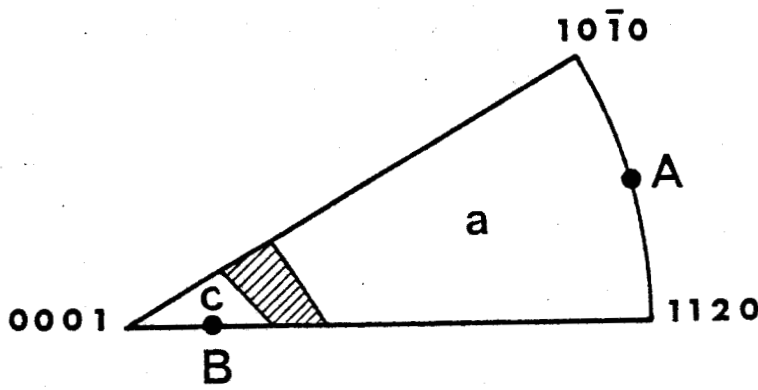


Figure 3  
Triangle standard

3-1. LE GLISSEMENT  $\bar{a}$

L'orientation de l'axe de compression correspondant au cas étudié est représentée par le point A du triangle standard (figure 3). Dans cette orientation, un des trois systèmes de glissement  $\bar{a}$  possède un facteur de Schmid maximum ( $\phi_p = 0,5$ ). Les deux autres sont plus faiblement sollicités ( $\phi_s = 0,25$ ). Cette orientation favorise donc en principe un glissement simple. L'observation par Berg - Barrett montre, dès que la limite élastique est franchie, la formation de parois de flexion parallèles à l'axe  $\bar{c}$  (figure 4). L'observation de ces "sous-joints", dans le plan de base, ne révèle que des contrastes très faibles parallèles à la trace du plan de glissement primaire. Ces contrastes sont cohérents avec la présence de sous-joints grossiers de flexion parallèles aux plans prismatiques de glissement primaire. De tels sous-joints devraient être constitués de dislocations de vecteur de Burgers parallèles à  $\langle 01\bar{1}0 \rangle$  [65,73,77]. Ce type de dislocation n'existe pas dans le tellure. Remarquant cependant que

$$|\langle 01\bar{1}0 \rangle| = |\bar{a}_1 + 2\bar{a}_j|$$



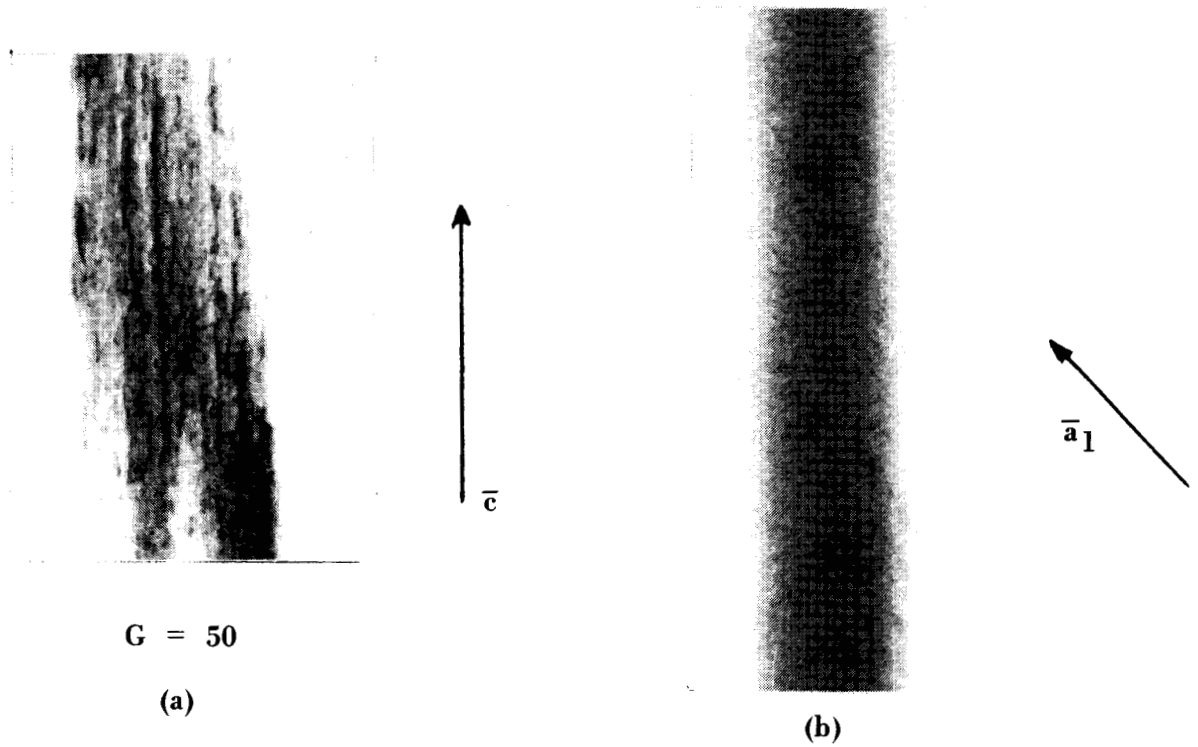


Figure 4 Observation par Berg Barrett de sous-joints grossiers de flexion parallèle au plan prismatique de première espèce. Cas du tellure (a) plan prismatique  $(31\bar{4}0)$  ; (b) plan de base  $(0001)$ .

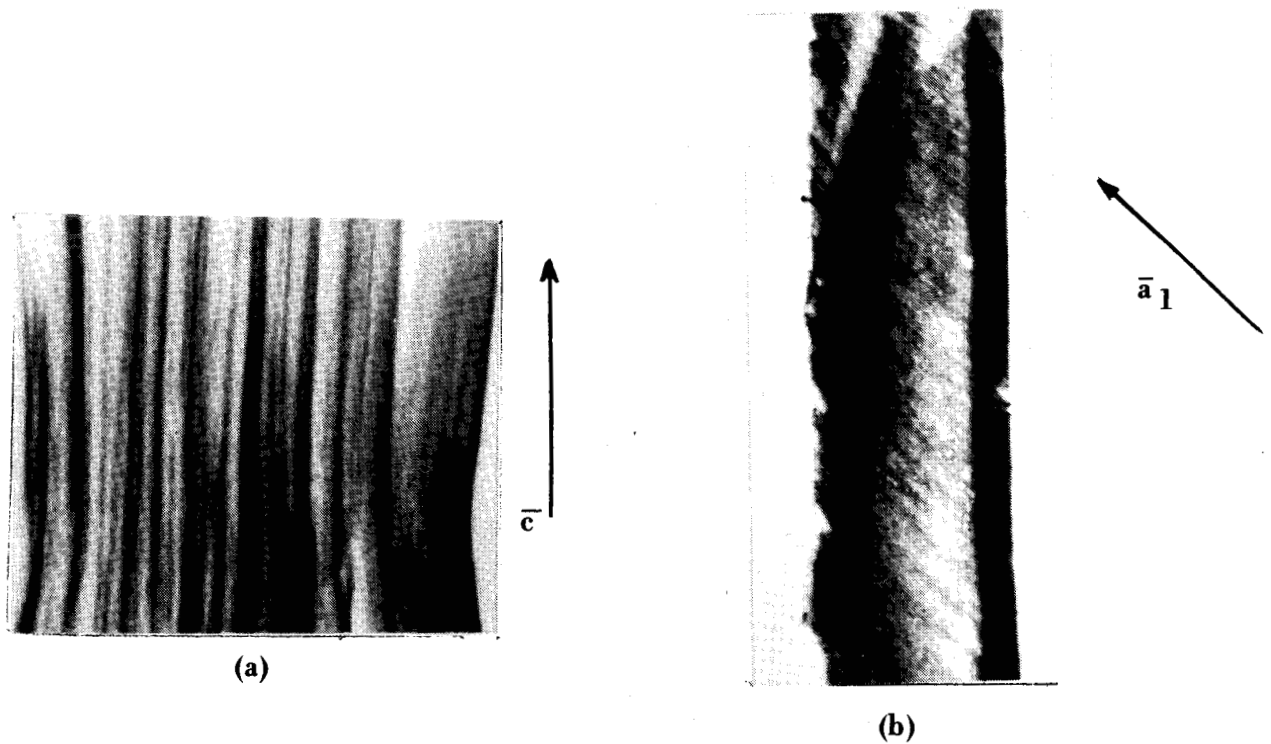


Figure 5 Observation par Berg Barrett de sous-joints grossiers de flexion parallèle au plan prismatique de première espèce, cas du sélénium (a) plan prismatique  $(10\bar{1}0)$  ; (b) plan de base  $(0001)$ .

3115  
LILLE

on voit que ces "sous-joints" doivent être constitués de deux familles de dislocations à coin où la densité de dislocations secondaires est double de la densité de dislocations primaires (ceci dans le cas où le sous-joint est parfait).

Ce type de sous-joints composés semble être inhérent aux structures cristallographiques du tellure et du selenium. Nous l'avons, en effet, retrouvé dans les échantillons de Se ayant subi le même processus de déformation (figures 5-a et b). Notons que le point de fusion du Se ( $220^\circ$ ) très bas permet de considérer la température ambiante comme une température de recuit. De ce fait les sous-joints laissés dans les cristaux de selenium, sont nettement mieux constitués et sont donc plus facilement observables, ainsi que le montre la figure 5-a.

On peut interpréter la formation de ces parois de la façon suivante :

Dans les premiers stades de la déformation, les dislocations primaires  $a_1$  du système de glissement le plus sollicité se multiplient dans leurs plans de glissement  $(01\bar{1}0)$ . Ne pouvant effectuer de glissement dévié, ces dislocations s'empilent parfois, développant alors des contraintes élevées à longue distance. Aidées de la contrainte externe qui agit aussi sur les dislocations secondaires, ces contraintes internes sollicitent localement le mouvement de dislocations secondaires. Celles-ci ne contribuent pratiquement pas à la déformation macroscopique de l'échantillon, essentiellement assurée par les dislocations primaires. Par contre, elles écrantent les contraintes internes en transformant les empilements primaires en "sous-joints" prismatiques de flexion.

Bien entendu, cet écrantage n'est que partiellement obtenu, à basse température, car les dislocations ne peuvent monter. Le meilleur écrantage s'obtient lorsque l'expérience de déformation est effectuée dans le stade athermique ( $T > 160$  K pour Te). Les sources de dislocations secondaires sont alors, elles aussi aisément activées et toutes les dislocations de ces parois adoptent approximativement l'orientation coin, afin de minimiser l'énergie élastique totale. Ceci explique pourquoi il est possible d'obtenir, même dans le domaine athermique, des sous-structures assez reproductibles de

dislocations coin par déformation plastique, bien qu'il n'y ait plus de force de Peierls efficace pour privilégier l'orientation coin.

Dans le cas du tellure, les courbes  $\sigma(\epsilon)$  ne présentent pas de durcissement notable pour des déformations n'excédant pas 5 %. Dès les premiers stades de la déformation, la densité de dislocations laissée dans le cristal atteint  $\sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . Cette valeur n'augmente pratiquement pas avec le taux de déformation.

Il est commode de décrire de tels sous-joints composés au moyen de "groupes" de dislocations. Dans le cas présent, ils sont constitués d'une dislocation primaire et de deux dislocations secondaires. De tels groupes possèdent un vecteur de Burgers  $\bar{A} = \bar{a}_1 + 2\bar{a}_2$  perpendiculaire au plan du sous-joint (figure 6). Nous les avons appelés "super-dislocations" dans [57].

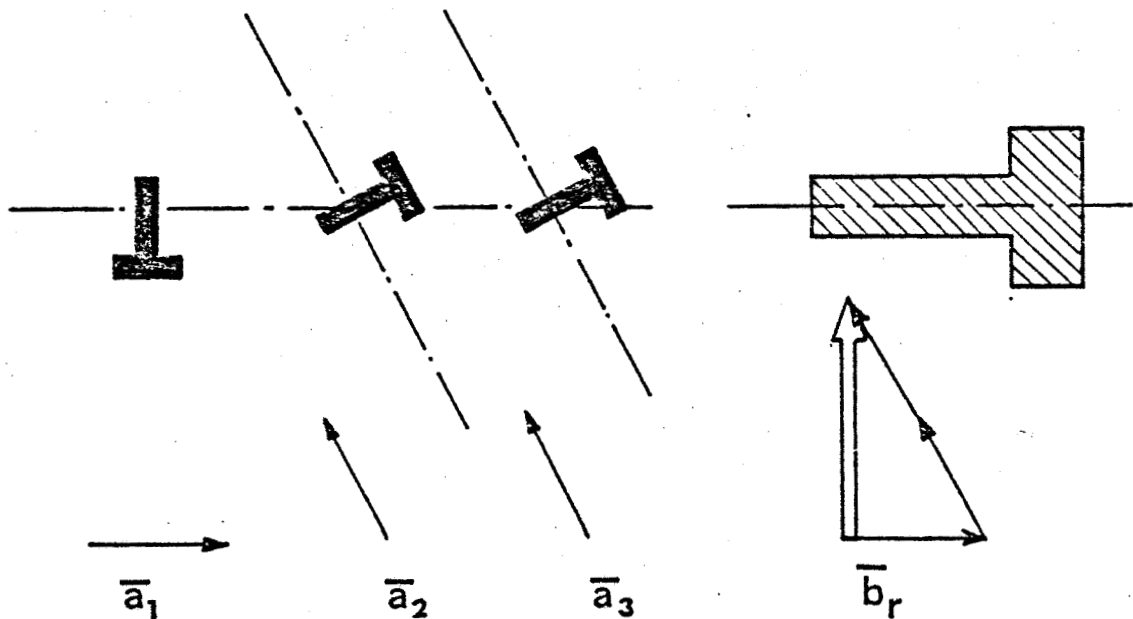


Figure 6 Super-Dislocation.

Il n'est pas aisé d'observer de tels sous-joints au microscope électronique. En effet, suivant l'orientation de la lame mince, sous l'action des forces image, l'une des familles de dislocation coin peut soit disparaître, soit adopter la configuration vis afin de minimiser les contraintes internes de la lame mince. L'observation directe n'a pas permis

de vérifier l'existence de telles parois qui, diffusées à l'échelle des topographies X, sont de plus désorganisées et transformées par la lame mince\*.

Ce type de sous-structure n'est pas un cas idéal puisque plusieurs vecteurs de Burgers sont présents dans le cristal. Il constitue néanmoins un cas où les dislocations sont toutes parallèles et toutes de même nature ( $\bar{a}$  coin). Nous avons sélectionné ce cas pour l'étude des propriétés électroniques des dislocations  $\bar{a}$  coin.

On a pu modifier la sous-structure laissée dans le tellure par la déformation en effectuant un recuit de l'ordre de trois jours à 350°C (= 0,88  $T_F$ ). On obtient alors une sous-structure de sous-joints simples constitués uniquement de dislocations primaires. Lors du recuit, les dislocations secondaires  $\bar{a}_2$  et  $\bar{a}_3$ , en nombre pratiquement égal, réagissent entre elles soit pour s'annihiler avec une dislocation primaire suivant la réaction  $\bar{a}_1 + \bar{a}_2 + \bar{a}_3 = 0$ , soit de recombinaison pour donner une dislocation primaire suivant la réaction  $\bar{a}_1 = -(\bar{a}_2 + \bar{a}_3)$ , comme l'illustre la figure 7. La figure 8 est une topographie de Berg - Barrett montrant de tels sous-joints à l'échelle macroscopique. Remarquons que cette sous-structure de recuit n'est pas purement formée de sous-joints parallèles à l'axe  $\bar{c}$ . Ceux-ci se referment parfois et donnent naissance à des cellules de polygonisation allongées dans la direction  $\bar{c}$ . La présence de ces parois de "jonction" non parallèles à  $\bar{c}$  pourra provoquer une variation de la conductivité dans la direction  $\bar{c}$ .

Ce type de sous-structure obtenu après recuit est néanmoins, en majorité constitué de dislocations  $\bar{a}$  coin d'une même famille. Il constitue donc un cas simple pour tester les propriétés galvanomagnétiques des dislocations  $\bar{a}$  coin. Notons cependant, comme l'illustre la photographie (figure 9) d'un tel sous-joint au microscope électronique, que ceux-ci sont relativement

---

\* Nous rencontrons également ce problème lors de l'observation des dislocations  $\bar{c}$  vis au microscope. Le tellure possède une limite élastique très basse. Les dislocations sont donc très mobiles dans les lames minces et peuvent facilement en sortir sous l'action des forces image.

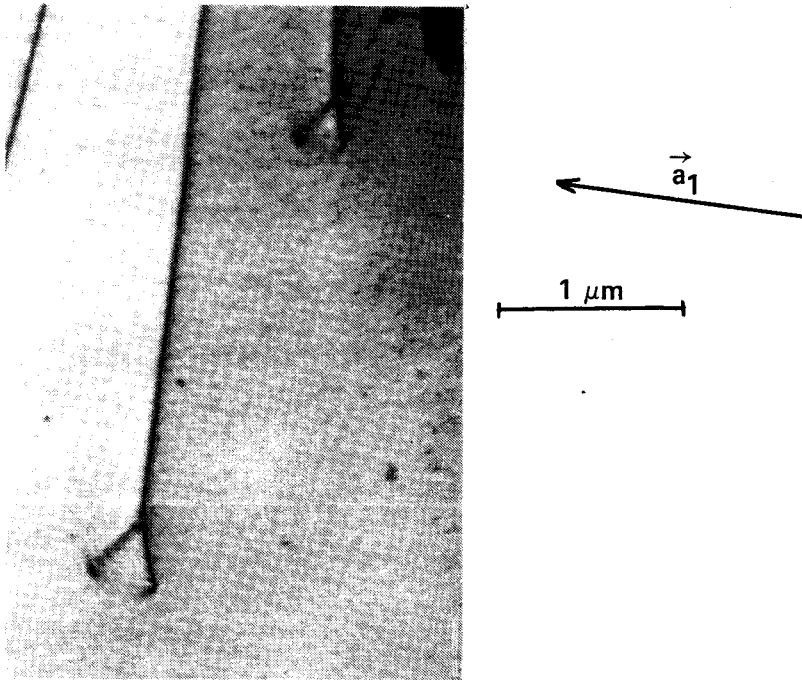


Figure 7 Recombinaison de dislocations à coin observées sur des lames provenant d'échantillons recuits.

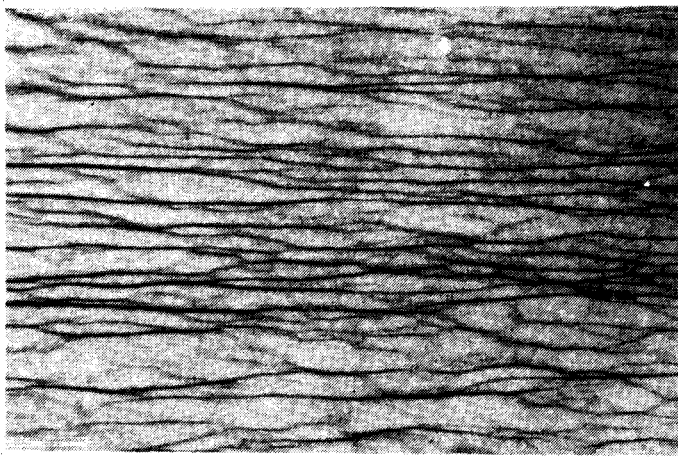


Figure 8 Observation de sous-joints de recuit par la méthode de Berg-Barrett.

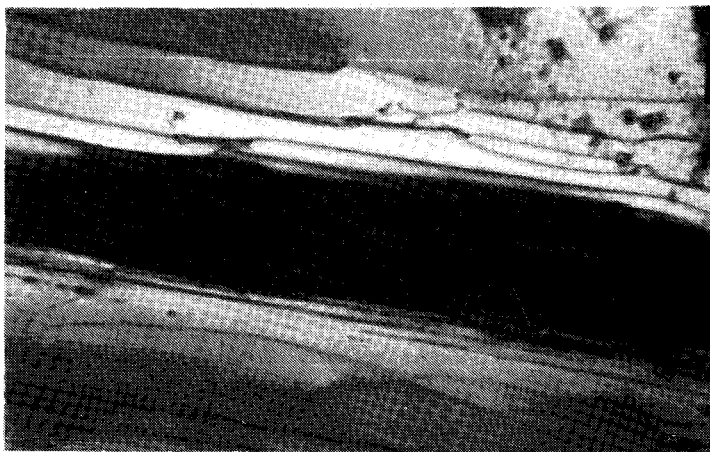


Figure 9 Sous-joint de recuit observé en microscopie électronique.

bien constitués et que les effets galvanomagnétiques possibles liés au champ de déformation des dislocations pourront être modifiés par un tel type de configuration (minimisation du champ à grande distance).

### 3-2. GLISSEMENT $\bar{c}$ PAR COMPRESSION UNIAXIALE

La sous-structure que nous décrivons correspond à une déformation de l'éprouvette suivant la direction B indiquée sur le triangle standard, (figure 3). Dans cette orientation, deux plans de glissement sont également sollicités par la contrainte externe. Le troisième plan de glissement possède un facteur de Schmid nul. Le glissement duplex est possible a priori, mais n'a jamais été observé.

La sous-structure obtenue lors d'une déformation à basse température est constituée de sous-joints grossiers de flexion, parallèles au plan de base (figure 10). Ces sous-joints sont constitués de dislocations  $\bar{c}$  coin [45]. Les dislocations  $\bar{c}$  vis ne peuvent former, seules, des sous-joints stables de torsion. Elles ne provoquent donc aucune distorsion macroscopique et n'apparaissent pas sur les topographies de Berg - Barrett. Néanmoins il a été possible de les observer au microscope électronique à très haute tension, après avoir fixé ces dislocations, très mobiles, par irradiation (figure 11). La sous-structure obtenue à basse température contient donc un mélange de dislocations  $\bar{c}$  de caractère coin ou vis. Elle ne peut donc être utilisée pour l'étude des propriétés galvanomagnétiques.

Etant donné qu'il est impossible d'obtenir un rapport élevé des facteurs de Schmid  $\phi_c / \phi_a$  dans ce type d'échantillon, le glissement  $\bar{a}$  est également sollicité par la contrainte externe. A haute température, ce glissement devenu athermique se déclenche et contribue à stabiliser les  $\bar{c}$  vis sous forme de sous-joints de torsion ( $\vec{a}_{vis}, \vec{c}_{vis}$ ). Ces derniers se superposent à la sous-structure déjà observée à basse température (figures 12-a et b).

La déformation plastique par compression uniaxiale ne permet donc pas d'obtenir dans le cas du glissement  $\bar{c}$  de sous-structures simples ne contenant que des dislocations d'un type donné. Il est nécessaire d'utiliser un autre procédé de déformation dont la géométrie ne favorise pas l'apparition de glissements secondaires. Comme le montre le paragraphe suivant, la

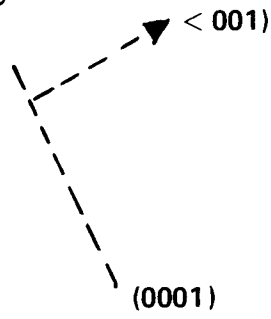
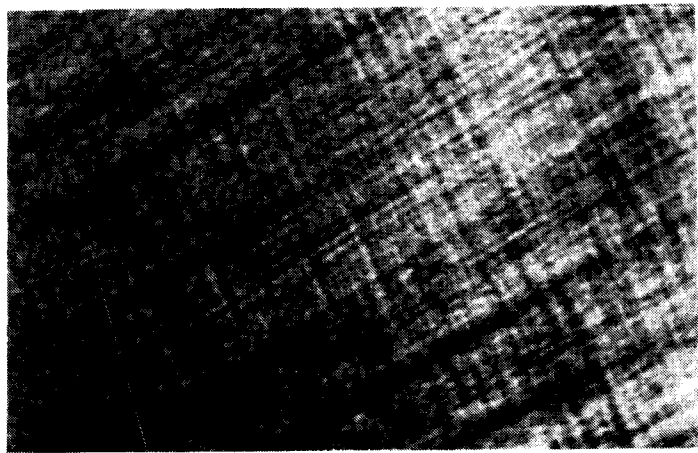


Figure 10 Topographie de Berg - Barrett montrant des sous-joints de flexion constitués de dislocations  $\bar{c}$  coin.

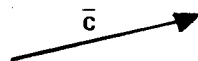
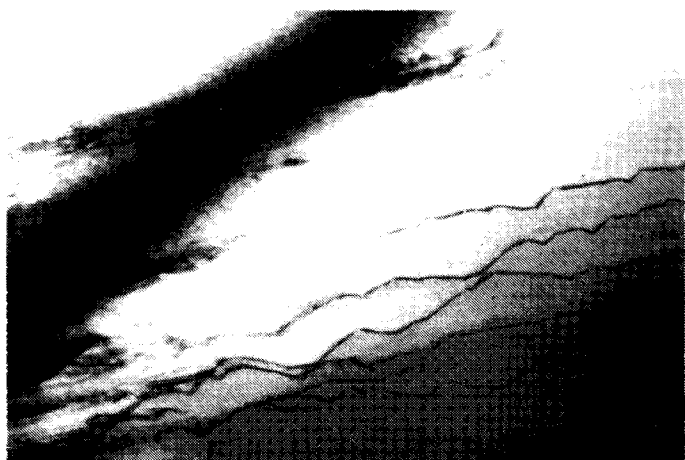
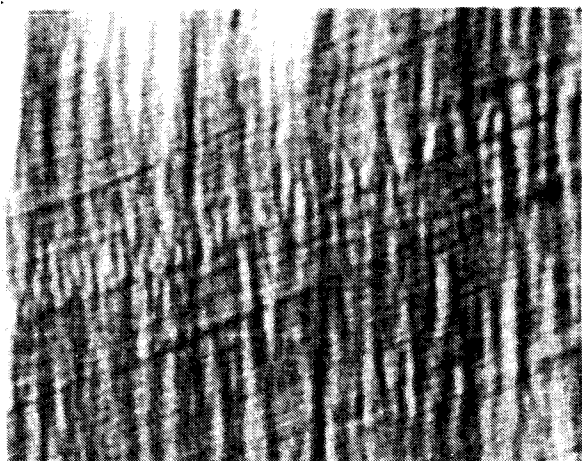
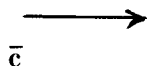


Figure 11 Dislocations  $\bar{c}$  vis fixées dans la lame mince par irradiation.



(a)



(b)

Figure 12 (a) Topographie de Berg-Barrett montrant la trace de sous-joints de torsions (contrastes parallèles à  $\bar{c}$ ).

(b) Topographie de ces sous-joints obtenue avec une faible divergence. L'axe de rotation des sous-joints est orthogonal au plan de sous-joints (contrastes noir-blanc orthogonaux à  $\bar{c}$ ).



réalisation d'un cisaillement sur un plan prismatique dans la direction  $\bar{c}$  permet de résoudre ce problème.

#### §-4. GLISSEMENT $\bar{c}$ EN CISAILLEMENT [60]

Nous montrons dans ce paragraphe que les expériences de cisaillement permettent l'étude du glissement  $\bar{c}$  sans sollicitation de glissement  $\bar{a}$  secondaire. Elles constituent donc un cas géométriquement pur qui ne peut être obtenu par compression uniaxiale.

Effectuées à basse température, ces expériences de cisaillement laissent, dans le cristal, une sous-structure de longues dislocations  $\bar{c}$  vis réparties de façon homogène. Cette sous-structure constitue un cas idéal pour l'étude des propriétés galvanomagnétiques.

Les paramètres d'activation que l'on obtient sont différents de ceux que Crampon a déterminé en compression uniaxiale. La comparaison et l'analyse de ces résultats confirme l'hypothèse de la dissociation sessile de la dislocation  $\bar{c}$  vis. Elle conduit, en outre, à supposer que le glissement  $\bar{c}$  prismatique présente un caractère d'asymétrie marqué, c'est-à-dire une grande différence dans la limite élastique obtenue pour une direction de glissement et son inverse.

#### 4-1. RESULTATS EXPERIMENTAUX

##### 4-1.1 L'appareil de cisaillement

Le schéma de cet appareil est représenté figure 13. Le guidage de la partie A est obtenu à l'aide d'un roulement à bille linéaire pratiquement sans frottement (ce roulement n'est pas représenté sur la figure).

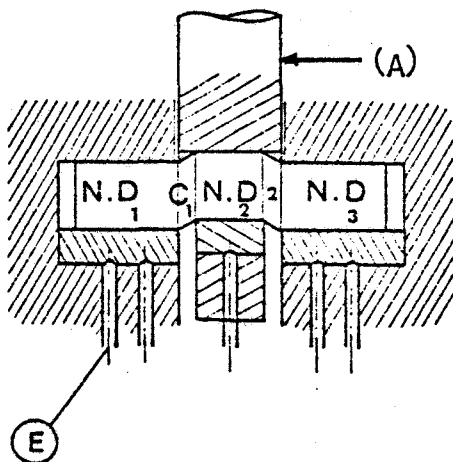


Figure 13 Schéma de l'appareil de cisaillement.



L'appareil peut être utilisé pour cisailer deux régions, de même section, si l'on utilise un échantillon suffisamment long, ou bien une seule région lorsque l'échantillon est plus court. De façon à éviter toute flexion élastique, l'échantillon est fixé au moyen de cales serrées par la vis E. La compression de l'échantillon due à cette fixation n'introduit pas de déformation plastique involontaire car la force exercée sur l'échantillon est parallèle à l'axe  $\bar{c}$ , direction pour laquelle aucun système de glissement n'est activé.

#### 4-1.2 Courbes contrainte déformation

Considérant l'échantillon schématisé figure 14, la contrainte résolue sur le plan de glissement actif est  $\sigma = F/S$  (ou bien  $F/2S$  lors du double cisaillement). Le taux de déformation résolu est  $\gamma = 2vt/d$ .

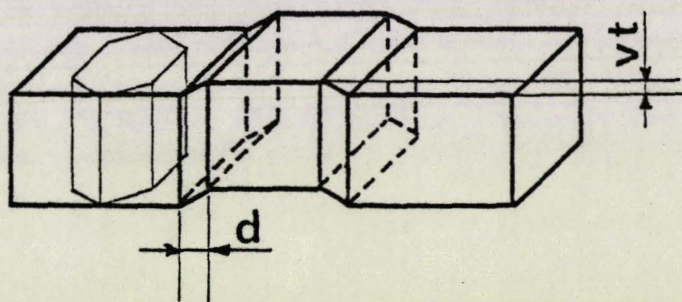


Figure 14 Schéma de l'échantillon cisailé.

A l'aide de ces formules, on déduit des résultats expérimentaux l'ensemble des courbes contrainte-déformation résolues représenté figure 15.

L'appareil permet aussi les essais de relaxation de contraintes [46,75] dont on déduit le volume d'activation du phénomène. La courbe  $V(\sigma)$  permet de déterminer la limite élastique suivant la définition proposée par Crampon et all [46]. La limite élastique correspond à la contrainte à partir de laquelle le volume d'activation se stabilise. Cette définition est fondée sur le fait que le stade préplastique correspond au glissement des dislocations les plus mobiles tandis que le stade plastique débute dès que les dislocations les moins mobiles peuvent se mettre en mouvement (ici les dislocations  $\bar{c}$  vis). Tandis que la courbe  $\sigma(\gamma)$  rend compte de ce mouvement global sous la forme d'un stade parabolique, le volume d'activation, lui, cesse brutalement d'évoluer dès que les dislocations les moins mobiles peuvent glisser.

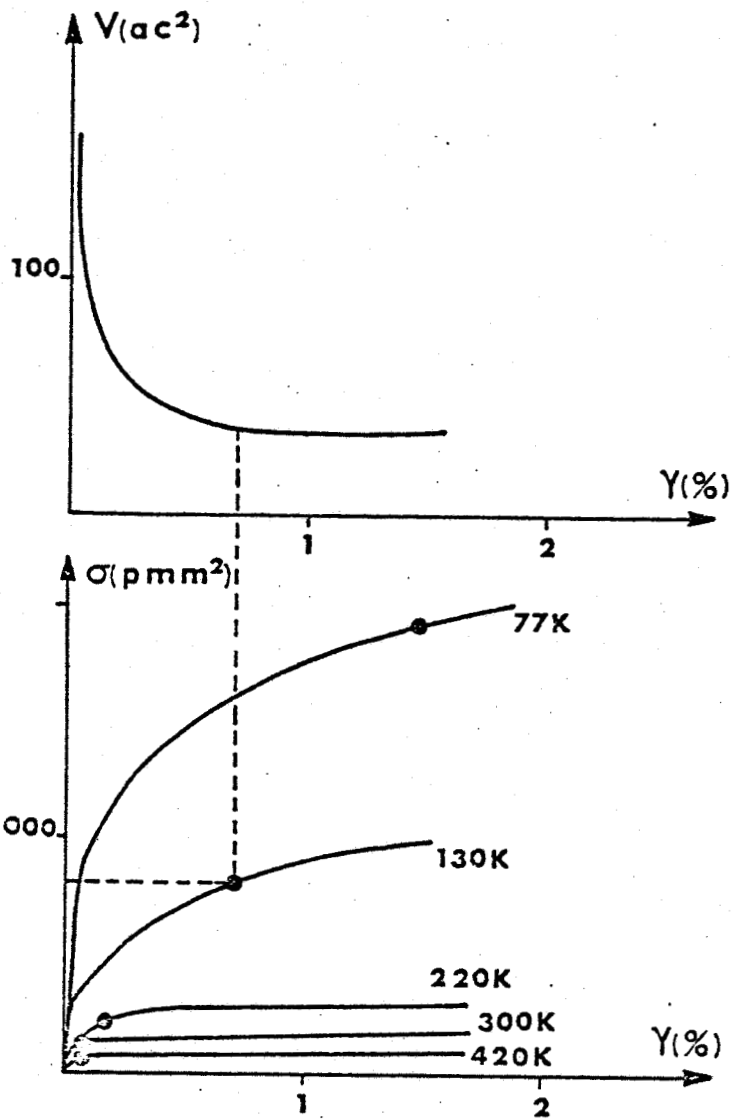


Figure 15  
Courbes contrainte - déformation

La figure du haut représente le volume d'activation en fonction de la déformation.

L'analyse des courbes (figure 15) et de  $V(\sigma)$  (figure 16) conduit dans le cas du double cisaillement à une limite élastique de l'ordre de  $1\,900\text{ g/mm}^2$  à  $T = 77\text{ K}$ . Le volume d'activation correspondant est de l'ordre de  $8\text{ ac}^2$ . Rappelons qu'à la même température, par compression, la limite élastique (dans l'orientation B, triangle standard) est égale à  $700\text{ g/mm}^2$  et le volume d'activation est de l'ordre de  $25\text{ ac}^2$ .



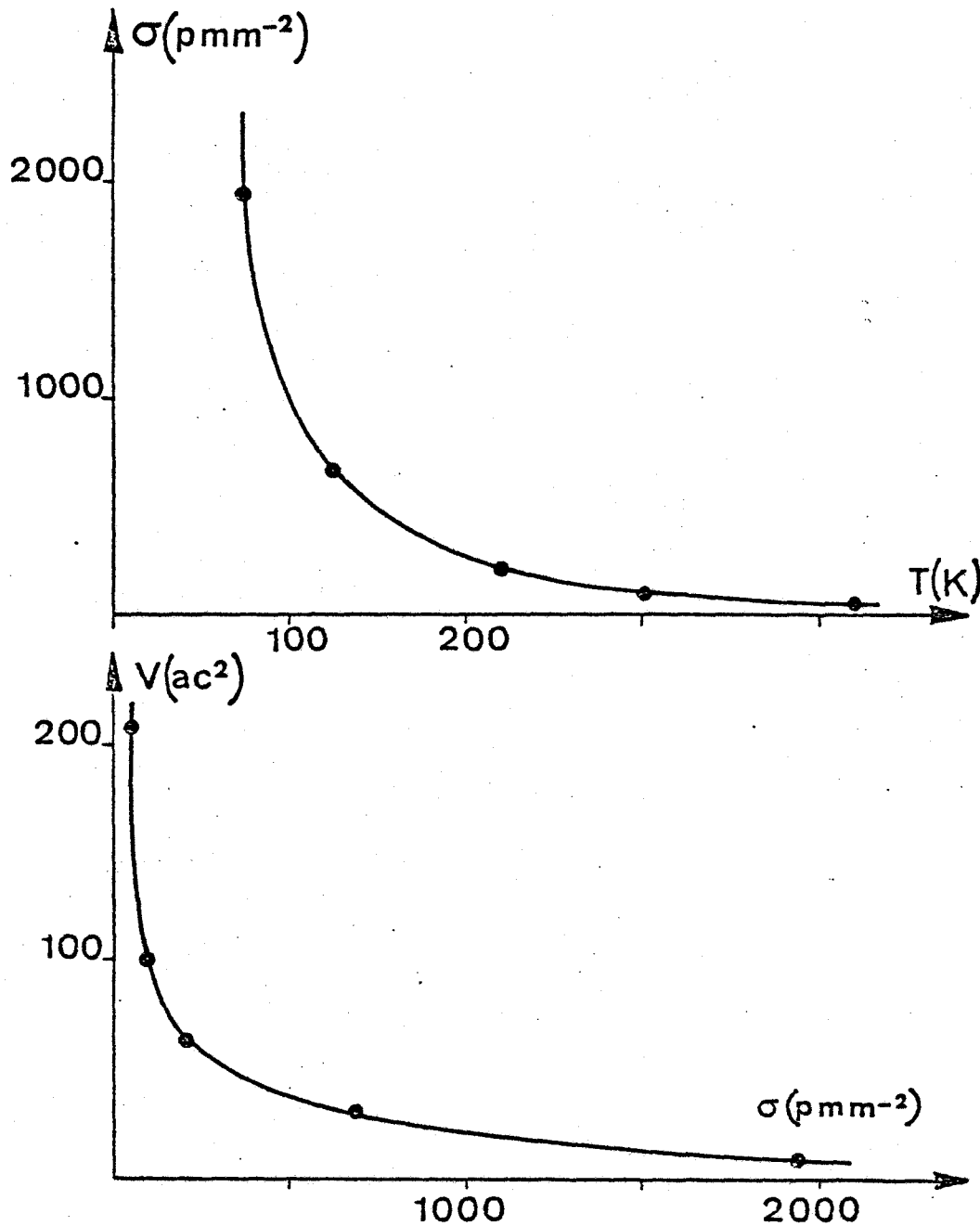


Figure 16

4-1.3 Sous-structure de dislocations observée après cisaillement

Le contrôle, par la méthode de Berg - Barrett, des échantillons cisailés ne révèle aucun contraste particulier. Cela signifie qu'aucune sous-structure de polygonisation n'est introduite dans le cristal par ce mode de déformation, contrairement aux expériences de compression uniaxiale. La distribution de dislocations laissée par déformation dépend donc fortement du mode de déformation choisi. Bien que l'origine de cette différence ne soit pas claire à présent, on peut supposer qu'elle est liée à la géométrie spécifique de chaque type d'essais ou aux contraintes inhomogènes introduites au niveau des fixations de l'éprouvette par l'appareil de déformation utilisé. Ceci montre que les sous-structures de dislocations obtenues après déformation ne sont pas forcément inhérentes au mode de déformation

mais sont peut être dépendantes de la réalisation expérimentale de l'appareil de déformation.

Les observations au microscope électronique à des tensions usuelles de 100 KV ne montrent qu'une faible densité de dislocations, principalement sous forme de débris. Ces débris ont été laissés probablement par le mouvement des dislocations  $\bar{c}$  vis qui elles même se sont échappées de l'échantillon très mince par action des forces image. Il a donc fallu effectuer les observations sur des lames plus épaisses en utilisant le pouvoir de pénétration plus important des microscopes à très haute tension.

Ces observations révèlent clairement (figure 17) la présence de longues dislocations  $\bar{c}$  vis, réparties homogènement dans le cristal. Aucune polygonisation n'est effectivement décelée, en bon accord avec l'observation "négative" en Rayons X. On remarque, occasionnellement, la présence de dipôles  $\bar{c}$  vis sur les photos (figure 18-a). La stabilité de tels dipôles se

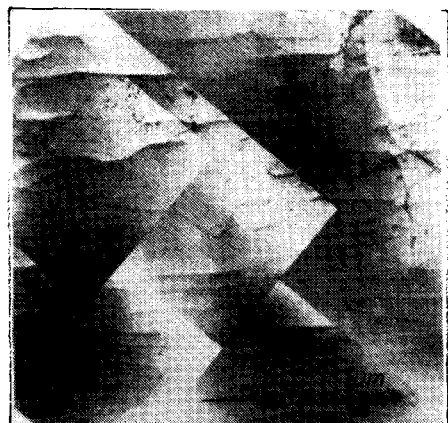


Figure 17 Sous-structure typique de dislocations  $\bar{c}$  vis observée au microscope électronique (600 KV). L'épaisseur de la lame mince est de l'ordre de  $1,5 \mu\text{m}$ .

$g = 0003$

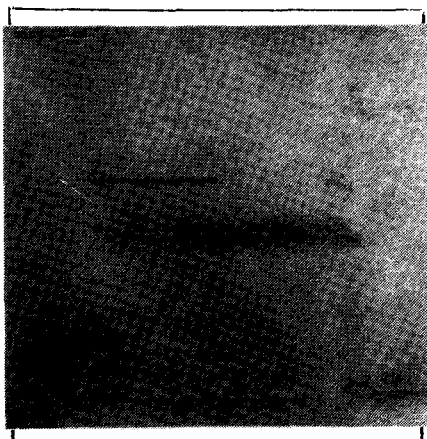


Figure 18 (a) Dipôle stable de dislocations  $\bar{c}$  vis (région plus fine de la lame mince).

(b) Représentation schématique du dipôle  $\bar{c}$  vis dissocié.

(b)



(a)

comprend si l'on admet une dissociation sessile des dislocations vis. La figure 18-b schématise une configuration de dissociation où l'attraction des différentes parties de deux vis dissociées stabilise la configuration en augmentant l'étendue des fautes d'empilement.

#### 4-2. ASYMETRIE DU GLISSEMENT DES DISLOCATIONS $\bar{c}$ VIS

La comparaison des résultats expérimentaux du glissement  $\bar{c}$  par cisaillement et par compression uniaxiale confirme l'effet d'orientation déjà signalé par Crampon et al. La limite élastique particulièrement élevée dans le cas du cisaillement conduit, en outre, à supposer que le glissement  $\bar{c}$  vis est asymétrique.

Afin de montrer cette particularité, nous comparons :

- 1) l'expérience de cisaillement double pour laquelle
  - le plan principal de glissement subit une contrainte  $\sigma$ , les deux autres plans une contrainte  $\sigma/2$
  - la limite élastique obtenue est élevée 1 900 g/mm<sup>2</sup> à 77 K ;
- 2) l'expérience de compression suivant la direction B du triangle standard pour laquelle
  - deux plans prismatiques subissent la même contrainte  $\sigma$ , le troisième une contrainte nulle
  - la limite élastique vaut 700 g/mm<sup>2</sup> à 77 K
  - le glissement (a priori possible) sur deux plans n'est jamais observé expérimentalement [45,46].

L'observation directe d'un grand nombre de dislocations  $\bar{c}$  vis, après cisaillement, confirme leur rôle prépondérant dans la détermination de la limite élastique, à basse température. Nous admettons que celle-ci est bien liée à la dissociation de la dislocation  $\bar{c}$  vis en trois parties.

Supposons qu'une telle dissociation soit réalisée (par exemple la dissociation symétrique représentée figure 19), et qu'elle corresponde à une énergie élastique  $u_1$ . La configuration symétrique que l'on obtient par inversion par rapport au point O n'est pas énergétiquement équivalente à la première puisque le tellure ne possède pas de centre de symétrie.

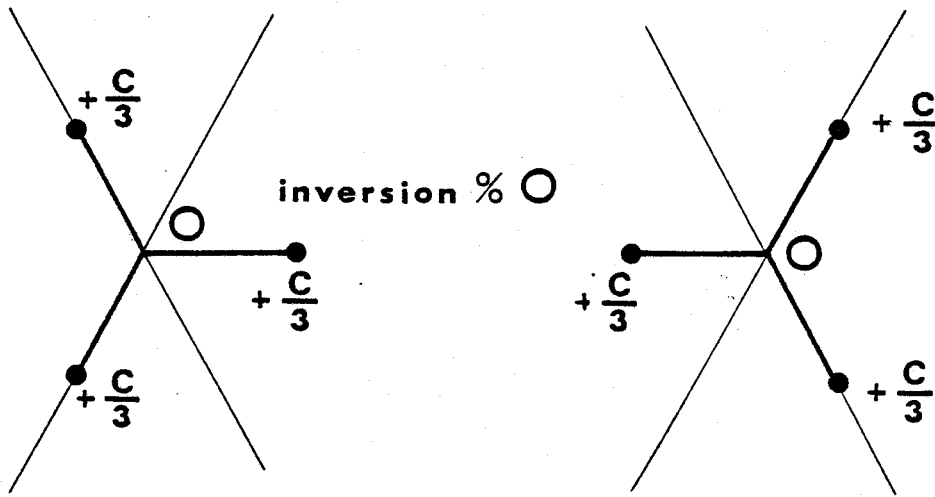


Figure 19

Nous admettons que l'énergie  $u_2$  de la deuxième configuration est prohibitive, si bien que celle-ci ne se produit jamais. Il n'y a donc qu'une seule configuration de dissociation symétrique.

Faute d'un calcul d'énergie d'une telle configuration, on peut penser, par analogie avec les métaux cubiques centrés qu'une configuration plus stable est obtenue lorsque deux fautes d'empilement se rejoignent le long d'une partielle  $c/3$  (figure 20). Appliquant l'opération de symétrie  $c_3$ , on voit qu'il y a donc trois configurations possibles de dissociation asymétrique.

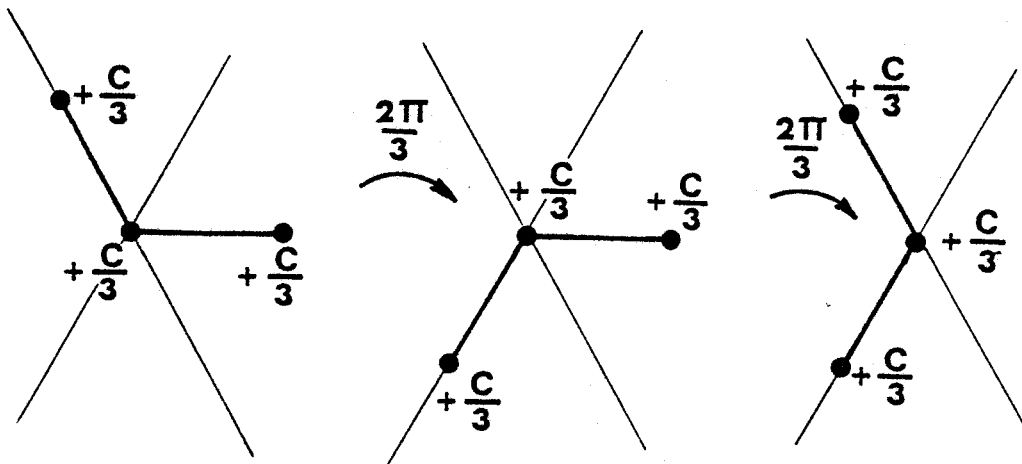


Figure 20

Dans cette hypothèse, examinons les situations expérimentales précitées.

■ 1) Expérience de cisaillement

Dans cette expérience, le plan de glissement est imposé par l'orientation de l'échantillon. Soit (a) ce plan. Suivant l'orientation des forces appliquées, la répartition des contraintes

- favorise la recombinaison des particules (figure 21-a). Cette orientation correspond à un glissement facile,
- favorise la dissociation (figure 21-b). La recombinaison doit alors se faire contre la contrainte. Cette orientation correspond à un glissement dur.

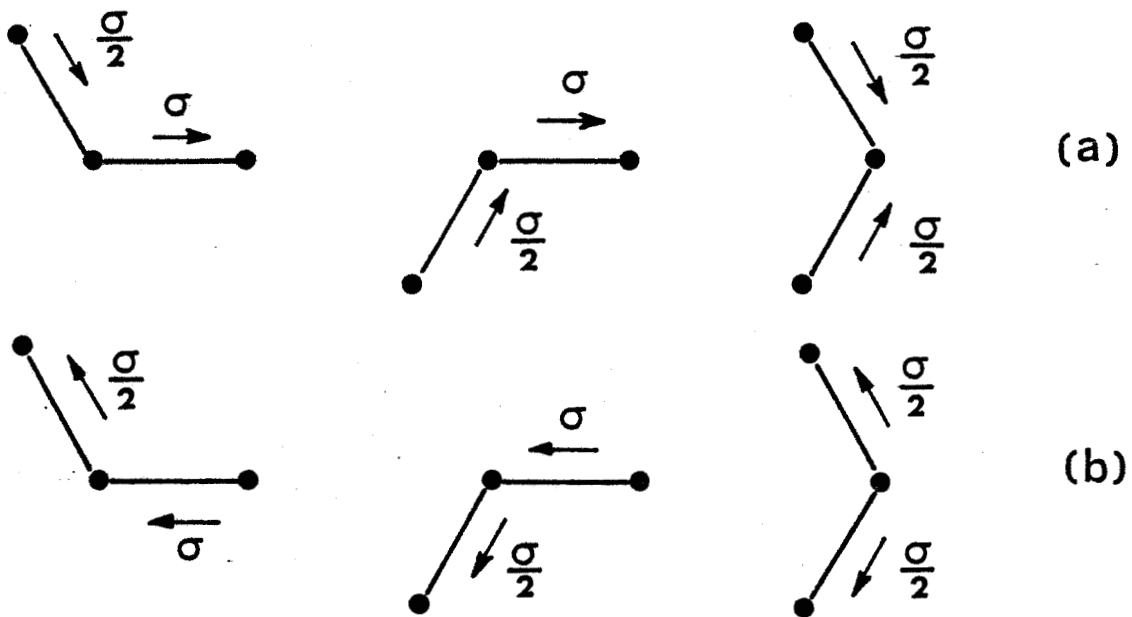


Figure 21

Le passage du premier au second cas s'obtient simplement en inversant les forces, c'est-à-dire en retournant par exemple l'échantillon par rapport à l'appareil de cisaillement.

Dans le cas du double cisaillement de l'expérience présente (figure 22), l'une des deux portions de l'échantillon se trouve forcément en

position dure. Ceci explique pourquoi la limite élastique obtenue ( $1\,900\text{ g/mm}^2$ ) \* est la plus élevée que l'on puisse trouver par effet d'orientation.

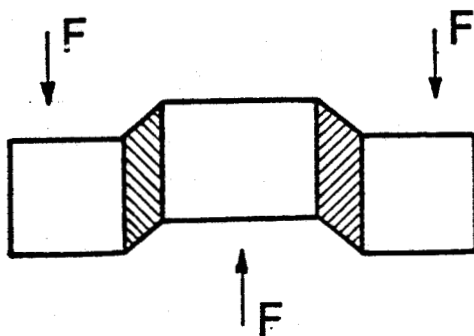


Figure 22

Dans le cas d'un cisaillement simple, cette asymétrie peut s'observer si l'on retourne l'échantillon. Nous avons tenté cette expérience. Les résultats confirment une différence dans la limite élastique obtenue pour l'une ou pour l'autre des orientations. Néanmoins, les difficultés expérimentales nous ont empêché de vérifier la valeur des volumes d'activation prédite dans les deux cas par ce modèle. Notons que dans le cas du sélénium, cet effet d'asymétrie devrait être plus marqué puisque l'énergie de liaison, très faible entre chaînes, favorise la dissociation.

■ 2) Compression suivant l'orientation (B) du triangle standard

Comme le montre la figure 23, deux plans subissent la même contrainte  $\bar{\sigma}$ , le troisième une contrainte nulle. Deux cas peuvent alors se produire.

- Suivant la répartition des contraintes, il existe, parmi les trois configurations de dissociation possibles, une configuration où la recombinaison

---

\* Lors du double cisaillement l'échantillon se casse généralement dans la portion subissant le glissement "mou". L'essai se déroule alors sur la seule portion correspondant à l'orientation "dure". Le dépouillement des courbes se fait dès lors en ne considérant qu'une seule portion cisailée ( $\sigma = F/S$  et non  $F/2S$ ).



est favorisée par la contrainte et où le glissement peut alors se faire suivant le plan (a). Dans ce cas, il n'existe pas de configuration permettant un glissement facile suivant (b) (figure 23-a).

- Il n'existe pas de configuration permettant le glissement facile suivant (a), on peut alors en trouver une le permettant suivant (b) (figure 23-b). Ceci explique pourquoi le glissement duplex n'est jamais observé et pourquoi cette orientation correspond à la limite élastique la plus faible.

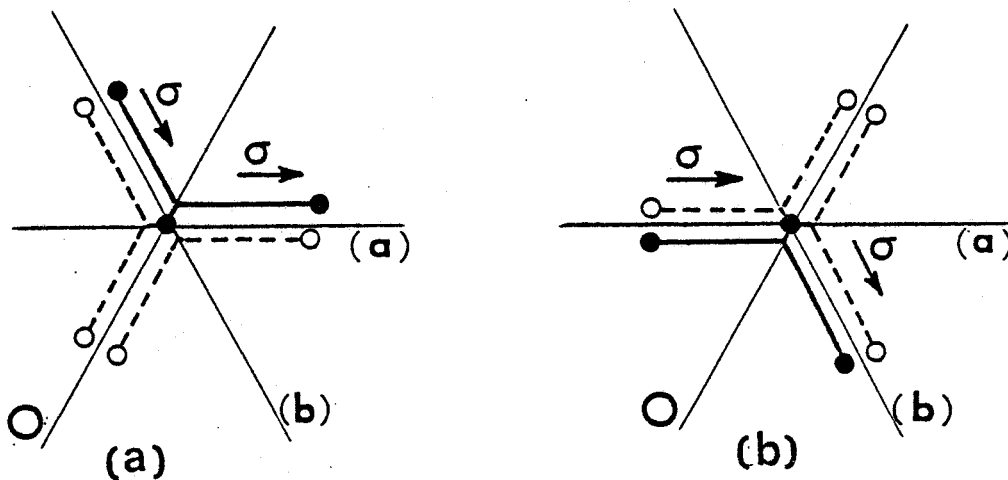


Figure 23

La limite élastique du glissement facile dans le cas du cisaillement est proportionnelle à la contrainte de recombinaison  $\sigma/2$ . Celle de l'expérience de compression est proportionnelle à  $\sigma$ . On voit qu'il doit exister un rapport 2 dans la limite élastique de ces deux cas, on devrait donc trouver une limite élastique de l'ordre de  $2 \times 700 \text{ g/mm}^2$  dans le cas du cisaillement facile. La valeur expérimentale que l'on obtient lors du double cisaillement ( $\sim 1900 \text{ g/mm}^2$ ) montre bien que le double cisaillement présente le caractère "dur".

Une analyse détaillée du processus de recombinaison suivant Escaig [60] conduit à une valeur théorique de la limite élastique du glissement dur en cisaillement de l'ordre de 3 fois la limite élastique de l'expérience de compression dans la direction B. Elle conduit aussi à un rapport 3 dans la valeur des volumes d'activation. Les résultats expérimentaux ( $1900/700 = 2,7$  et  $25/8 = 3,1$ ) sont en excellent accord avec ce modèle de glissement asymétrique.

## §-5. CONCLUSION

La recherche de chemins de déformation conduisant à l'obtention de sous-structures simples nous a permis de préciser les propriétés du glissement  $\bar{c}$ . Contrairement au cas des métaux cubiques face centrés où la multiplicité des systèmes de glissement empêcherait l'observation d'un tel phénomène d'asymétrie, le tellure apparaît être un cas idéal pour l'étude de telles propriétés.

Ce travail conduit à trois cas de sous-structures simples permettant l'investigation expérimentale des propriétés électriques

- des dislocations  $\bar{a}$  coin, engagées dans deux types de sous-structures de polygonisation,
- des dislocations vis, homogènement réparties dans le cristal.

**III - MESURE DES COEFFICIENTS  
GALVANOMAGNETIQUES  
RESULTATS EXPERIMENTAUX**

Les propriétés générales du tellure ont fait l'objet de plusieurs articles ou ouvrages de revue et de colloques internationaux dont les comptes rendus ont été publiés. Citons l'article de revue de Blakemore et all (1962) [33] ; les comptes rendus du Symposium de Montréal "The Physics of Selenium and Tellurium", de Stüke (1967) [76] ; plus récemment, l'ouvrage très complet de P. Grosse : "Die Festkörpereigenschaften von Tellur" (1969) [67]. Aussi, nous limitons le premier paragraphe de ce chapitre à une description sommaire des propriétés de transport du tellure dont la connaissance est nécessaire à la compréhension de ce travail.

### §-1. PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT DU TELLURE

Les phénomènes de transport électrique isotherme sont décrits, de manière générale à l'aide des coefficients galvanomagnétiques  $\rho$  tels que :

$$E_i = \rho_{ij} I_j + \rho_{ijk} I_j B_k + \rho_{ijkl} I_j B_k B_l \quad (1-1)$$

où  $\rho_{ij}$ ,  $\rho_{ijk}$  et  $\rho_{ijkl}$  définissent la résistivité, l'effet Hall et la magnétorésistance.

L'invariance des propriétés galvanomagnétiques par rapport aux opérations de symétrie du groupe ponctuel permet de réduire la structure de ces tenseurs. Pour le tellure, cette réduction a été effectuée par Okada [77].

Le groupe ponctuel (3.2) du tellure est constitué d'un axe de rotation d'ordre 3 (l'axe  $\bar{c}$ ) et de trois axes de symétrie perpendiculaires à  $\bar{c}$ . Dans le système d'axes défini au chapitre précédent (figure 1), ces symétries conduisent à :

$$(\rho_{ij}) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{pmatrix} \quad (1-2)$$

$$(\rho_{ijk}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & -\rho_{231} & | & 0 & \rho_{123} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{231} & | & 0 & 0 & 0 & | & -\rho_{123} & 0 & 0 \\ 0 & -\rho_{231} & 0 & | & \rho_{231} & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1-3)$$

Ces deux tenseurs ne possèdent que deux composantes indépendantes  $\rho_{11}$ ,  $\rho_{33}$  ;  $\rho_{231} \equiv R_1$  et  $\rho_{123} \equiv R_3$ . Les mesures expérimentales ont très vite confirmé cette anisotropie des propriétés galvanomagnétiques, (Bottom, 1952, [78] ; Roth, 1959, [79]).

Dans la région extrinsèque, le tellure est un semi-conducteur p quelle que soit la nature des impuretés. Ce fait n'est pas encore bien compris. L'effet Hall s'inverse lorsque la conductivité devient intrinsèque. Nous illustrons ce fait, figure 1, par un ensemble de courbes expérimentales obtenues sur l'un de nos échantillons de référence. Sur ce cas particulier le point d'inversion se situe à 245 K. Au delà de cette température, la conductivité est en majorité assurée par les électrons. La température d'inversion dépend très sensiblement de la densité de porteurs extrinsèques [67]. Elle peut donc servir de test pour en déceler toute variation.

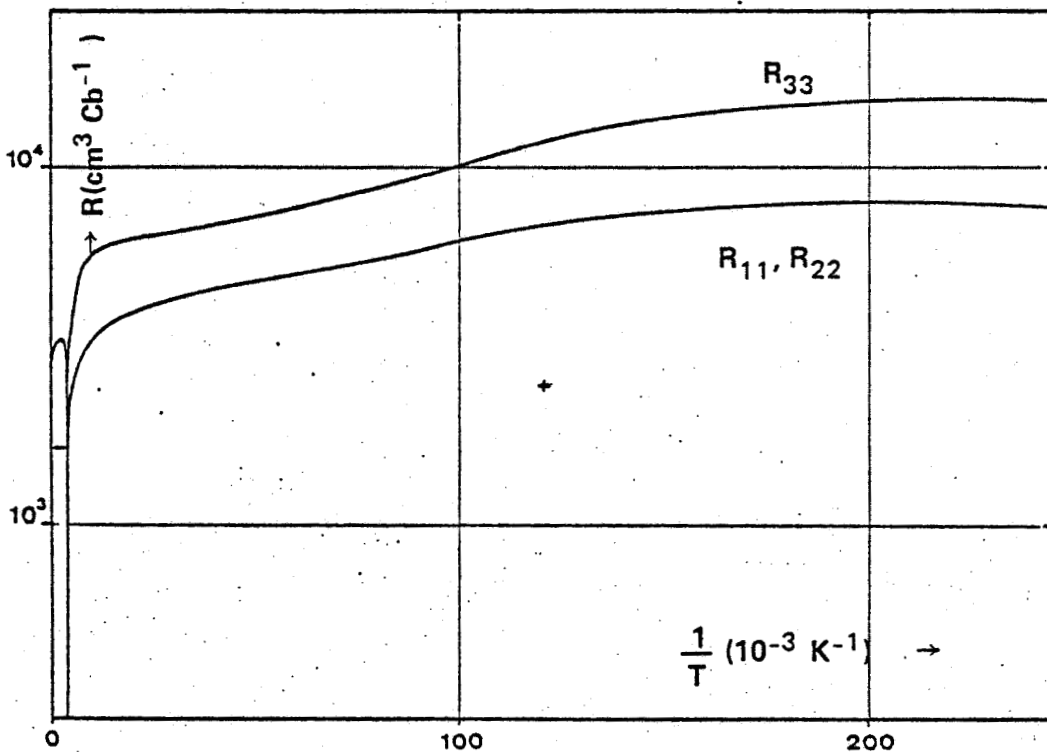


Figure 1

A plus haute température ( $T \sim 500$  K), le tellure se caractérise par une anomalie de l'effet Hall qui présente une seconde inversion indépendante de la pureté des échantillons [78]. Cette seconde inversion est une propriété intrinsèque du tellure. Elle a été attribuée initialement à la présence de deux bandes de conduction (Callen [80], Nussbaum [81]). Les mesures d'optique effectuées ultérieurement ont plutôt indiqué une multiplicité de la bande de valence.

Dans le domaine extrinsèque, la mesure de l'anisotropie de l'effet Hall (ici  $R_3/R_2 \sim 2$ ) n'est pas reproductible. Parfener et al [82] ont montré que ce rapport tendait vers 1,1 dans les cristaux contenant "peu" de défauts. En effet, cette anisotropie, en partie liée à la différence des masses effectives ( $m^* \parallel c, m^* \perp \bar{c}$ ), dépend également du type de diffusion contrôlant la conductivité (par l'intermédiaire du temps de relaxation  $\tau$  ( $R \sim \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2$ )). Nous avons constaté que ce rapport d'anisotropie, mesuré sur des échantillons recuits était effectivement plus faible (comparer les figures 1 et 10)\*.

Nous reportons sur la figure 2 la mesure des coefficients de conductivité  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{33}$  obtenue sur l'un de nos échantillons de référence. Ces courbes comportent essentiellement trois parties.

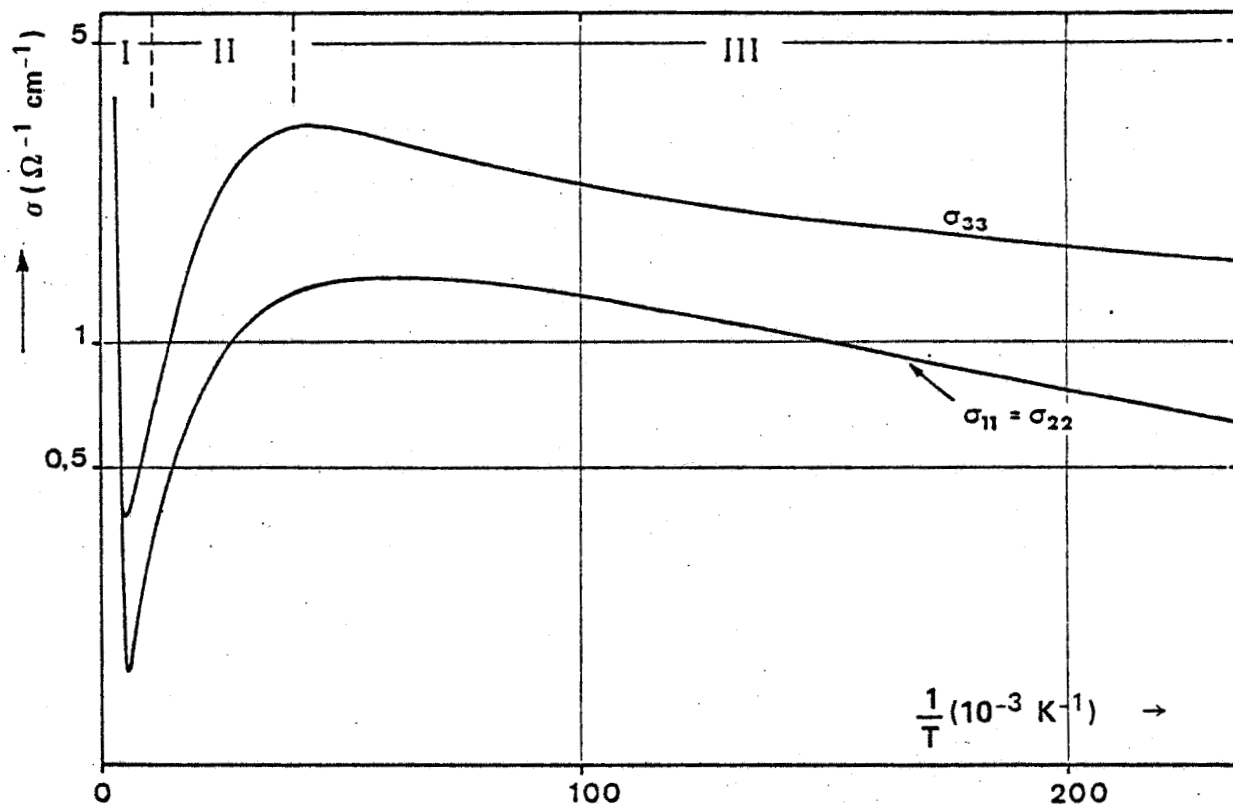


Figure 2

\* Cet effet ne peut être attribué aux dislocations de croissance seules dont la densité diminue lors du recuit. La présente étude montre que pour des densités aussi faibles que  $10^4 \text{ cm}^{-2}$  on ne doit attendre aucune modification notable des propriétés de transport. Ce phénomène n'est donc pas bien compris.

- Le domaine des hautes températures (I) correspond à la conductivité intrinsèque. La pente de la courbe est cohérente avec la valeur de la largeur de la bande interdite

$$E_G = 0,33 \text{ eV [67] .}$$

- Lorsque la température décroît (II), on assiste à une augmentation de conductivité liée à la disparition progressive des phonons acoustiques. La mobilité Hall obtenue dans ce domaine devrait alors varier comme  $T^{3/2}$ . En fait l'exposant  $3/2$  est rarement obtenu expérimentalement.
- La dernière partie de la courbe (III), où la conductivité décroît, correspond à la diminution du taux d'ionisation des impuretés acceptrices. Le prolongement des mesures à plus basse température ( $T \ll 4,2 \text{ K}$ ) montre cependant que l'on n'arrive jamais à geler totalement les centres accepteurs. Dans ce domaine de très basse température, l'expérience révèle un certain nombre d'anomalies non encore parfaitement expliquées [83,84,85]

## §-2. ÉTUDE PHÉNOMÉNOLOGIQUE DE L'INFLUENCE DES DISLOCATIONS SUR LES PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT

Les structures tensorielles (1-2) et (1-3) s'obtiennent immédiatement dès que l'on postule l'invariance macroscopique du milieu par rapport aux opérations de symétrie du groupe ponctuel. Cela signifie que les hétérogénéités microscopiques telles que les dislocations de croissance, en faible densité ( $10^4$  à  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ ) ne perturbent pas la forme de ces tenseurs aussi longtemps que l'on a affaire à des distributions homogènes et de faible densité de tous les types de dislocations.

Par contre si un excès de dislocations d'un type donné est introduit dans le cristal, par exemple par déformation plastique, certaines de ces opérations de symétrie seront supprimées.

La symétrie peut être macroscopiquement réduite par :

- un type prédominant de vecteurs de Burgers
- une orientation privilégiée des lignes de dislocation
- une distribution hétérogène des dislocations (sous-structure de polygonisation).

La réduction du nombre d'éléments de symétrie dépend donc du cas envisagé. Aussi, nous étudions plus particulièrement les différents cas de sous-structure rencontrés dans l'étude expérimentale.

## 2-1. LES DISLOCATIONS $\bar{a}$ COIN

Nous avons montré, dans le chapitre précédent, que lors d'une déformation par glissement  $\bar{a}$ , à l'ambiante, les dislocations de glissement  $\bar{a}_1$  s'engagent dans des parois de polygonisation grossières parallèles au plan de glissement primaire. Leur champ de contrainte à longue distance  $y$  est écranté par la présence de dislocations secondaires  $a_j$ . Ces parois provoquent des flexions en moyenne alternées. Seule l'opération de symétrie  $c_2$  autour de l'axe  $\bar{a}_1$  subsiste. Le vecteur de Burgers moyen et l'orientation de la paroi rendent anisotropes les propriétés du plan de base (0001).

Après recuit, la sous-structure obtenue est essentiellement formée de sous-joints de flexion parallèles au plan prismatique de seconde espèce. Comme dans le cas précédent, ces parois provoquent, en moyenne, des flexions alternées ; la seule opération subsistante est encore l'opération  $c_2$  autour de l'axe  $\bar{a}_1$ .

Dans ces deux cas le groupe ponctuel du cristal est devenu monoclinique. La structure des tenseurs décrivant les effets galvanomagnétiques devient alors :

■ pour la résistivité :

$$(\rho'_{ij})_{\bar{a}} = \begin{pmatrix} \rho'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho'_{23} & \rho'_{23} \\ 0 & \rho'_{23} & \rho'_{33} \end{pmatrix} \quad (2-1.1)$$

où les trois coefficients diagonaux sont maintenant indépendants et où les termes non diagonaux ( $\rho'_{23}$ ) peuvent également apparaître.



■ pour l'effet Hall :

$$(\rho'_{ijk})_a = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} ij 1 & ij 2 & ij 3 \end{array} \\ \left( \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 & \rho'_{122} & \rho'_{132} & 0 & \rho'_{123} & \rho'_{133} \\ 0 & 0 & \rho'_{231} & -\rho'_{122} & 0 & 0 & -\rho'_{123} & 0 & 0 \\ 0 & -\rho'_{231} & 0 & -\rho'_{132} & 0 & 0 & -\rho'_{123} & 0 & 0 \end{array} \right) \end{array}$$

(2-1.2)

où les coefficients Hall, conduisant aux effets transversaux habituels  $\rho_{231} = R_1$ ,  $\rho_{132} = R_2$ ,  $\rho_{123} = R_3$ , sont indépendants et où un effet Hall longitudinal devient possible car les termes  $\rho_{122}$  et  $\rho_{133}$  sont a priori non nuls.

L'existence de termes non diagonaux  $\rho_{ij}$  dans le tenseur de résistivité signifie que, même en l'absence de champ magnétique, un courant de direction  $j$  peut engendrer une différence de potentiel dans une direction  $i$  orthogonale à  $j$ . Les termes du type  $\rho_{ijj}$  du tenseur de l'effet Hall signifient qu'il s'établit une tension proportionnelle à  $B$  dans une direction  $i$  orthogonale au courant  $j$  même lorsque celui-ci est parallèle au champ magnétique.

## 2-2. LES DISLOCATIONS VIS

Ces dislocations introduites au moyen d'expérience de cisaillement à basse température, sont homogènement distribuées dans l'échantillon avec des vecteurs de Burgers  $+\bar{c}$  ou  $-\bar{c}$  en nombre pratiquement égal. L'orientation de la ligne de dislocation et de son vecteur de Burgers étant parallèle à l'axe  $\bar{c}$ , on voit que ce type de dislocation ne doit pas affecter la structure des tenseurs de résistivité et d'effet Hall. Seules peuvent être modifiées les valeurs des différents coefficients.

## §-3. PRÉPARATION DES ÉCHANTILLONS

Nous avons préparé un nombre d'éprouvettes suffisant pour permettre la mesure systématique de tous les coefficients indépendants dans chacun des cas expérimentaux rencontrés. Le tableau 1 représente l'orientation de l'éprouvette, de la tension, du courant et du champ magnétique en fonction du coefficient galvanomagnétique à mesurer.

$\rho_{EJB}$						
$\rho_{EJ}$						
		$-\rho_{123}$	$-\rho_{132}$		$-\rho_{123}$	$-\rho_{122}$
	$\rho_{11}$					
		$\rho_{123}$	$-\rho_{231}$	$\rho_{122}$		
	$\rho_{22}$		$\rho_{23}$		$\rho_{23}$	
		$\rho_{132}$	$\rho_{231}$	$\rho_{133}$		
	$\rho_{33}$		$\rho_{23}$		$\rho_{23}$	

Tableau 1

Etant donné qu'il est impossible de trouver une forme particulière de l'éprouvette permettant la mesure simultanée de différents coefficients, il est nécessaire, pour que les observations soient comparables (lors de la recherche d'un effet d'anisotropie par exemple) de pouvoir extraire les échantillons de la même éprouvette de déformation et qui plus est, d'une région de cette éprouvette où la déformation ainsi que la sous-structure de dislocations laissée est la plus uniforme possible. Cette remarque montre la nécessité de déformer des éprouvettes de grande taille.

Dans le cas des dislocations à coin, les échantillons de déformation ont la forme indiquée figure 3. La hauteur (15 à 25 mm), l'épaisseur (10 mm) et leur forme particulière permettent l'extraction dans la même région ("centre" de l'éprouvette) de trois échantillons nécessaires à la mesure des trois coefficients diagonaux  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$  de la conductivité et des trois coefficients  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_3$  de l'effet Hall transverse.

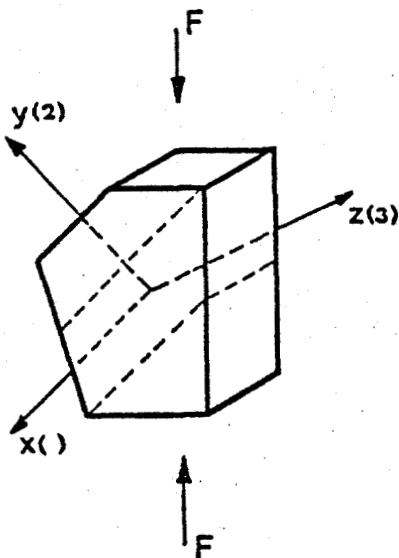


Figure 3 Forme de l'échantillon de compression en glissement  $\bar{a}$ .

Le recuit des éprouvettes contenant les dislocations  $\bar{a}$  coin a été effectué dans une enveloppe de quartz, sous atmosphère d'argon ultra-pur, de façon à éviter toute contamination des échantillons.

Dans le cas des dislocations  $\bar{c}$  vis, les éprouvettes de cisaillement permettent d'obtenir des lames cisailées de dimension  $7 \times 7 \times 2 \text{ mm}^3$  d'où l'on peut tirer les éprouvettes parallèles et perpendiculaires à l'axe  $\bar{c}$  (mesures de  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{33}$ ).

Le façonnage des éprouvettes est effectué à l'aide de la scie et de la polisseuse chimique [86]. Les éprouvettes sont ensuite polies chimiquement pendant 10 à 20 mm par simple immersion dans un mélange d'oxyde de chrome (1p) d'acide fluorhydrique (2p) et d'eau (5p) [87]. Cette préparation minutieuse est identique au traitement de surfaces nécessaires aux observations par Rayons X. Ce procédé, qui permet effectivement l'observation de la sous-structure interne des éprouvettes, supprime, lors des mesures électriques, tout artefact provenant des couches superficiellement écrouies par le frottement de la bande de la polisseuse.

Les différents contacts électriques sont effectués au moyen de fils d'or, ( $\phi = 0,1$  et  $0,2 \text{ mm}$ ), par fusion locale du semi-conducteur. Cette fusion locale est obtenue par la décharge électrique rapide d'un condensateur dans le fil d'or. La région de soudure, très petite (2 à 3  $10^e$  de mm) devant la taille de l'éprouvette n'affecte pas la validité des mesures électriques.

De manière générale, les mesures électriques ont été effectuées quelques mois après l'expérience de déformation plastique. Ce recuit à

température ambiante permet aux défauts ponctuels créés par le mouvement des dislocations de se recombinaer. Cette précaution élimine toute variation du nombre de porteurs libres avec le temps. Les mesures électriques sont reproductibles dans le temps.

#### §-4. RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

L'utilisation de faibles champs magnétiques ( $B < 5 \text{ kG}$ ) permet d'éliminer des mesures galvanomagnétiques toute contribution de second ordre. Dans ce domaine l'effet Hall est effectivement une fonction linéaire de  $B$ .

Les différentes mesures ont été obtenues en courant continu. Lors de la mesure, l'échantillon n'est pas collé sur un support mais est suspendu aux différents fils de contact. Ceci évite toute fracture ou déformation accidentelle pouvant provenir de la contraction différentielle de l'échantillon et du support pendant le refroidissement.

##### 4-1. DISLOCATIONS à COIN

###### 4-1.1 Cas des "sous-joints" prismatiques de première espèce $\{10\bar{1}0\}$

Les différentes mesures galvanomagnétiques reportées figures 4 et 5 montrent que la dégénérescence des coefficients  $\rho$  disparaît pour les échantillons déformés. De plus il a été possible de mettre en évidence un effet Hall longitudinal relié au coefficient  $\rho_{212}$ .

La dégénérescence basale des cristaux non déformés ( $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ ,  $\rho_{321} = -\rho_{312}$ ) confirme que la sous-structure de leurs dislocations de croissance est suffisamment symétrique et que leur densité est suffisamment faible, pour ne pas détruire, macroscopiquement du moins, l'opération de symétrie  $c_3$ . Par contre dans les échantillons déformés, l'introduction sélective de familles de dislocations lève effectivement la dégénérescence des propriétés galvanomagnétiques dans le plan de base. Les mesures mettent en évidence trois coefficients diagonaux différents pour la conductivité ainsi que pour l'effet Hall.

Lors de la mesure du coefficient  $\rho_{213} \equiv -R_3$ , l'angle  $\alpha$  entre le champ Hall et le champ magnétique, correspondant à l'effet Hall maximum,

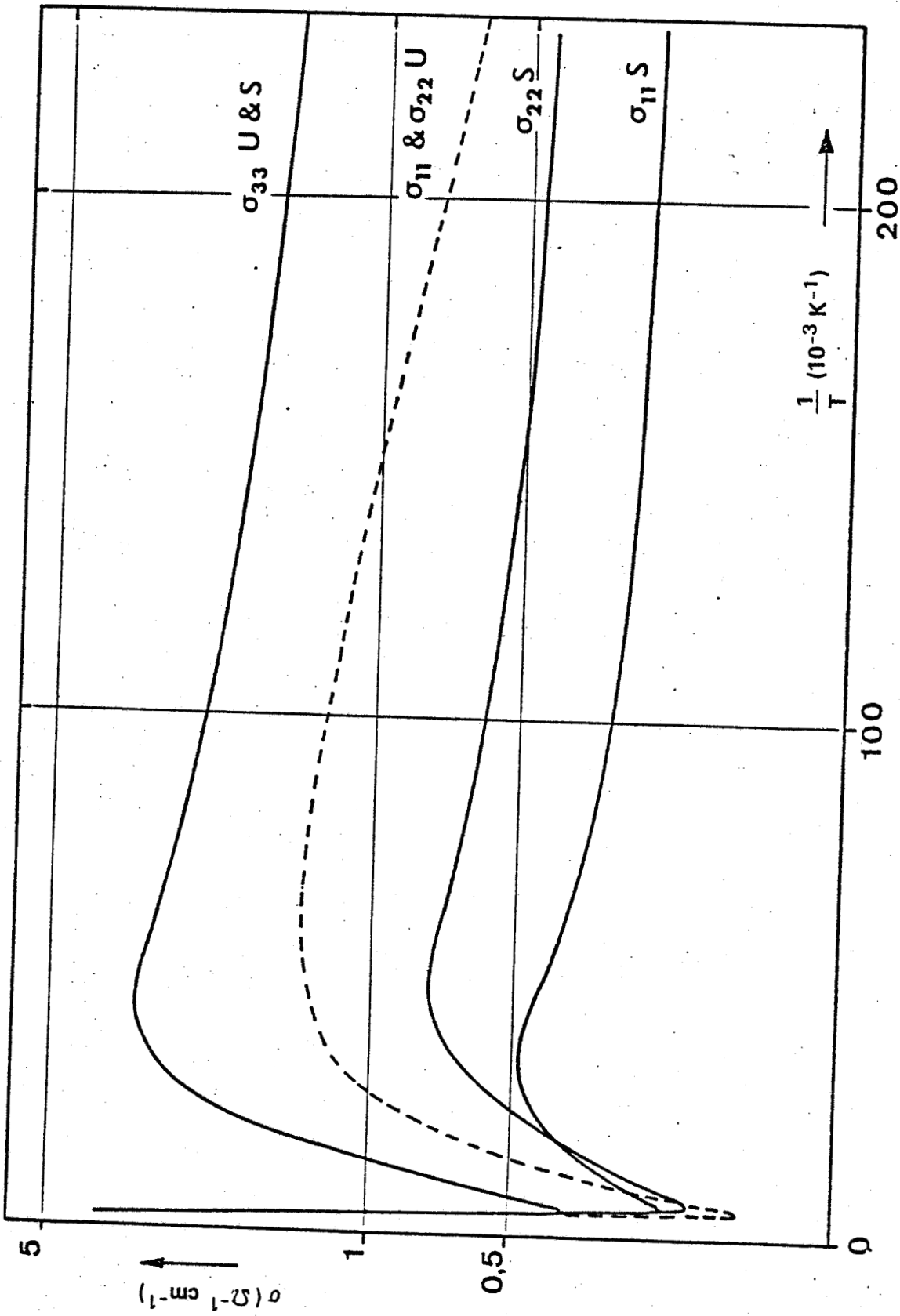


Figure 4 Mesure de conductivité. U échantillons non déformés, S échantillons déformés en glissement  $\bar{a}$ .



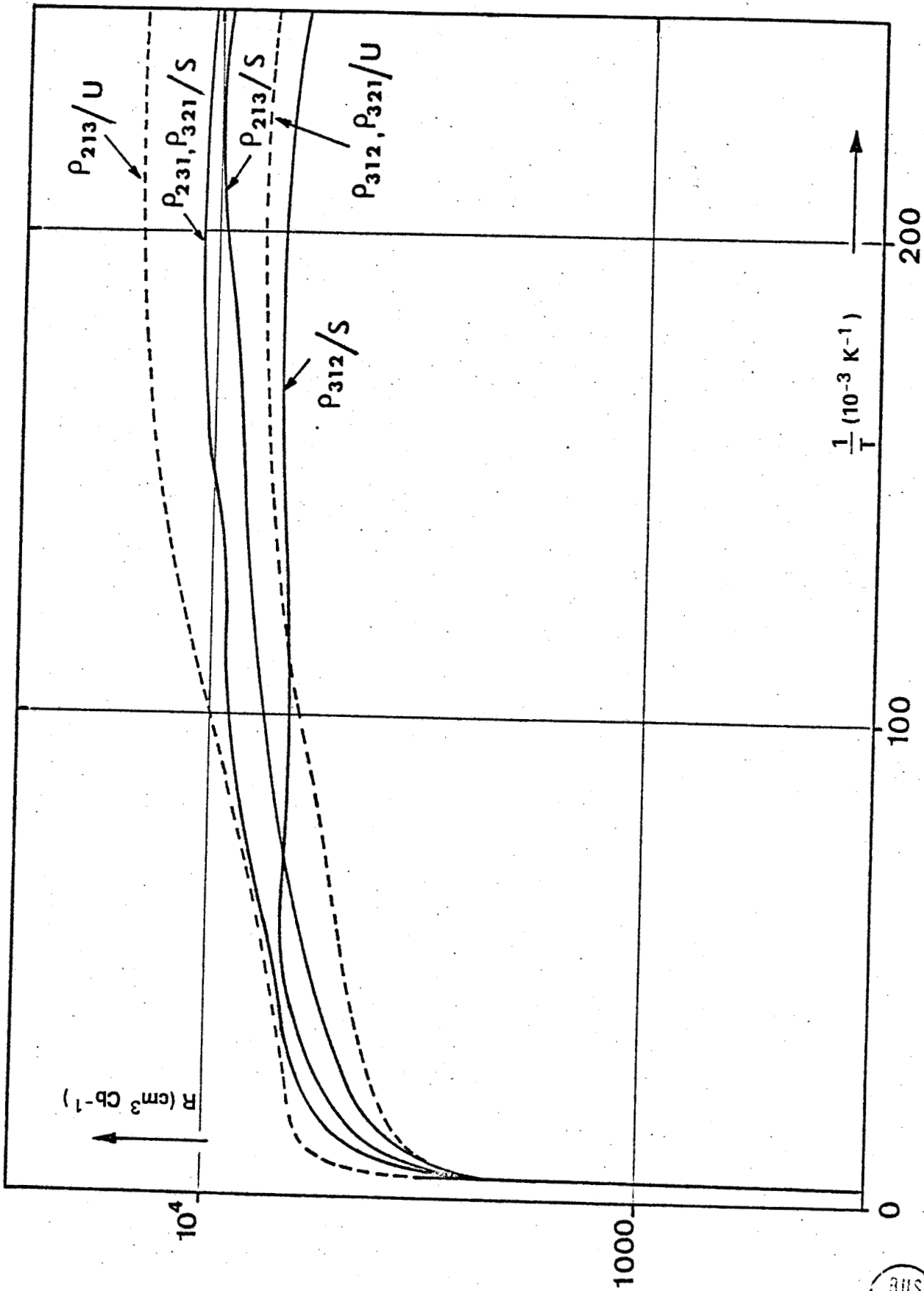


Figure 5 Coefficients d'effet Hall. U échantillons non déformés, S échantillons déformés en glissement  $\bar{a}$ .

n'est pas égal à  $90^\circ$ , valeur normale obtenue sur l'échantillon non déformé, mais est de l'ordre de  $60^\circ$  ( $\pm 10^\circ$ ) pour l'échantillon déformé. La grande imprécision de cette valeur vient du fait qu'il est expérimentalement difficile de positionner dans un même plan les trois contacts permettant la mesure de la tension Hall. Néanmoins, l'analyse de la symétrie des propriétés galvanomagnétiques du paragraphe 2, montre que lors de la mesure de  $\rho_{213}$ , entre également en compte la composante  $\rho_{212}$ . La valeur totale  $E_2$  de la tension Hall, pour le champ magnétique orienté dans le plan (1,3) est alors (figure 6) :

$$E_2 = \rho_{212} I_1 B \cos \alpha + \rho_{213} I_1 B \sin \alpha \quad (4-1.1.1)$$

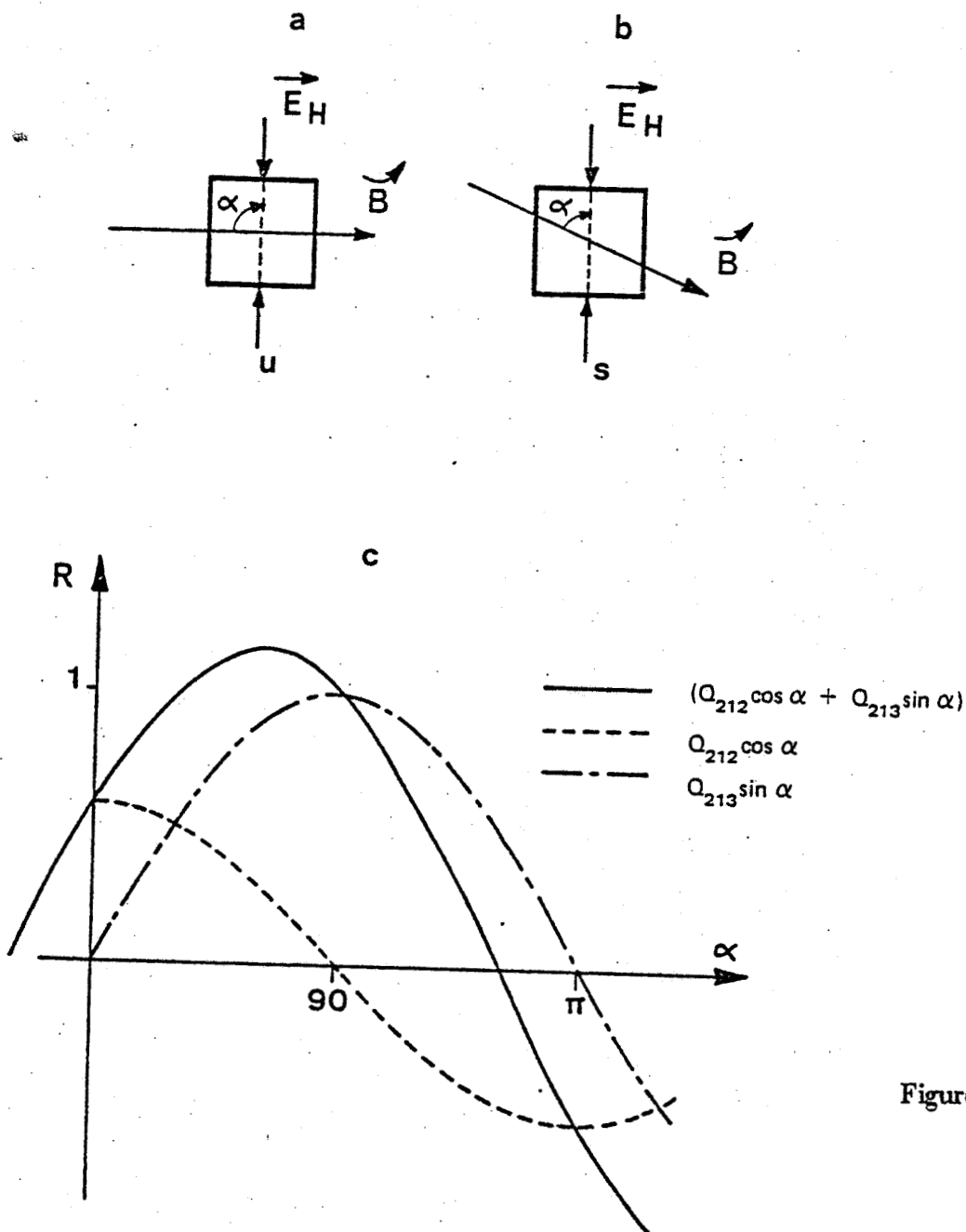


Figure 6

La valeur maximum de  $E_2$  est obtenue lorsque

$$\rho_{212} = \rho_{213} \cotg \alpha_{MAX} \approx 0,6 \rho_{213} \quad (4-1.1.2)$$

Ceci montre que l'effet Hall longitudinal existe et est du même ordre de grandeur que l'effet Hall transverse. Cette mesure a été effectuée pour tester la réalité et évaluer l'ordre de grandeur de l'effet Hall longitudinal a priori possible dans les échantillons déformés. En fait, la difficulté d'obtenir une mesure précise de ces coefficients supplémentaires a empêché leur étude systématique. Nous n'avons pas tenté d'interpréter ce phénomène.

D'autre part, l'utilisation de la méthode à trois contacts pour la mesure de l'effet Hall rend impossible la résolution des termes non diagonaux ( $\rho_{23}$ ) du tenseur de résistivité. En effet, cette méthode exige en l'absence du champ magnétique le réglage à zéro de la tension transverse (figure 7). Par conséquent toute tension transverse qui pourrait apparaître, même en champ magnétique nul à cause d'un coefficient non diagonal, est systématiquement éliminée de la mesure. Notons cependant que le réglage à zéro de la tension transverse, en champ magnétique nul dépend de la température à laquelle on effectue la mesure. Il doit être systématiquement réajusté dès que la température a varié. Ceci est généralement attribué au fait que l'échantillon n'est pas parfaitement orienté et que l'on mesure systématiquement la contribution d'un autre terme  $\rho_{ii}$  du tenseur de conductivité. Dans le cas des échantillons déformés cette variation pourrait également provenir de l'existence de termes non diagonaux  $\rho_{ij}$ .

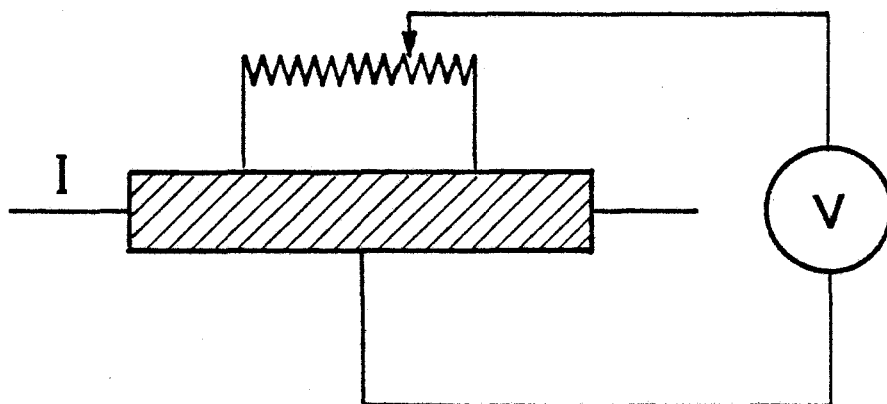


Figure 7



Des mesures galvanomagnétiques reportées figures 4 et 5, notons les résultats principaux suivants :

- 1) La valeur de la composante  $\sigma_{33}$  n'a pas été modifiée par la présence des dislocations et ceci dans tout le domaine de température étudié (4,2 à 300 K). Ce fait suggère que la densité de porteurs libres n'a pas varié de façon notable devant le nombre de porteurs libres initialement présents dans le cristal ( $6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ). Il serait, en effet, étonnant qu'une variation de la mobilité des porteurs  $\Delta\mu(T)$  compense systématiquement la variation de leur densité  $\Delta\rho(T)$  dans tout le domaine de température.
- 2) La température du premier point d'inversion de l'effet Hall (245 K dans le cas présent), dépendant fortement du nombre de porteurs extrinsèques, n'est pas non plus affectée par la présence des dislocations. Ce fait confirme que la densité de porteurs libres est la même pour les échantillons déformés et non déformés.

Ces résultats expérimentaux (1) et (2) montrent donc que les dislocations à coin n'affectent pas (ou affectent de façon peu notable) la densité de porteurs libres des échantillons.

- 3) La variation importante de la conductivité provoquée par les dislocations signifie donc la réduction de la mobilité des porteurs libres. Les dislocations à coin agissent comme centres diffuseurs des porteurs libres.

La dispersion des coefficients Hall en fonction de l'orientation choisie pour la mesure peut alors être attribuée à l'anisotropie du temps de relaxation intervenant dans le facteur de diffusion.

De façon à calculer la mobilité réciproque des porteurs libres, nous avons adopté pour le coefficient Hall la valeur moyenne

$$\langle R \rangle = \frac{R_1 + R_2 + R_3}{3}$$

dans tout le domaine extrinsèque. La mobilité réciproque  $\mu^{-1}$  induite par les dislocations est obtenue en appliquant la loi de Matthiessen :

$$\mu_{\text{Déf}}^{-1} - \mu_{\text{N Déf}}^{-1} = \mu_{\text{dislo}}^{-1} \quad (4-1.1.3)$$

La figure 8 représente  $\mu_{\text{dislo}}^{-1}$  pour les diverses orientations du courant. On constate :

- qu'il n'y a pas réduction de la mobilité des porteurs libres lorsque le courant est parallèle aux lignes de dislocations ( $\mu_{33 D}^{-1} = \mu_{33 N D}^{-1}$ )
- que la mobilité réciproque des porteurs libres induite par les dislocations à coin est anisotrope. L'effet de diffusion le plus fort apparaît lorsque le courant est parallèle aux parois prismatiques (de première espèce) des dislocations. A basse température, le rapport d'anisotropie ( $\mu_{22}/\mu_{11}$ )<sub>dislo</sub> est de l'ordre de 3.

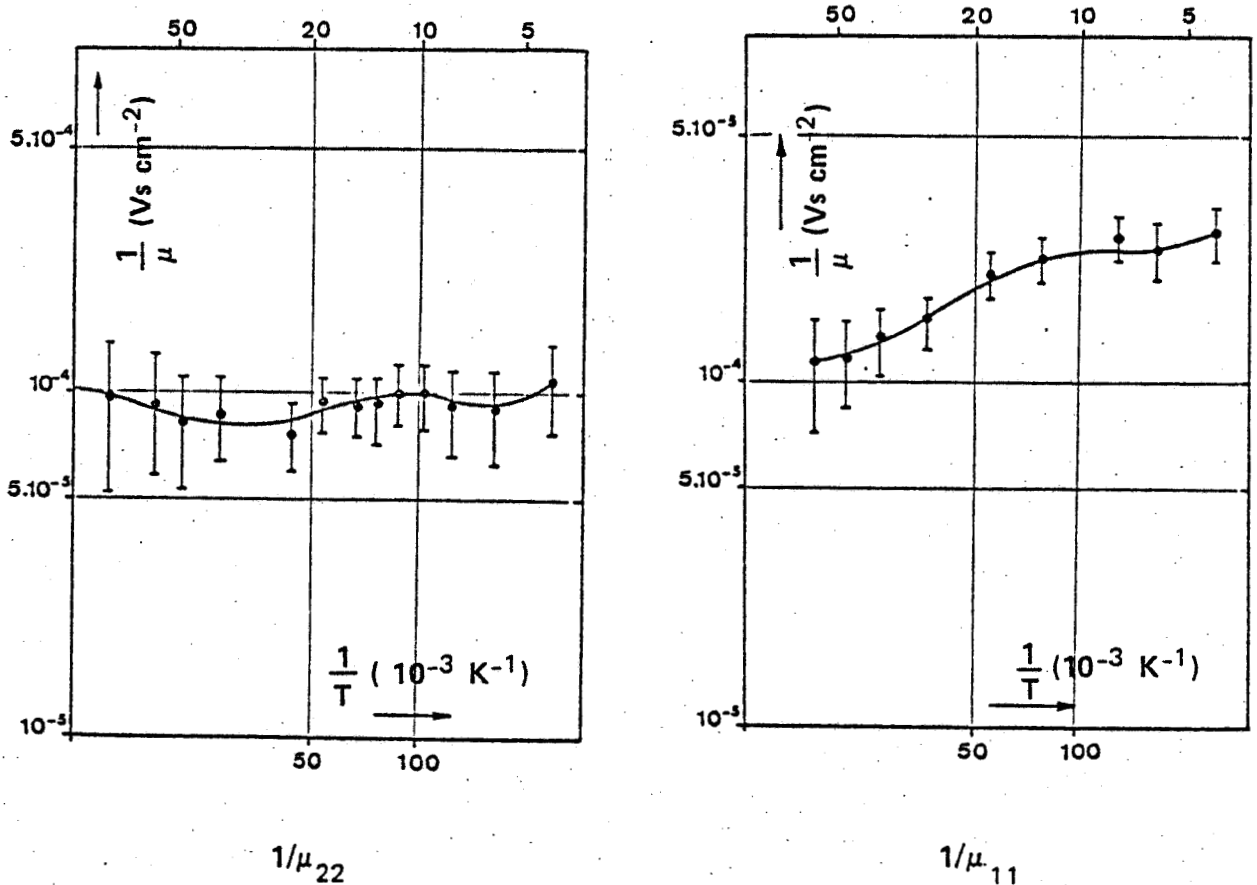


Figure 8 Mobilité réciproque induite par les dislocations à coin.

#### 4-1.2 Cas des sous-joints prismatiques de seconde espèce $\{11\bar{2}0\}$

Les différentes mesures montrent également que l'introduction des dislocations  $\bar{a}$  coin lève la dégénérescence des coefficients galvanomagnétiques dans le plan de base.

La figure 9 représentant les différents coefficients Hall montre que la température du premier point d'inversion (214 K) est la même pour les échantillons déformés et non déformés. Ces courbes confirment que la densité de porteurs libres ne semble pas dépendre de la présence des dislocations  $\bar{a}$  coin.

La diminution de la conductivité des échantillons déformés est donc due à la réduction de la mobilité des porteurs libres (figure 10). Contrairement au cas précédent, la composante  $\sigma_{33}$  est cette fois légèrement affectée. Ceci provient, sans doute, de l'effet de diffusion par les dislocations de jonction reliant les différents sous-joints de flexion pure de la sous-structure. Les composantes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  sont les plus affectées, mais cette fois la diffusion la plus grande est obtenue lorsque le courant est parallèle à la direction 2. La figure 11 représente l'inverse de la mobilité Hall pour chaque échantillon. Utilisant la loi de Matthiessen, on voit que le rapport d'anisotropie des mobilités contrôlées par les dislocations est inversé par rapport au cas précédent. On obtient à basse température  $(\mu_{11}/\mu_{22})_{\text{dislo}} \sim 2$ .

#### 4-1.3 Points communs des différents résultats caractéristiques des dislocations $\bar{a}$ coin

Nous dégageons dans ce paragraphe les faits expérimentaux communs aux deux séries de mesures précédentes. Ces faits serviront de base à la discussion des chapitres suivants.

- 1) La densité de porteurs libres semble dans les deux cas être indépendante de la présence des dislocations  $\bar{a}$  coin. A la précision des mesures près, nous admettons que les dislocations  $\bar{a}$  coin n'introduisent pas d'états liés ionisables avec la température.
- 2) La mobilité des porteurs libres est essentiellement affectée lorsque le courant est perpendiculaire aux lignes de dislocations. Dans ce cas, la

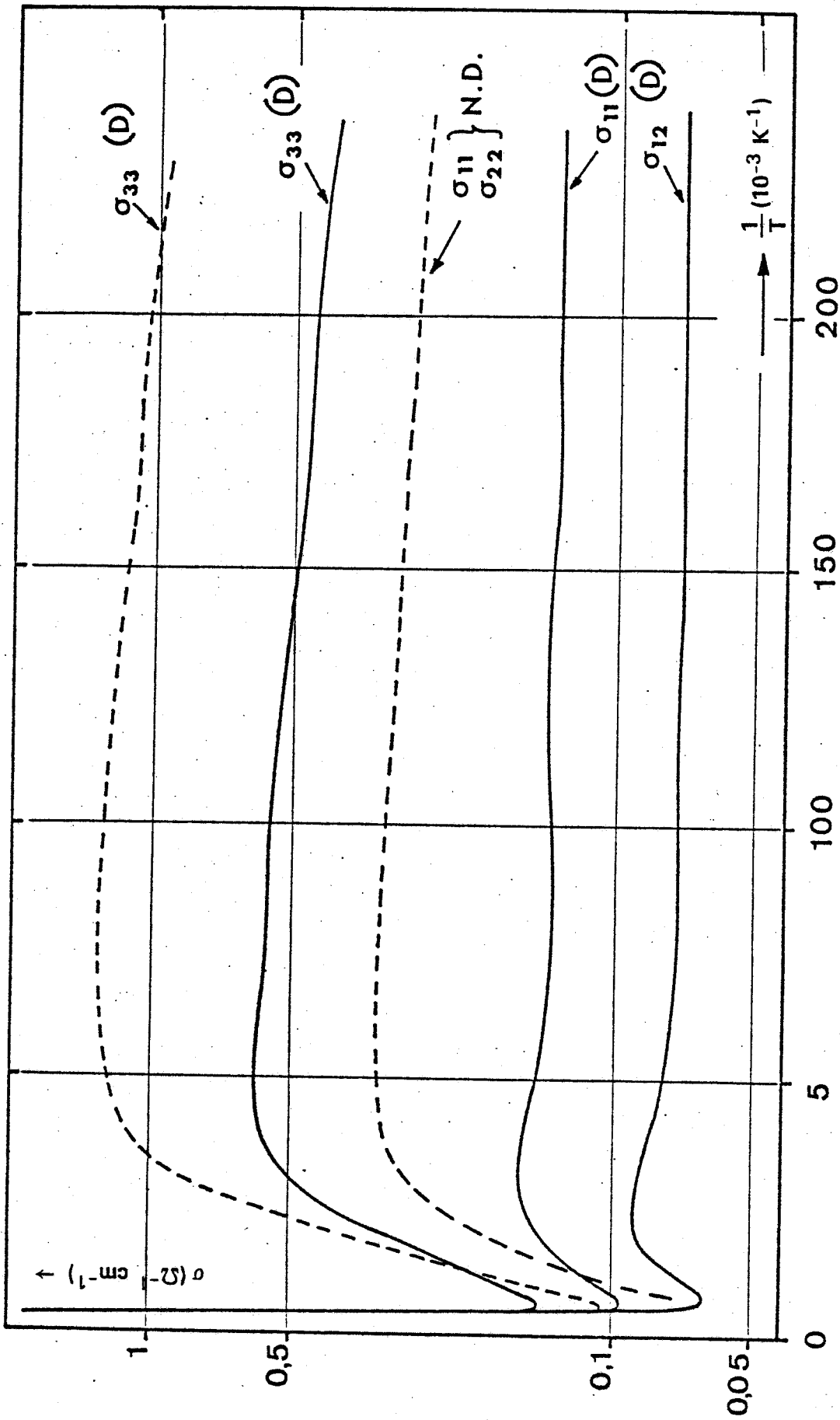


Figure 9 Mesure de conductivité. N.D. échantillons non déformés, recuits  
D échantillons déformés par glissement  $\bar{a}$  et recuits.



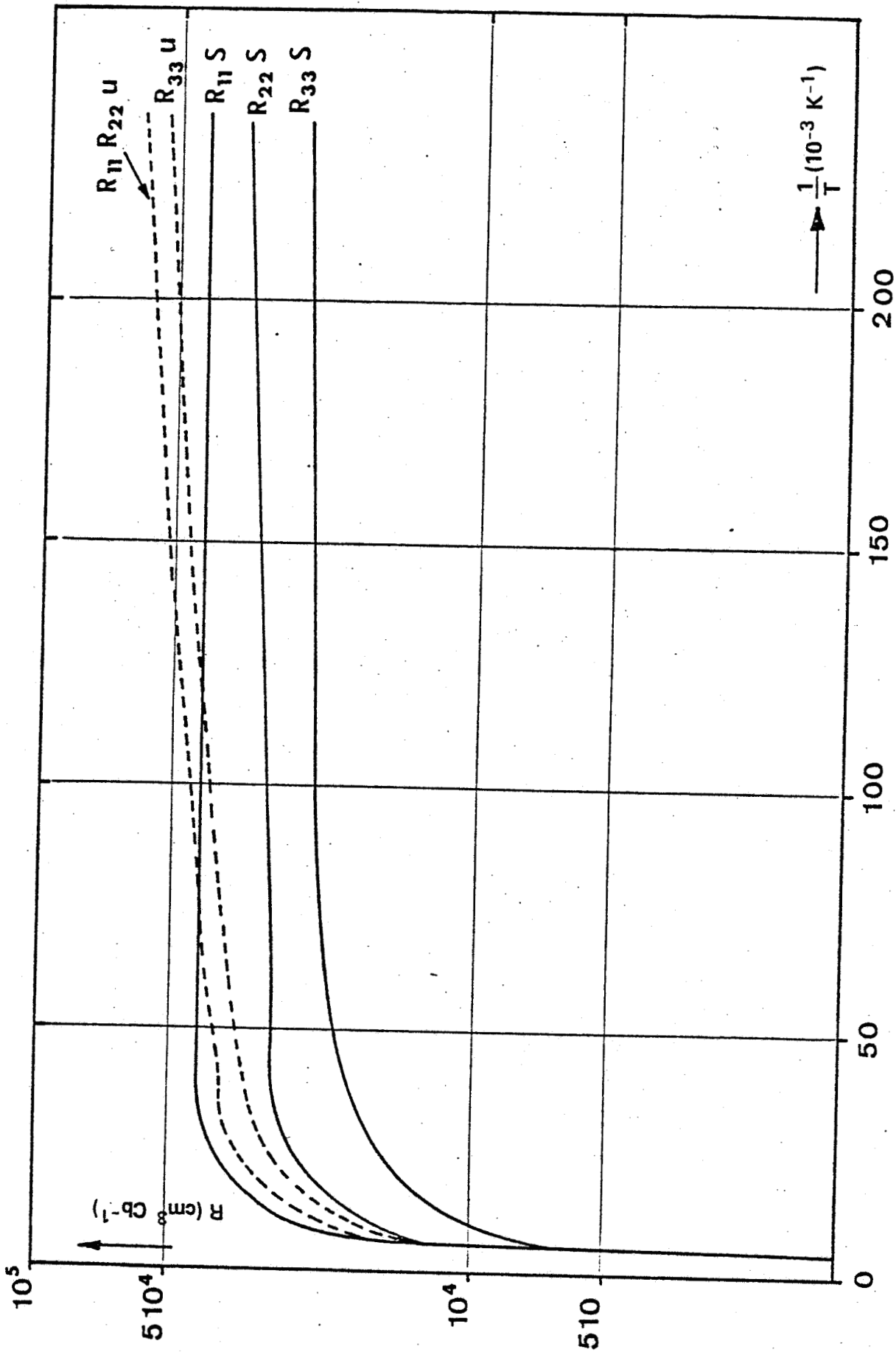


Figure 10 Coefficients d'effet Hall. U échantillons non déformés, recuits. S échantillons déformés et recuits.



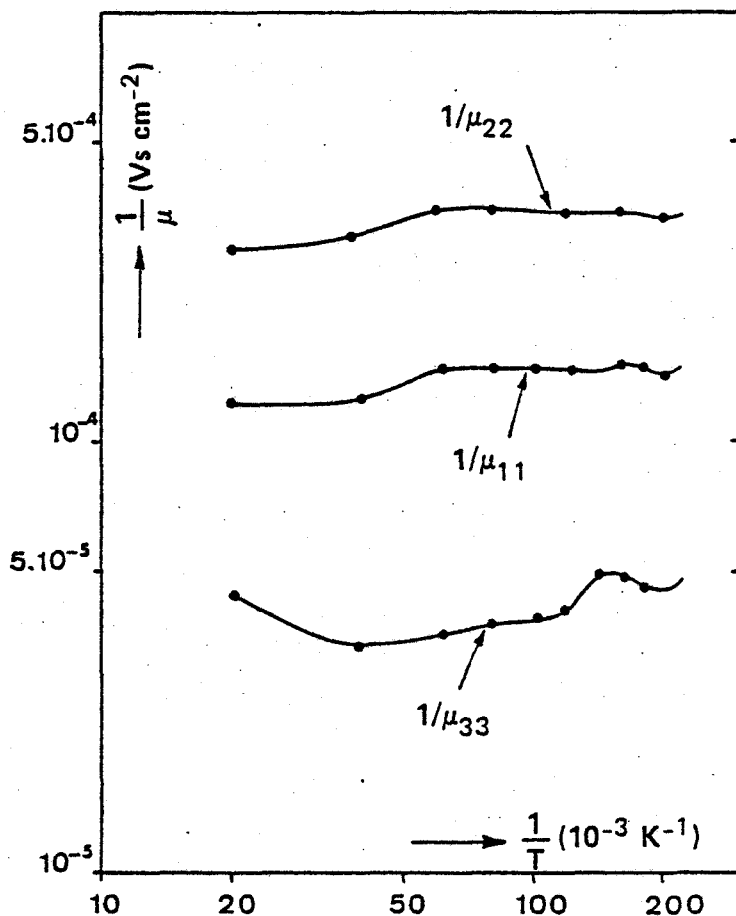


Figure 11 Mobilité réciproque induite par les dislocations à coin. Echantillons recuits après déformation.

mobilité réciproque des porteurs libres  $\mu_{\text{dislo}}^{-1}$  induite par les dislocations est pratiquement indépendante de la température (figure 12). Cette observation a déjà été signalée par Abokarov et all [54]. Malheureusement ces auteurs ne caractérisent pas le contenu en dislocation de leurs échantillons "déformés par compression uniaxiale puis recuits".

- 3) Les dislocations introduisent un effet d'anisotropie dans la conductivité basale des échantillons déformés. Dans les deux cas, l'effet de diffusion le plus fort est obtenu lorsque le courant est parallèle aux parois de dislocations introduites par les différents traitements des échantillons. On pourrait à ce stade admettre que l'effet d'anisotropie est relié à la présence et à l'orientation de telles parois. Remarquons cependant que l'orientation des parois est une conséquence directe des dislocations qui les composent. Dans le cas des échantillons non recuits, nous avons admis que les parois étaient constituées de "super-dislocations" dont le vecteur de Burgers est orthogonal aux plans prismatiques de première espèce. Considérant de telles dislocations, l'effet de diffusion le plus fort est alors obtenu, comme dans le second cas, lorsque le courant est perpendiculaire au vecteur de Burgers des dislocations constituant ces parois.

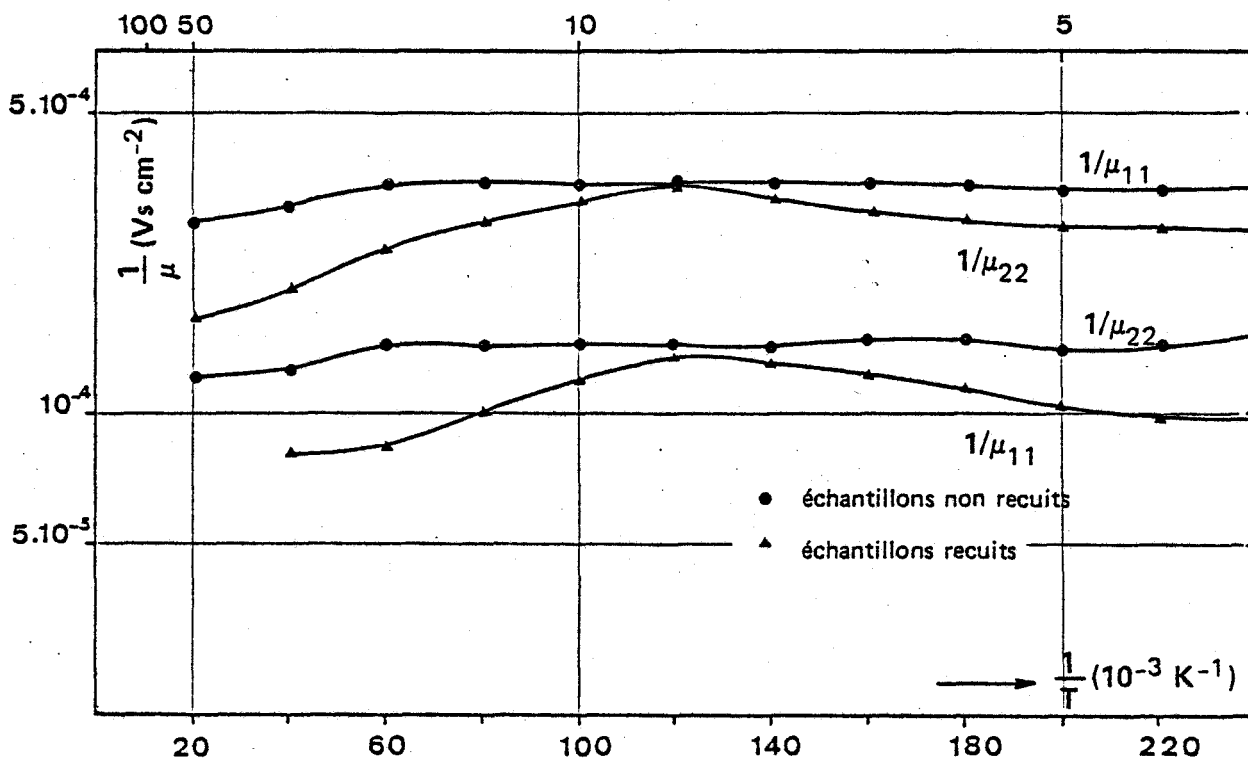


Figure 11 Cette figure résume les résultats obtenus sur les deux types d'échantillons (recuits et non recuits). Le diagramme est semi-logarithmique de façon à étendre le domaine des basses températures.

#### 4-2. DISLOCATIONS $\bar{c}$ VIS

Les échantillons déformés ont été cisailés à basse température (77 à 150 K) jusqu'à un taux de 1 à 2 % résolu. Les expériences de cisaillement sont suivies d'un stade de fluage  $\alpha$  à la même température de façon à favoriser l'extension des boucles de dislocations dans l'orientation  $\bar{c}$  vis. La densité de dislocations des échantillons déformés atteint  $10^8$  à  $10^9$   $\text{cm}^{-2}$  (elle est de l'ordre de  $10^5$   $\text{cm}^{-2}$  pour les échantillons non déformés).

Les mesures électriques ont été effectuées sur deux types d'échantillons.

- échantillons A de faible densité de porteurs libres ( $p \sim 4 \cdot 10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$ ) dont la mobilité est relativement élevée ( $\mu \sim 10^4$   $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )

- *échantillons B* de faible densité de porteurs ( $\sim 1.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) mais dont la mobilité est faible ( $\mu \sim 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ). Ce fait particulier où la mobilité des porteurs libres est faible bien que le cristal soit "pur" a été fréquemment attribué aux dislocations dans la littérature antérieure. Il ne semble pas que ce soit le cas ici puisque le contenu en dislocations de croissance des échantillons B est identique à celui des échantillons A. Cette différence de mobilité n'est pas comprise actuellement.

#### 4-2.1 Mesure des effets galvanomagnétiques

La conductivité de ce type d'échantillons présentant des variations importantes à  $T = 4,2 \text{ K}$ , nous avons mesuré jusqu'à  $2 \text{ K}$  en pompant sur l'Hélium liquide.

Les mesures de conductivité sont reportées figure 13. Elles montrent une grande différence dans le comportement de  $\sigma = f(1/T)$  entre les échantillons de type A et de type B aussi bien pour les échantillons non déformés que pour les échantillons déformés.

La conductivité des échantillons non déformés de type A présente le comportement classique (déjà observé sur les échantillons de référence de la section 4-1). La conductivité croît d'abord avec la température (2 à 20 K) domaine d'ionisation des impuretés. Ce stade est ensuite suivi d'une forte décroissance de la conductivité due aux vibrations de réseau (50 à 100 K).

Les échantillons non déformés de type B ne montrent pas aussi clairement ce comportement caractéristique. Dans ce type d'échantillons, la mobilité des porteurs libres, très basse, est affectée par des défauts non caractérisés dont l'effet de diffusion prédomine celui des phonons acoustiques.

L'introduction de dislocations  $\bar{c}$  vis dans chaque type d'échantillons A et B induit néanmoins un changement considérable des coefficients de conductivité.

La conductivité des échantillons A déformés devient inférieure à la conductivité des échantillons non déformés dans la région centrale du



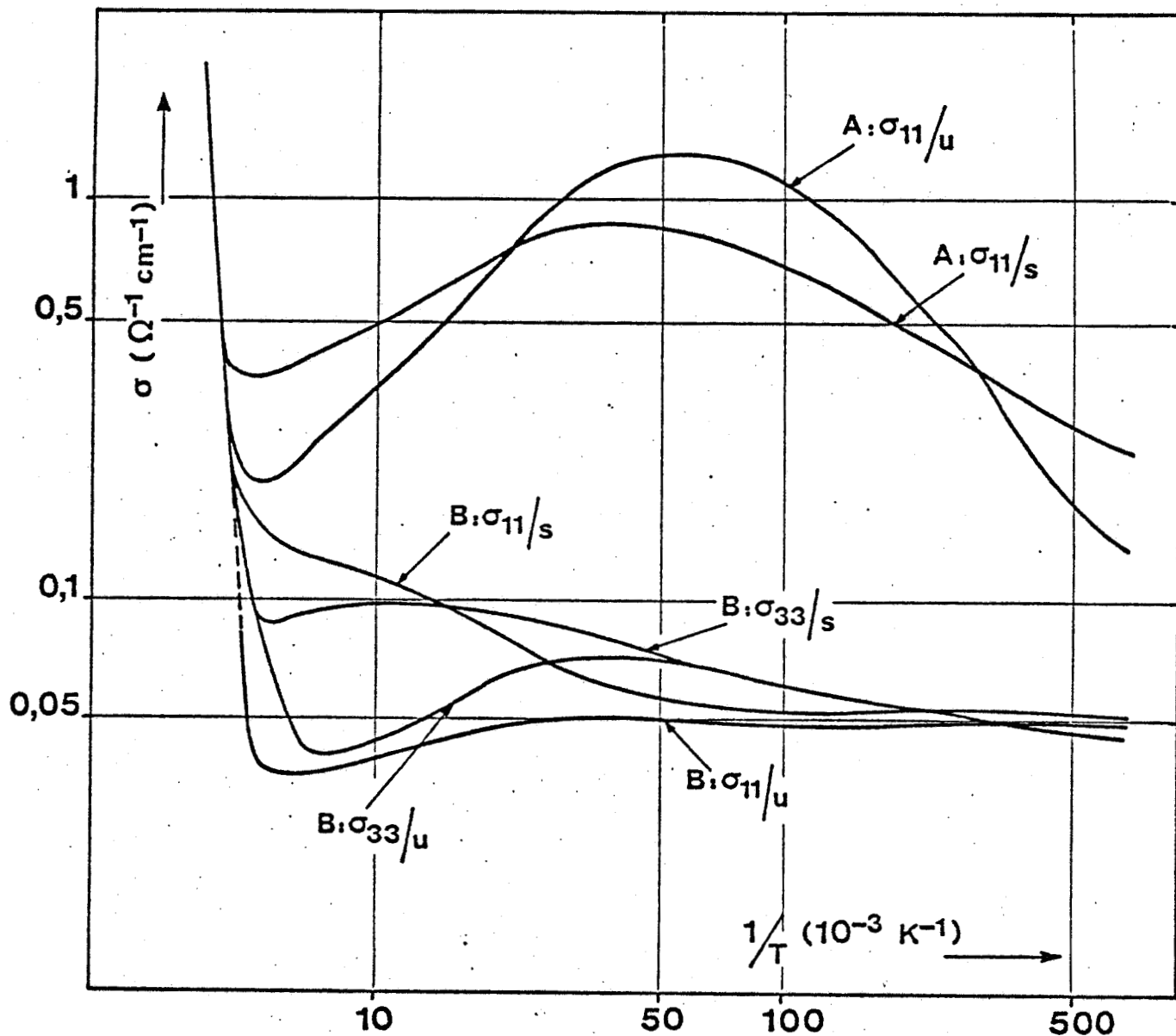


Figure 13 Mesure de conductivité. U échantillons non déformés, S échantillons déformés par cisaillement.

Echantillons A : faible densité de porteurs ( $p \sim 4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ),  
mobilité relativement élevée  
( $\mu \sim 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ).

Echantillons B : faible densité de porteurs ( $p \sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ )  
mobilité basse ( $\mu \sim 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ).



domaine extrinsèque (20 à 100 K). Par contre à basse température ( $T < 20$  K) ou à haute température ( $T \geq 100$  K) la conductivité des échantillons déformés est supérieure à celle des échantillons non déformés. En ce qui concerne les échantillons B déformés, leur conductivité est systématiquement supérieure à celle de leur homologue non déformé et ceci dans tout le domaine de température.

Les mesures des coefficients Hall en fonction de la température sont reportées figure 14. Les coefficients Hall des échantillons non déformés de type A ou B décroissent légèrement avec la température.

Dans le cas des échantillons déformés, cette décroissance est plus forte. De plus on observe un glissement de la température du premier point d'inversion de l'effet Hall vers les hautes températures.

#### 4-2.2 Mesures d'absorption optique

Le comportement des coefficients Hall en fonction de la température suggère l'apparition de porteurs supplémentaires introduits par les dislocations. Il est donc intéressant de rechercher l'apparition éventuelle d'états liés aux dislocations et situés dans la bande d'énergie interdite.

Il existe deux directions de polarisation particulières pour la mesure du coefficient d'absorption [67]

- i)  $\vec{E} \perp \vec{c}$  correspondant à la transition permise,
- ii)  $\vec{E} // \vec{c}$  représentant la transition interdite.

La résolution de tout pic d'absorption supplémentaire près du bord de bande est en fait très délicate et demande une installation de très haute résolution dans le cas de la transition permise, car le coefficient d'absorption est très élevé. Le cas de la transition interdite est par conséquent le mieux adapté à la recherche de niveaux supplémentaires en bord de bande. De plus, dans ce cas, on peut utiliser des échantillons plus épais (0,5 à 2 mm). Ils sont donc plus représentatifs du point de vue de leur contenu en dislocations et l'importance des phénomènes liés aux surfaces est considérablement diminuée. Le coefficient d'absorption optique a été calculé en prenant pour

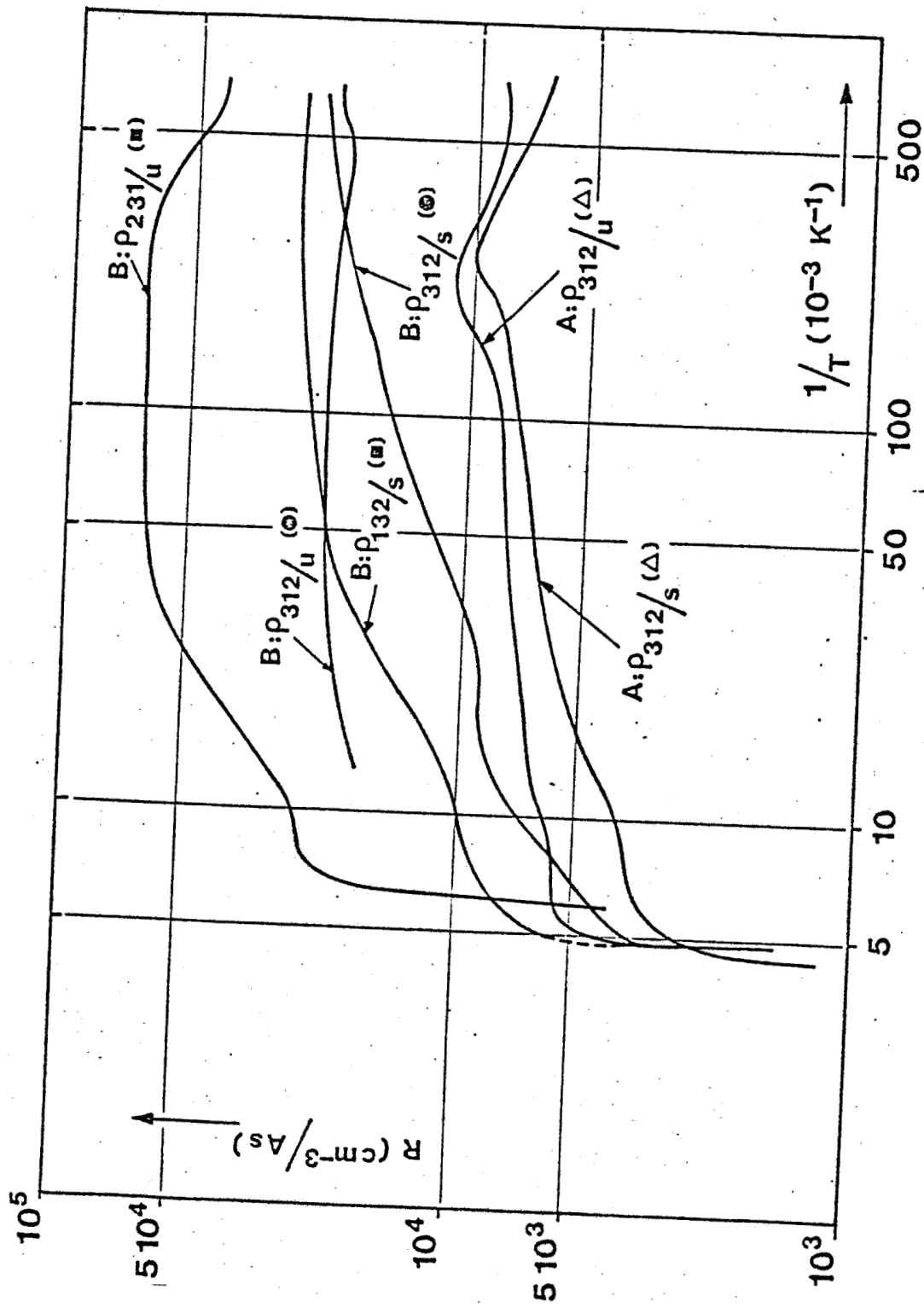


Figure 14 Coefficients d'effets Hall. U échantillons de référence, S échantillons cisailés.



le coefficient de reflectivité la valeur  $R// = 50\%$ , indépendante de la longueur d'onde pour les deux types d'échantillons déformés ou non\*.

La figure 15-a montre que ces mesures ne décèlent la présence d'aucune ligne d'absorption particulière en bord de bande sur les échantillons non déformés.

La série de mesures équivalentes mais obtenues sur des échantillons déformés (figure 15-b) montre :

- que le niveau d'absorption est plus élevé dans la région transparente de l'échantillon  $4\nu < E_{\text{gap}}$
- qu'une ligne d'absorption supplémentaire est résolue à 335,5 meV.

Le glissement de ce pic d'absorption avec la température correspond au glissement propre du bord de bande [67]. Ce niveau semble rester à égale distance du bord de bande.

#### 4-2.3 Signification des résultats expérimentaux

Ces résultats expérimentaux sont cohérents avec la présence d'états électroniques liés aux dislocations  $\bar{c}$  vis et situés dans la bande d'énergie interdite.

La profondeur de pénétration des contacts électriques, si elle n'affecte que très peu les mesures de conductivité, peut perturber légèrement les mesures d'effet Hall à cause de la faible épaisseur des échantillons. Cependant la variation des coefficients Hall avec la température, qui fournit l'information la plus importante, ne dépend pas de la profondeur de pénétration de ces contacts. De plus la variation du premier point d'inversion de l'effet Hall est significative. Ce glissement vers les températures plus élevées indique que la densité de porteurs libres a augmenté en présence des dislocations  $\bar{c}$  vis. La différence des pentes des coefficients Hall en fonction de la température montre également que la densité  $p_{\text{déf}}$  de porteurs

---

\* Les mesures de  $\nu$  Alpen [48] ont effectivement montré que le coefficient de réflexion était indépendant de la présence des dislocations et sensiblement égal à 50% dans le cas de la transition interdite.

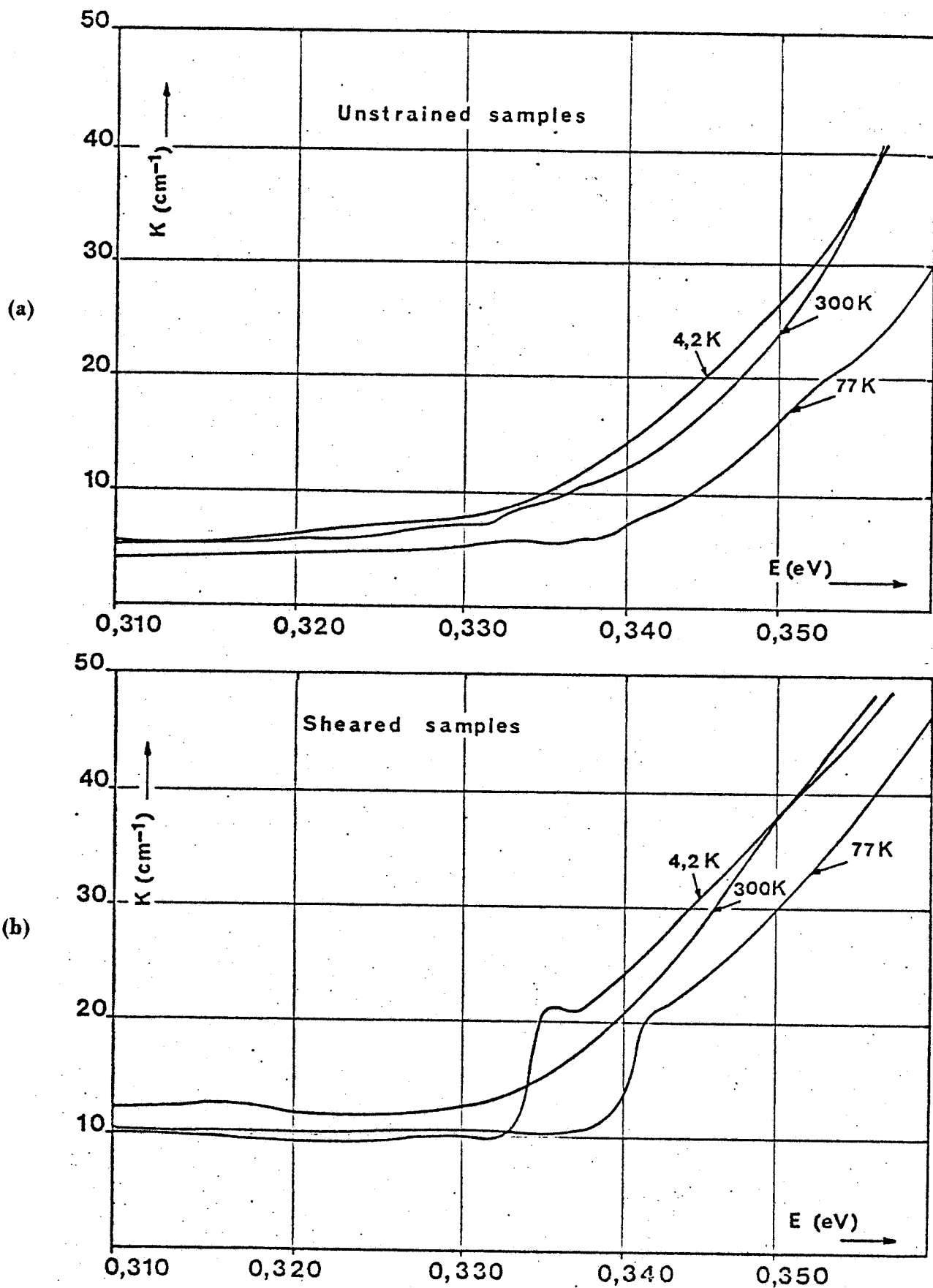


Figure 15 Coefficient d'absorption optique,  
(a) échantillons de référence,  
(b) échantillons cisailés.



libres des échantillons déformés augmente plus fortement avec la température que celle  $p_{ndéf}$  des échantillons non déformés.

Le pic d'absorption supplémentaire (résolu à 335,5 meV) correspond au transfert d'électrons soit d'un niveau proche de la bande de valence vers la bande de conduction, soit de la bande de valence vers un niveau proche de la bande de conduction (figure 16). La distance énergétique de ce niveau, du bord de bande doit être faible puisque l'énergie de la longueur d'onde absorbée est pratiquement égale à la largeur de la bande interdite (0,33 - 0,34 eV).

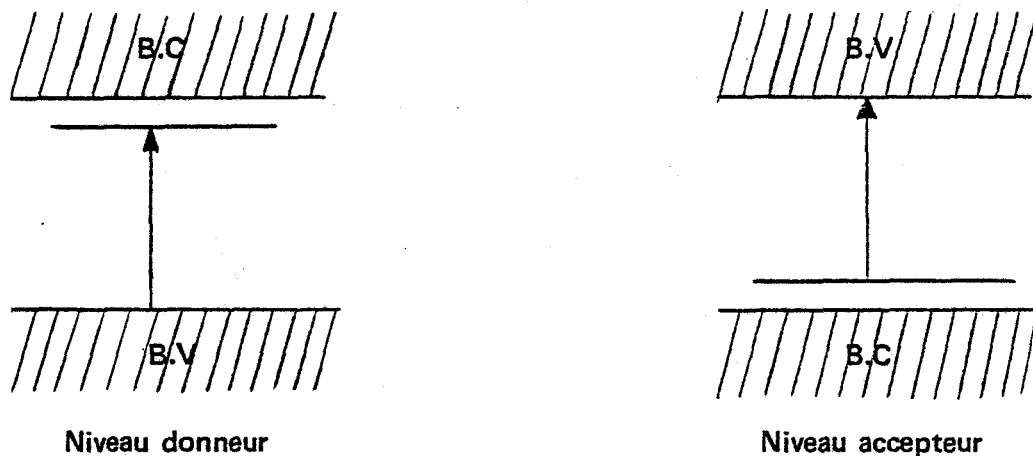


Figure 16

L'augmentation du nombre de porteurs  $p$  observée par effet Hall indique que ce pic d'absorption correspond à la présence de niveaux accepteurs, proches de la bande de valence.

De façon à déterminer la distance séparant ce niveau de la bande de valence, nous avons tracé (figure 17) la fonction  $\Delta p = p_D - p_{ND} = f(1/T)$  dans un diagramme semi-logarithmique.

Les différences  $\Delta p$  ont été calculées en adoptant la valeur 1 pour le facteur de diffusion  $\alpha$  intervenant dans le coefficient Hall ( $R = \alpha/pe$ ), aussi bien pour les échantillons déformés que non déformés. Bien que les coefficients Hall souffrent d'une imprécision pouvant atteindre

10 à 20 %, l'ensemble des points expérimentaux obtenus sur trois couples d'échantillons s'alignent très grossièrement suivant une droite (figure 17) correspondant à une énergie d'activation  $E$  de l'ordre de 1 meV. Ce résultat est cohérent avec la présence du pic d'absorption situé au voisinage de la bande de valence.

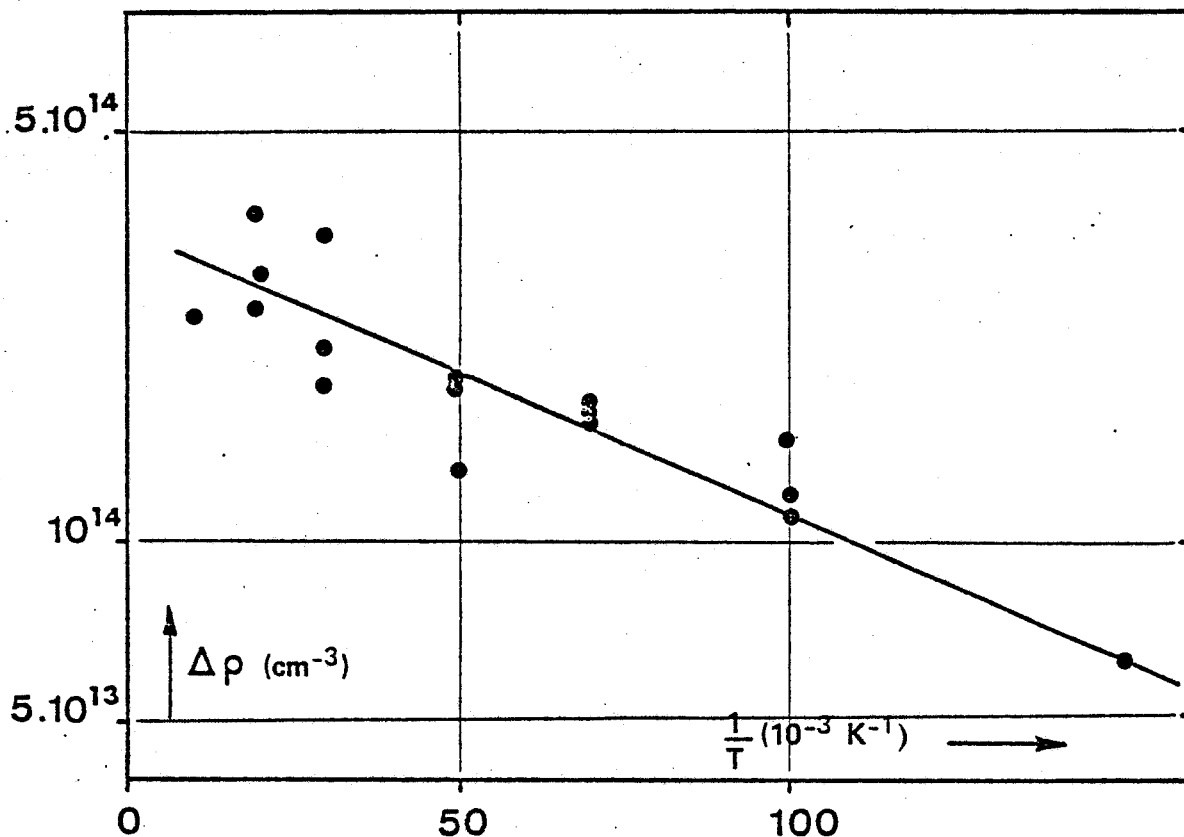


Figure 17 Augmentation de la densité des porteurs libres induite par les dislocations c vis. Les points expérimentaux ont été obtenus sur trois couples d'échantillons.

Si l'on suppose que les sites accepteurs sont localisés le long de la dislocation, leur énergie devrait varier avec leur taux d'occupation  $f$  à cause de l'interaction électrostatique des différents porteurs piégés (Read [7]). Nos résultats expérimentaux ne décèlent pas cette variation. On trouve

- 1) que l'énergie d'activation  $E$  est constante dans le domaine extrinsèque
- 2) que le glissement thermique du pic d'absorption correspond au glissement propre du bord de bande ( $10^{-4} \text{ eV/K}$  [67]).

Ce fait peut s'expliquer

- d'une part par le faible taux d'occupation de ces dislocations. Compte tenu de la densité de dislocations ( $10^9 \text{ cm}^{-2}$ ) et du  $\Delta p$  mesuré, on trouve un taux d'occupation  $f$  de l'ordre de  $3,5 \cdot 10^{-3}$  à 100 K. Cette valeur conduit à une énergie d'interaction électrostatique de l'ordre de 1,5 meV, valeur négligeable devant le glissement propre du bord de bande ( $10^{-2} \text{ eV}$  à 100 K) ;
- d'autre part, la structure de coeur de la dislocation  $\bar{c}$  vis peut être différente de la ligne chargée du modèle de Read. Elle pourrait éventuellement correspondre à une configuration particulière qui minimise l'énergie électrostatique d'interaction. Ceci justifierait le fait que nous avons trouvé une énergie d'activation  $E \sim 1 \text{ meV}$  constante dans tout le domaine de température.

Les mesures galvanomagnétiques et optiques sont donc cohérentes et établissent clairement que les dislocations  $\bar{c}$  vis sont chargées et introduisent des niveaux accepteurs dans la bande d'énergie interdite.

De façon à comprendre les courbes de conductivité des différents échantillons (figure 13), nous reportons sur la figure 18 la mobilité Hall des échantillons déformés et non déformés de type A. La contribution des dislocations  $\mu_{\text{dislo}}^{-1}$  est obtenue en appliquant la règle de Matthiessen.

La courbe  $\mu_{\text{dislo}}^{-1} (1/T)$  montre la présence d'un maximum très prononcé au voisinage de 10 K, puis tend vers zéro pour les basses et pour les hautes températures.

En ce qui concerne les échantillons B, la mobilité des porteurs libres n'est pas affectée par les dislocations. Par conséquent, la conductivité plus élevée des échantillons déformés est simplement due à l'accroissement du nombre de porteurs libres induits par les dislocations.



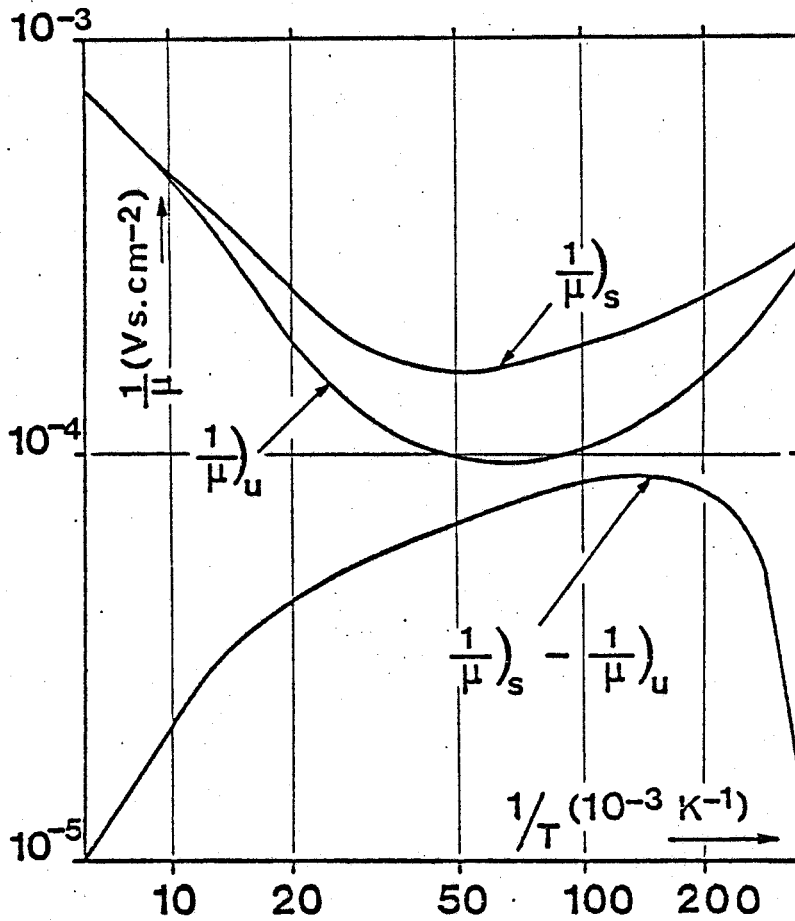


Figure 18 Mobilité réciproque induite par les dislocations e vis.

En ce qui concerne les échantillons A, l'interprétation des courbes de conductivité doit tenir compte de la variation de la densité de porteurs libres avec la température ainsi que de la variation de leur mobilité. Dans le domaine élevé de température ( $T > 100$  K) la mobilité des porteurs libres est très peu affectée par les dislocations, par conséquent la conductivité augmente essentiellement avec le nombre de porteurs libres. Lorsque la température décroît, non seulement la densité de porteurs libres mais aussi leur mobilité décroissent. Ainsi la conductivité résultante décroît très fortement ; elle peut, ce qui est le cas ici, devenir inférieure à celle de leur homologue non déformé. Lorsque l'on atteint le domaine des basses températures, les dislocations deviennent des centres diffuseurs inefficaces comme le montre la figure 18, mais l'accroissement du nombre de porteurs libres qu'elles provoquent est encore appréciable (figure 17). Dans ce cas la conductivité des échantillons déformés peut à nouveau redevenir supérieure à celle des échantillons non déformés.

## §-5. RÉSUMÉ DES RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

Afin de simplifier la discussion des chapitres suivants, nous récapitulons de façon très schématique les résultats expérimentaux essentiels.

### 1) Dislocations à coin

- Elles n'affectent pas la densité de porteurs libres.
- Aucun effet de diffusion n'est observé lorsque le courant  $I$  est parallèle aux lignes de dislocations.
- Lorsque  $I$  est perpendiculaire aux lignes de dislocations, elles induisent une diffusion anisotrope dont l'effet maximum est obtenu perpendiculairement au vecteur de Burgers.
- La mobilité réciproque  $\mu_{\text{dislo}}^{-1}$  est indépendante de la température. L'ordre de grandeur obtenu est  $\sim 3 \cdot 10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-1}$  pour une densité de dislocations de  $10^8 \text{ cm}^{-2}$  environ.

### 2) Dislocations c vis

- Elles induisent des états accepteurs dont l'énergie se situe à  $\sim 1$  meV de la bande de valence.
- Le taux d'occupation de ces états localisés atteint à 100 K une valeur faible de l'ordre de  $3 \cdot 10^{-3} \text{ e} \text{ \AA}^{-1}$ . L'ionisation de ces états provoque une variation notable de la densité de porteurs libres.
- La mobilité réciproque a un comportement caractéristique en fonction de la température. Cette courbe  $\mu^{-1}(1/T)$  croît jusqu'à une valeur maximum de l'ordre de  $10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-1}$  (pour une densité de dislocation de  $\sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ), puis décroît très rapidement lorsque  $T$  tend vers zéro.

**IV - MECANISMES DE DIFFUSION  
DES PORTEURS LIBRES  
ASSOCIES AUX DISLOCATIONS**

## §-1. INTRODUCTION

Les résultats expérimentaux exposés au chapitre précédent montrent que les dislocations affectent considérablement la mobilité des porteurs libres dans le tellure. Afin de discerner l'origine de la diffusion que l'on peut attribuer aux dislocations étudiées, nous rappelons et analysons les différents mécanismes caractéristiques des dislocations dans les semi-conducteurs.

Ces mécanismes se classent a priori en deux groupes liés

- 1) au déplacement des atomes,
  - 2) à la déformation des atomes eux-mêmes.
- 1) La dislocation crée un champ de distorsion qui déplace les atomes de leur position d'équilibre. Le potentiel cristallin subit alors une variation qui supprime localement sa périodicité.

a- Dans la région du coeur, la distorsion introduite est grande. Le nombre de "premiers" voisins est quelque fois changé. La forte perturbation de cette région de coeur peut provoquer l'apparition d'états électroniques localisés sur la ligne de dislocation et dont l'énergie se situe dans la bande interdite. Les effets de diffusion résultants sont appelés effets de coeur. Ils sont liés à la présence de charges sur la dislocation.

b- En dehors du coeur de la dislocation, les atomes sont légèrement déplacés de leur position d'équilibre\*. Il en résulte une variation plus douce du potentiel cristallin, qui, devenu aperiodique, joue également le rôle d'un potentiel diffuseur. Ces effets de diffusion liés au champ de déplacement à longue distance sont décrits par le potentiel de déformation.

Les points 1-a et 1-b sont découplés car il est difficile d'obtenir actuellement une description mathématique complète du champ de

---

\* Nous ne tenons pas compte, pour les phénomènes de diffusion, de la translation  $b$  que subissent certains atomes de la structure. Les atomes sont équivalents ; leur substitution ne possède aucune propriété physique [88].

déplacement des atomes. Néanmoins si le déplacement de tous les atomes était connu, le problème quantique posé serait très complexe. Le découpage en région de coeur et région de "déplacement à longue distance" correspond, avant tout, à deux approximations limites. La frontière séparant ces deux régions est donc très floue ; le domaine d'utilisation de ces approximations l'est aussi. Ainsi, dans le cas des dislocations vis de la structure diamant, Teichler [89] a utilisé l'expression du potentiel de déformation ( $\sim 1/r$ ,  $r$  distance à la dislocation) au voisinage de  $r = 0$ . Ses calculs conduisent à la présence d'états électroniques, localisés le long de la dislocation et dont l'énergie se situe à l'intérieur de la bande interdite.

2) Le champ de distorsion des dislocations provoque également une déformation propre des ions produisant parfois l'apparition d'un moment dipolaire élémentaire. Dans les structures cristallographiques non centrosymétriques, c'est-à-dire dans les matériaux piezoélectriques, tel le tellure, ces moments dipolaires possèdent une résultante non nulle que l'on peut décrire de façon phénoménologique à l'aide du tenseur piezoélectrique. Le potentiel piezoélectrique correspondant constitue une origine possible de diffusion des porteurs libres.

Les mécanismes de diffusion possibles sont donc

- 1) les effets de coeur
- 2) les effets de déplacement à longue distance
- 3) les effets piezoélectriques.

Nous détaillons ces mécanismes et nous les adaptons au cas du tellure dans la suite de ce chapitre.

## §-2. EFFETS DE COEUR

Il n'existe à ce jour aucune théorie complète des niveaux électroniques liés aux dislocations. Cet état de fait ne provient pas seulement de la difficulté de décrire la répartition des atomes au coeur de la dislocation. Il est aussi lié à la complexité du problème quantique posé. Néanmoins dans les semi-conducteurs covalents Ge et Si, l'expérience montre clairement l'existence de ces états liés que nous décrivons sommairement dans le paragraphe suivant.

## 2-1. SEMI-CONDUCTEURS COVALENTS

L'origine des états liés se comprend aisément dans le cas de la dislocation  $60^\circ$  de la structure diamant (Shockley [90], Read [7,8]). Les dislocations  $60^\circ$  coupent les liaisons covalentes du cristal et sont ainsi décorées d'électrons "pendants" qui ne contribuent plus à la cohésion du matériau. Leur énergie correspond pratiquement à celle de l'orbitale dirigée  $sp^3$  et se place dans la bande d'énergie interdite du cristal parfait. La symétrie de translation peut conférer à ces états, localisés le long de la dislocation, le caractère de bande d'énergie s'il y a recouvrement suffisant entre orbitales voisines [22].

Au zéro absolu, dans un cristal pur, cette bande est à moitié peuplée : la dislocation est alors neutre. L'énergie de ces niveaux dépend fortement de leur taux d'occupation à cause de l'interaction électrostatique des différents porteurs piégés. Cela implique que même au zéro absolu, dans un semi-conducteur réel, la position énergétique de ces niveaux varie avec la densité et la nature des impuretés ionisables. Lorsque la température augmente, l'ionisation des niveaux de dislocations provoque une variation de la densité de porteurs extrinsèques qui peut dans certains cas devenir supérieure de la densité du cristal non déformé. Les lignes de dislocations chargées affectent la mobilité des porteurs libres.

L'origine de la charge d'une dislocation peut être, cependant, beaucoup moins évidente que celle qui correspond au modèle de la "liaison pendante". L'expérience, [22], révèle également l'existence de niveaux associés aux dislocations vis qui ne coupent pourtant pas de liaisons covalentes. Dans ce cas, les différentes orbitales dirigées des atomes du coeur peuvent toujours se combiner afin de constituer des états liants et antiliants. Il en résulte pourtant deux bandes (au moins) : l'une complètement vide sous la bande de conduction, l'autre complètement peuplée au-dessus de la bande de valence, provenant cette fois des distorsions importantes que subissent les liaisons entre les atomes du coeur.

La bande complètement peuplée peut être, au zéro absolu, partiellement dépeuplée par ionisation d'impuretés acceptrices d'énergie inférieure. Cependant dès que la température est suffisamment élevée, la densité de porteurs  $p$  extrinsèques redevient égale à celle du cristal non déformé : les dislocations sont alors électriquement neutres.

## 2-2. LE TELLURE

Les dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis créées par déformation plastique introduisent également des niveaux dont l'énergie se situe dans la bande interdite.

- Les mesures d'absorption optique réalisées par V. Alpen [48] sur des échantillons contenant des dislocations  $\bar{a}$  coin, décèlent un pic d'absorption à  $\sim 3$  meV de la bande de valence.
- Les mesures d'absorption optique que nous avons réalisées dans le cas des dislocations  $\bar{c}$  vis, ainsi que les mesures galvanomagnétiques correspondantes indiquent clairement la présence de sites accepteurs à  $\sim 1$  meV de la bande de valence.

La présence des niveaux liés aux dislocations  $\bar{a}$  coin n'a pu être confirmée par les mesures galvanomagnétiques. Ce fait peut signifier que ces niveaux sont semblables à ceux qu'introduisent les dislocations vis des structures diamant ou bien dans l'autre cas que leur taux d'occupation maximum est très faible et n'a pu être décelé par effet Hall.

Par contre, les niveaux associés aux dislocations  $\bar{c}$  vis piègent aux températures suffisamment élevées une densité d'électrons notablement supérieure à la densité de porteurs extrinsèques du cristal non déformé. Ces niveaux sont donc semblables aux niveaux à demi-peuplés (à  $T = 0$  dans un cristal pur) qu'introduisent les dislocations  $60^\circ$  des structures diamant.

Les dislocations  $\bar{c}$  vis ne coupent pas les liaisons fortement liantes entre atomes d'une même chaîne. Le modèle de "l'électron pendant", introduit par Shockley, ne peut donc directement s'appliquer dans ce cas.

Néanmoins les calculs de structure de bande du tellure cristallin effectués par Maschke (1971 [91]) et du tellure en phase désordonnée (Kramer, Maschke et Lande 1973 [92]) ont clairement établis que la bande interdite du tellure provient des interactions entre chaînes.

Le mixage des différentes orbitales p et leur résonance entre différentes chaînes aboutit à la formation d'états de type liant et antiliant

qui peuvent être localement détruits au coeur des dislocations. La forte modification des intégrales résonance entre différentes chaînes au coeur des dislocations  $\bar{c}$  vis peut justifier l'apparition d'états localisés.

Les résultats expérimentaux du chapitre précédent ont montré que l'énergie  $E$  de ces niveaux liés ne varie pas avec la température. Ce fait n'est pas en contradiction avec le modèle de la ligne chargée de Read. Il peut s'expliquer par le faible taux d'occupation des sites accepteurs de la dislocation.

Pour le calcul de mobilité effectué au chapitre suivant, nous considérons que la dislocation  $\bar{c}$  vis est une ligne chargée dont la densité linéique  $\rho$  est donnée par

$$\rho = \rho_0 \exp - \frac{E}{KT} \quad \text{où} \quad E = 1 \text{ meV} \quad (2-1)$$

Nous n'attribuons pas ce mécanisme de diffusion aux dislocations  $\bar{a}$  coin.

### §-3. POTENTIEL DE DÉFORMATION

#### 3-1. GENERALITES

Les premiers calculs de résistivité associée au champ de déformation des dislocations ont été effectués par J.S. Koelher [1], Mackenzie et Sondheimer [2], Dexter et Seitz [4]. Ces auteurs appliquèrent directement, au cas des dislocations, l'expression du potentiel de déformation qu'avaient introduite Bardeen et Shockley en vue de traiter la diffusion des porteurs libres par les phonons acoustiques [5].

L'origine de ce potentiel de diffusion est liée aux variations locales que subissent les paramètres cristallins.

Supposons que l'on ait, en effet, déterminé la structure de bande à l'aide d'un calcul de type Wigner Seitz. L'énergie de l'état  $k$ , [60], est alors donnée par

$$E(k) = E_0(r_s) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3-1.1)$$



où  $E_0(r_s)$  est une fonction du rayon  $r_s$  de la sphère de Wigner Seitz. Toute variation  $\delta r_s$  (obtenue par exemple lors d'une déformation homogène du cristal) provoque une variation  $\delta E(k)$  donnée par

$$\delta E(k) = \frac{\partial E_0(r_s)}{\partial r_s} \delta r_s = \frac{r_s}{3} \frac{\partial E_0}{\partial r_s} \frac{\Delta V}{V} \quad (3-1.2)$$

La variation  $\delta E$  de l'énergie des états électroniques est donc proportionnelle à la dilatation  $\Delta V/V = \text{div} \bar{u} = \text{tr} \bar{\epsilon}$  introduite dans le cristal.

Bardeen et Shockley extrapolèrent cette relation pour les déformations hétérogènes variant lentement

$$\delta E(k) = \frac{r_s}{3} \frac{\partial E_0}{\partial r_s} \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r}) \quad (3-1.3)$$

Ils supposèrent ensuite que le potentiel de diffusion correspondant  $\delta V_{\text{ex}}(\bar{r})$  est proportionnel à  $\delta E(k)$  soit :

$$\delta V_{\text{ex}}(\bar{r}) = E_1 \text{div} \bar{u}(\bar{r}) = E_1 \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r}) \quad (3-1.4)$$

où  $E_1$  est la constante du potentiel de déformation.

En fait, une analyse plus détaillée de l'effet d'une déformation homogène sur la structure de bande d'un cristal (cf. Bir et Pikus [93]) conduit à

$$\delta E(k) = \bar{\theta} : \bar{\epsilon} \quad (3-1.5)$$

où  $\bar{\theta}$  est le tenseur du potentiel de déformation. Cette expression est équivalente à l'expression (3-1.3) lorsque les surfaces d'énergie constantes sont sphériques. Elle permet d'étendre le théorème du potentiel de déformation aux cas de surfaces d'énergie quelconques.

Dans (3-1.5) n'apparaissent que les termes symétriques du tenseur de distorsion. Bonch - Bruevich [23] proposa d'étendre la formule de Bardeen et Shockley aux termes antisymétriques du tenseur de distorsion en ajoutant le terme

$$\delta v_{\text{ex}}(\vec{r}) = E_2 (\vec{\xi} \cdot \text{rot } \vec{u}(\vec{r})) \quad (3-1.6)$$

où  $\vec{\xi}$  est un vecteur unitaire perpendiculaire à la ligne de dislocation. Ce terme supplémentaire permet d'attribuer un effet de diffusion aux dislocations vis même dans les milieux isotropes.

Ces différents termes peuvent se retrouver phénoménologiquement en admettant que la fonction  $E(k)$  dépend de toutes les composantes  $w_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$  du tenseur de distorsion, soit :

$$\delta E(k, w_{ij}) = \frac{\partial E(k)}{\partial w_{ij}} w_{ij} \quad (3-1.7)$$

En séparant la partie symétrique de la partie antisymétrique, on obtient :

$$\delta E(k) = \bar{\theta} : \bar{\epsilon} + \bar{\Omega} : \bar{\omega} \quad (3-1.8)$$

$\bar{\omega}$  étant un tenseur antisymétrique, le terme  $\bar{\Omega} : \bar{\omega}$  est identique au terme supplémentaire proposé par Bonch - Bruevich.

### 3-2. CAS DU TELLURE

Le tellure est un semi-conducteur multi-vallées dont les poches de conduction sont localisées aux différents points H de la zone de Brillouin (extrémités de l'hexagone). Ces points possèdent la symétrie 3-2. Les surfaces d'énergie constantes centrées sur ces points sont des ellipsoïdes de révolution. Le tenseur du potentiel de déformation ne possède donc que deux composantes indépendantes

$$\bar{\theta} = \begin{pmatrix} \theta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \theta_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \theta_{33} \end{pmatrix} \quad (3-2.1)$$

Le champ de déformation des dislocations dans le tellure est affecté par la forte anisotropie de ce matériau. Ainsi, la dislocation  $\vec{c}$  vis, introduit une dilatation notable dans le cristal. L'effet de diffusion des

porteurs libres par ce type de dislocation que l'on pourrait associer au potentiel de déformation, proviendra essentiellement de cette dilatation et nous négligeons le terme de correction de Bonch - Bruevich.

Les dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis étudiées expérimentalement sont parallèles à l'axe  $\bar{c}$ . Leurs termes de dilatation se réduisent à  $\epsilon_{11}$  et  $\epsilon_{22}$  ( $\epsilon_{33} = 0$ ). La relation (3-1.5) conduit donc à

$$\delta V_{\text{ex}}(\bar{r}) = \theta_{11} (\epsilon_{11} + \epsilon_{22}) = \theta_{11} \text{tr} \bar{\epsilon} \quad (3-2.2)$$

expression simple, similaire à la formulation de Bardeen et Shockley obtenue dans le cas isotrope.

#### §-4. EFFETS PIEZOÉLECTRIQUES

La possibilité d'une diffusion des porteurs libres par effet piezoélectrique lié aux dislocations fut envisagé vers 1964 par Merten [24,25] et par Levinson [26]. Cependant les semi-conducteurs les plus étudiés tant expérimentalement que théoriquement : le germanium et le silicium, n'étant pas piezoélectriques, cette hypothèse reprit de l'intérêt vers 1972 dans les travaux de Faivre et Saada [27,28], concernant le tellure et le quartz.

Dans les cristaux non centrosymétriques, l'application d'une contrainte, induisant une déformation propre des ions, fait apparaître une polarisation  $\bar{P}(\bar{r})$  que l'on peut relier à un potentiel induit. Réciproquement, l'application d'un champ électrique peut induire un champ de déformation. Cet effet est représenté dans l'approximation linéaire de Voigt [94] par le système d'équations suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \bar{\sigma} &= \bar{c} : \bar{\epsilon} + \bar{e} \cdot \bar{E} \\ \bar{D} &= \bar{e} : \bar{\epsilon} - \bar{\chi} \cdot \bar{E} \end{aligned} \right\} \quad (4-1)$$

où  $\bar{\sigma}$  et  $\bar{\epsilon}$  sont les tenseurs de contrainte et de déformation ;  $\bar{D}$  et  $\bar{E}$

les vecteurs déplacement et champ électrique ;  $\bar{\epsilon}$  et  $\bar{c}$  les tenseurs piezoélectrique et élastique ;  $\bar{\chi}$  le tenseur diélectrique.

Ces relations s'appliquent bien entendu au champ de déformation des dislocations, responsable alors de l'apparition d'un potentiel induit  $V_{\text{piezo}}$  capable de diffuser les porteurs libres.

Les équations d'équilibre du solide déformé sont :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} &= 0 && \text{équilibre des contraintes} \\ \frac{\partial D_j}{\partial x_j} &= \rho(\bar{r}) && \text{conservation de la charge électrique} \end{aligned} \right\} (4-2)$$

où  $\rho$  est la densité de charge locale.

Si l'on introduit le déplacement élastique  $\bar{u}$  et le potentiel  $V$  tel que  $\bar{E} = -\text{grad}V$ , le système (4-1) devient :

$$\left. \begin{aligned} c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + e_{mij} \frac{\partial^2 V}{\partial x_m \partial x_j} &= 0 \\ e_{jkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} - \chi_{j\ell} \frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_\ell} &= \rho \end{aligned} \right\} (4-3)$$

Dans le cas des isolants, la densité de charge locale  $\rho(\bar{r})$  est nulle. Il est alors possible de résoudre sans approximation le système d'équations (4-3) à l'aide d'une méthode identique à la méthode proposée par Eshelby [95] pour le calcul du champ de déformation d'une dislocation en milieu anisotrope.

La seule modification apportée à la méthode d'Eshelby consiste à considérer un quadrivecteur de composantes  $(\bar{u}, V)$  et par conséquent à choisir une condition limite supplémentaire concernant les grandeurs électriques.

Ce problème a été résolu par Saada [27] qui considéra l'existence d'une charge a priori non nulle au coeur de la dislocation. La solution du système d'équations (4-3) dans le cas des isolants ( $\rho(\bar{r}) = 0$ ) montre néanmoins que quelle que soit la valeur de cette charge, l'effet de couplage n'influence pratiquement pas les composantes du champ de déformation. Cela signifie que l'on obtient avec une très bonne approximation le champ de déformation en résolvant simplement le système d'équations :

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0 \quad (4-4)$$

Le potentiel piezoélectrique cherché est, par suite, solution du système d'équations

$$\chi_{j\ell} \frac{\partial^2 v}{\partial x_j \partial x_\ell} = e_{jkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_\ell} \quad (4-5)$$

Dans le cas des semi-conducteurs, le potentiel piezoélectrique est par contre écranté par les charges libres. La densité locale  $\rho(r)$  est donc différente de zéro. La résolution du système d'équations (4-3) nécessite la connaissance du type d'écrantage du potentiel piezoélectrique. Les potentiels piezoélectriques écrantés que l'on obtient sont cependant très compliqués et n'ont permis, à ce jour, que l'évaluation grossière de la mobilité des porteurs libres.

Nous utilisons, pour le calcul des mobilités, la méthode de l'énergie perdue, que nous détaillons au chapitre suivant. Cette méthode permet de calculer, précisément et dans une large gamme de température la mobilité des porteurs libres. Elle tient compte de manière auto-cohérente de l'écrantage dynamique des potentiels diffuseurs par les porteurs libres. Elle nécessite donc la connaissance de l'expression non écrantée des potentiels diffuseurs. Aussi ne pouvons nous pas utiliser la solution du système d'équations proposée dans [28].

De façon à obtenir l'expression du potentiel non écranté, nous résolvons par conséquent le système d'équations (4-3) en prenant comme dans le cas des isolants une densité locale de charge  $\rho(r) = 0$ .

L'approximation de cette méthode réside donc dans le fait que l'on néglige ainsi la correction apportée au champ de déformation par le phénomène d'écrantage, comme l'avait déjà proposé Merten [24].

Les dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis du tellure sont parallèles à l'axe  $\bar{c}$ . L'expression (4-5) se simplifie :

$$\Delta V_{\text{piezo}} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_L} \sum_{jkl} e_{jkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}$$

où  $\epsilon_L$  est la constante diélectrique du tellure ( $\epsilon_L = \kappa_{11}$ ) et où les  $u_k$  sont les déplacements introduits par la dislocation, calculés au préalable par la méthode d'Eshelby, sans tenir compte de l'effet piezoélectrique.

Le potentiel piezoélectrique non écranté, satisfait à une équation différentielle dont la solution dépend essentiellement de la complexité plus ou moins grande introduite par l'anisotropie du matériau. On peut cependant montrer que le champ de déformation d'une dislocation dans un milieu quelconque étant toujours de la forme  $f(\theta)/\rho$ , le potentiel piezoélectrique recherché ne peut qu'être une fonction angulaire  $F(\theta)$  indépendant du module  $\rho$  (distance à la dislocation (cf. Annexe 2-1)).

## §-5. CONCLUSION

Les dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis peuvent a priori affecter la mobilité des porteurs libres par les différents types de diffusion que nous venons de décrire. Bien que ces mécanismes agissent simultanément, nous en calculerons leurs effets séparément de façon à déterminer leurs caractéristiques essentielles : telles l'ordre de grandeur de la mobilité, sa dépendance en température.

**V - CALCUL DE LA MOBILITE DES  
PORTEURS LIBRES ASSOCIEE AUX  
DISLOCATIONS PAR LA METHODE DE  
L'ENERGIE PERDUE**

## §-1. INTRODUCTION

Les calculs de mobilité s'effectuent généralement en résolvant l'équation de diffusion de Boltzmann, dans l'approximation du temps de relaxation. Ces calculs classiques sont usuellement limités à l'utilisation d'un écrantage statique des potentiels diffuseurs. Dans les semi-conducteurs cet écrantage est assuré par les impuretés ionisées et par les porteurs libres.

A basse température, lorsque les impuretés ne sont que partiellement ionisées, l'écrantage provient essentiellement d'un taux d'ionisation différent au voisinage des centres diffuseurs. A plus haute température, lorsque toutes les impuretés sont ionisées l'écrantage est assuré par les porteurs libres dont la distribution est perturbée par les centres diffuseurs. Ce dernier effet est prépondérant dans le domaine extrinsèque de conductivité que nous avons étudié expérimentalement.

Dans ce dernier cas, il est possible de calculer la mobilité des porteurs libres par la méthode de "l'énergie perdue". Cette méthode est fondée sur l'équivalence de l'énergie Joule et de l'énergie perdue par un centre diffuseur en mouvement dans le milieu diélectrique que constituent les porteurs libres.

La distribution hétérogène des porteurs libres autour des centres diffuseurs produit un champ électrique induit que l'on peut calculer si l'on connaît la fonction diélectrique électronique du matériau. Lorsque les centres diffuseurs sont en mouvement, il y a dissipation d'une énergie correspondant au travail des charges perturbatrices dans le champ électrique induit.

Mott [96] puis Calkin et Nicholson [97] proposèrent d'identifier l'énergie perdue par le mouvement des centres diffuseurs à l'énergie Joule obtenue dans l'expérience équivalente de conductivité où cette fois ce sont les porteurs libres qui se déplacent en présence de centres diffuseurs fixes. La mobilité des porteurs libres en est aisément déduite. Elle est calculée en tenant compte d'un écrantage dynamique des centres diffuseurs par les porteurs libres.



Les premiers calculs de ce type furent restreints au cas des impuretés dans les métaux normaux pour lesquels on peut assimiler la surface de Fermi à la sphère des électrons libres. La fonction diélectrique est alors donnée par l'expression suivante [98] :

$$\epsilon(q, \omega) = \epsilon_L \left( 1 - \frac{e^2}{\epsilon_L \epsilon_0 q^2} \sum_k \frac{f(k+q) - f(k)}{E(k+q) - E(k) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \right) \quad (1-1)$$

où  $f(k)$  est la distribution de Fermi - Dirac correspondant au cas du gaz dégénéré.

Différentes approximations de cette expression peuvent être obtenues. Lorsque l'on considère une expérience de conductivité dans le domaine ohmique (c'est-à-dire lorsque la vitesse de conduction des porteurs est faible devant leur vitesse de Fermi), il convient d'utiliser la limite de  $\epsilon(q, \omega)$  obtenue lorsque la fréquence  $\omega$  tend vers zéro.

Gerlach étendit récemment (1974) l'utilisation de cette méthode au cas des semi-conducteurs, dans leur domaine de conductivité extrinsèque. Il assimila les électrons de conduction ou les trous de valence du semi-conducteur à un gaz non dégénéré de particules libres. Il utilisa la fonction diélectrique des électrons libres (1-1) et la fonction de distribution de Boltzmann correspondant à l'approximation du gaz classique. Il put en déduire la mobilité des porteurs libres associés à la présence d'impuretés ionisées ainsi qu'à la présence de dislocations assimilées à des lignes chargées [99, 100].

Néanmoins dans des phénomènes de diffusion plus complexes, les centres diffuseurs ne se représentent pas toujours par des distributions de charges aussi simples que celles considérées dans les travaux précédents. Aussi dans la première partie de ce chapitre, nous étendons le calcul de l'énergie perdue aux cas de centres diffuseurs quelconques [61].

Notre méthode de calcul est également fondée sur la fonction diélectrique du gaz d'électrons libres. Elle fait apparaître la transformée de Fourier  $V_{ex}(q)$  du potentiel diffuseur. Cette transformée de Fourier  $V_{ex}(q)$  correspond en fait à l'élément de la matrice de transition  $V(k, k+q)$  obtenue

dans le calcul classique lorsque l'on considère les ondes planes des électrons libres :

$$V_{\bar{k}, \bar{k} + \bar{q}} = \langle \bar{k} | V_{\text{ex}}(\bar{r}) | \bar{k} + \bar{q} \rangle = \int V_{\text{ex}}(\bar{r}) e^{i\bar{q}\bar{r}} d^3r = V_{\text{ex}}(q) \quad (1-2)$$

Ce calcul est donc bien adapté au cas des métaux normaux.

Dans les semi-conducteurs, les électrons de conduction ou les trous de valence ne sont plus décrits par des ondes planes. Supposons que l'on puisse décrire leurs fonctions d'onde par des fonctions de la forme

$$|\psi_{\bar{k}}(\bar{r})\rangle = u_{\bar{K}}(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}} \quad (1-3)$$

où  $u_{\bar{K}}(\bar{r})$  est la fonction d'onde en bord de bande. On voit alors que les éléments de matrice de transition  $V_{\bar{k}, \bar{k} + \bar{q}}$  même si on se limite à des transitions à l'intérieure d'une même bande, ne sont plus équivalents à la transformée de Fourier du potentiel perturbateur :

$$V(\bar{k}, \bar{k} + \bar{q}) = \langle \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) | V_{\text{ex}}(\bar{r}) | \psi_{\bar{k} + \bar{q}}(\bar{r}) \rangle = \int V_{\text{ex}}(\bar{r}) |u_{\bar{K}}(\bar{r})|^2 e^{i\bar{q}\bar{r}} d^3r \quad (1-4)$$

Ceci suggère, qu'il n'est pas légitime d'assimiler a priori, les différentes vallées de conduction à un gaz d'électrons ou de trous libres et d'appliquer directement le calcul que nous proposons dans ce chapitre. En particulier cette méthode néglige les termes d'umklapp qui pourraient intervenir à cause de la périodicité de la fonction  $u_{\bar{K}}(\bar{r})$ , pour certains types de potentiels.

Néanmoins, nous montrons dans l'annexe 1 que si l'on se limite au domaine extrinsèque de conductivité, et aux faibles perturbations, c'est-à-dire si l'on interdit toute transition interbande, (création de paires électron-trou), le calcul proposé au paragraphe suivant peut dans une bonne approximation s'appliquer au cas des semi-conducteurs.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous appliquons ce type de calcul aux différents potentiels de diffusion que l'on peut associer aux dislocations. Nous présentons en outre les résultats numériques établis

dans le cas particulier du tellure en utilisant les valeurs expérimentales correspondant aux différents cas rencontrés dans ce travail.

## §-2. CALCUL DE L'ÉNERGIE PERDUE

Nous assimilons l'ensemble des porteurs libres à un gaz d'électrons libres dont la fonction diélectrique est donnée par l'expression (1-1).

Considérons un potentiel électrostatique  $\delta v_{\text{ex}}(\bar{r}, t)$  représentant un centre diffuseur qui se déplace uniformément à la vitesse  $\bar{v}$  à travers un gaz de porteurs libres.

$\delta v_{\text{ex}}(\bar{r}, t)$  dépend alors du temps de la façon suivante

$$\delta v_{\text{ex}}(\bar{r}, t) = \delta v_{\text{ex}}(\bar{r} - \bar{v}t, 0) \quad (2-1)$$

Ce potentiel diffuseur peut aussi se représenter par une distribution de charges  $\rho_{\text{ex}}(\bar{r}, t)$  déterminée par l'équation de Poisson

$$\Delta (\delta v_{\text{ex}}(\bar{r}, t)) + \frac{\rho_{\text{ex}}(\bar{r}, t)}{\epsilon_0} = 0 \quad (2-2)$$

En modifiant la distribution des électrons libres, le potentiel diffuseur  $\delta v_{\text{ex}}$  crée un champ électrique induit

$$\bar{E}_{\text{ind}}(\bar{r}, t) = -\bar{\nabla} v_{\text{ind}}(\bar{r}, t) \quad (2-3)$$

dans lequel la distribution de charge  $\rho_{\text{ex}}(\bar{r}, t)$  travaille. L'énergie perdue par unité de temps est alors donnée par

$$\frac{dW}{dt} = - \int_{\Omega} \bar{v} \cdot \bar{E}_{\text{ind}}(\bar{r}, t) \rho_{\text{ex}}(\bar{r}, t) d^3r \quad (2-4)$$

où  $\Omega$  est le volume du cristal.

Il est possible de déterminer le potentiel  $v_{\text{ind}}$  donc le champ électrique  $\bar{E}_{\text{ind}}$ , à l'aide de la fonction diélectrique dont l'expression (1-1) est connue dans l'espace réciproque. Dans ce cas

$$\bar{E}_{\text{ind}}(\bar{q}, \omega) = i\bar{q} V_{\text{ind}}(\bar{q}, \omega) = i\bar{q} \delta V_{\text{ex}}(\bar{q}, \omega) \left\{ \frac{1}{\epsilon(\bar{q}, \omega)} - 1 \right\} \quad (2-5)$$

Utilisant la transformée de Fourier de l'expression (2-1) :

$$F(\delta V_{\text{ex}}(\bar{r} - \bar{v}t, 0)) = 2\pi \delta V_{\text{ex}}(\bar{q}) \delta(\omega - \bar{q} \cdot \bar{v}) \quad (2-6)$$

on obtient pour l'énergie perdue (2-4) l'expression suivante :

$$\frac{dW}{dt} = -i \frac{\epsilon_0}{(2\pi)^3} \int (\bar{q} \cdot \bar{v}) q^2 |\delta V_{\text{ex}}(\bar{q})|^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon(\bar{q}, \bar{q} \cdot \bar{v})} - 1 \right\} d^3q \quad (2-7)$$

L'énergie perdue correspond, en fait, à la partie réelle de l'expression (2-7) ; aussi seule la partie imaginaire de  $\epsilon^{-1}(\bar{q}, \omega)$  intervient dans le calcul.

Restreignant le calcul au domaine de validité de la loi d'Ohm ( $\omega \rightarrow 0$ ) il suffit de considérer, ici, le premier terme du développement de  $\epsilon^{-1}(\bar{q}, \omega)$  en fonction de  $\omega$ , c'est-à-dire :

$$I_m \epsilon^{-1}(\bar{q}, \bar{q} \cdot \bar{v}) \approx (\bar{q} \cdot \bar{v}) \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} I_m \epsilon^{-1}(\bar{q}, \omega) \right\}_{\omega=0} \quad (2-8)$$

Nous pourrions ici calculer les effets liés à l'écart à la loi d'Ohm en utilisant un développement plus complet de la fonction diélectrique. Ce type de calcul pourrait être utilisé pour décrire par exemple les expériences de conductivité par électrons chauds.

L'énergie perdue par le mouvement d'un potentiel diffuseur  $\delta V_{\text{ex}}(\bar{r})$  dans un milieu diélectrique est donc finalement donnée par l'expression suivante :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\epsilon_0}{(2\pi)^3} \int (\bar{q} \cdot \bar{v})^2 q^2 |\delta V_{\text{ex}}(\bar{q})|^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} I_m \epsilon^{-1}(\bar{q}, \omega) \right\}_{\omega=0} d^3q \quad (2-9.a)$$

(où  $\delta V_{\text{ex}}(\bar{q})$  est la transformée de Fourier du potentiel diffuseur non écrané)

où encore, en fonction de la distribution de charge  $\rho_{\text{ex}}(\bar{q})$  :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{1}{\epsilon_0 (2\pi)^3} \int (\bar{q} \cdot \bar{v})^2 \frac{|\rho_{\text{ex}}(\bar{q})|^2}{q^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} I_m \epsilon^{-1}(\bar{q}, \omega) \right\}_{\omega=0} d^3q \quad (2-9.b)$$

La mobilité des porteurs libres associée au centre diffuseur considéré est alors obtenue en identifiant l'énergie perdue  $dW/dt$  à l'énergie Joule créée dans le cristal lors de l'expérience de conductivité :

$$\frac{1}{\Omega} \frac{dW}{dt} \equiv \frac{J^2}{\sigma} = \frac{n e v^2}{\mu} \quad (2-10)$$

### §-3. CALCULS DE MOBILITÉS CONTRÔLÉES PAR LES DISLOCATIONS

#### 3-1. DIFFUSION DES PORTEURS LIBRES PAR LES CHARGES DE COEUR D'UNE DISLOCATION

Nous déduisons de la formule (2-9.b) un résultat établi initialement par E. Gerlach [10].

Considérons une dislocation rectiligne parallèle à l'axe Oz du système de références et portant une charge dont la densité linéique est une fonction de la température

$$\begin{cases} \rho(\bar{r}, T) = \rho_0(T) \delta(x) \delta(y) \\ \rho(\bar{q}, T) = \rho_0(T) 2\pi \delta(q_z) \end{cases} \quad (3-1.1)$$

La présence de la fonction  $\delta(q_z)$  montre qu'il ne faut attendre aucun effet de diffusion lorsque le courant est parallèle à la dislocation (présence du produit scalaire  $\bar{q} \cdot \bar{v}$  dans l'expression de l'énergie perdue (2-9))

$$\frac{1}{\mu} \Big|_{//} = 0 \quad (3-1.2)$$

Ce résultat évident provient de la symétrie de translation le long de la dislocation.

Limitant le calcul au domaine de la loi d'Ohm, nous utilisons l'expression de  $I_m \varepsilon^{-1}(\bar{q}, \omega)$  obtenue pour le cas classique (distribution de Boltzmann) lorsque  $\omega \rightarrow 0$ . Cette expression a été calculée par Gerlach dans [99]

$$I_m \varepsilon^{-1}(\bar{q}, \omega) = - \frac{\pi^{1/2} n e^2 m^{*1/2} \omega q e^{-\frac{\hbar^2 q^2}{8mKT}}}{2^{1/2} \varepsilon_O \varepsilon_L^2 (KT)^{3/2} (q^2 + k_{DH}^2)^2} \quad (3-1.3)$$

où  $k_{DH} = (ne^2/\varepsilon_O \varepsilon_L KT)^{1/2}$  est le paramètre d'écran de Debye Hückel.

On obtient alors :

$$\left. \frac{1}{\mu} \right|_1 = \frac{D \rho_O^2(T) m^{*1/2}}{2^{5/2} \pi^{1/2} (\varepsilon_O \varepsilon_L)^{3/2} n^{1/2}} \frac{f_2(n, T)}{KT} \quad (3-1.4)$$

où  $f_2(n, T) = f(p) = \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-px^2}}{(1+x^2)^2} dx$ ,  $p = \frac{\hbar^2 k_{DH}^2}{8mKT}$

est une fonction que l'on peut calculer numériquement en fonction de n ou T. D est la densité de dislocations.

Cette expression s'applique au cas de la dislocation  $\bar{c}$  vis pour laquelle

$$\rho_O(T) = \rho_O \exp - \frac{u}{KT} \quad (u \sim 1 \text{ meV})$$

On trouve

$$\left. \frac{1}{\mu} \right|_1^{c \text{ vis}} \# 1,4 \cdot 10^{-6} \frac{D}{n^{1/2}} e^{-\frac{u}{KT}} \frac{f_2(n, T)}{T} \text{ Vs cm}^{-2} \quad (3-1.5)$$

Considérant alors les paramètres expérimentaux suivants :  $D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\rho_O(100 \text{ K}) \sim 10^{-2} \text{ e \AA}$ ,  $n_O = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , on obtient la courbe représentée figure 1. La mobilité réciproque croît jusqu'à une valeur maximum de l'ordre de  $10^{-4} \text{ Vs cm}^{-2}$ , obtenue à  $T \sim 12 \text{ K}$ , puis décroît très rapidement vers 0 pour les basses températures.

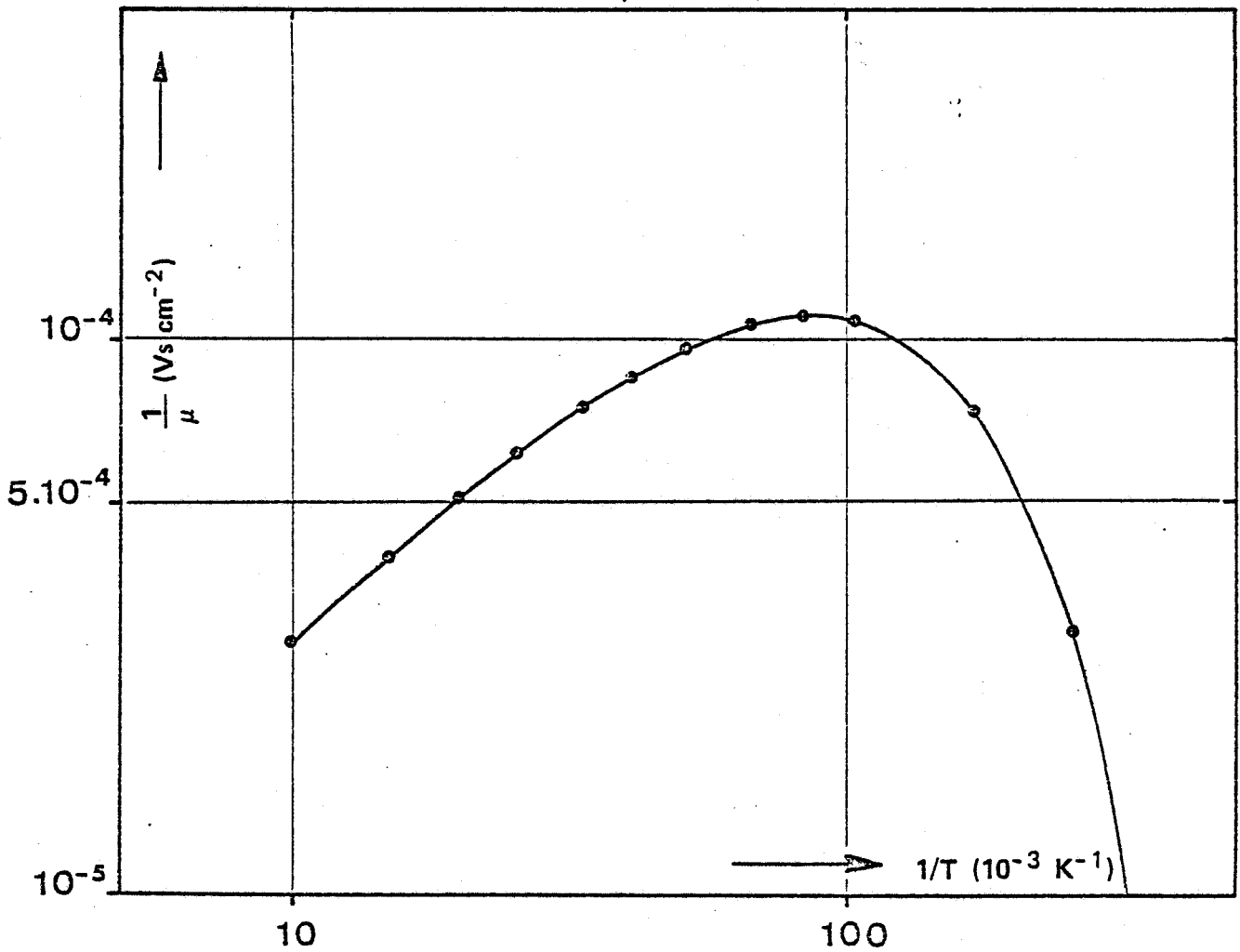


Figure 1 Mobilité réciproque induite par des dislocations assimilées à des lignes chargées dont la densité varie comme

$$\rho = \rho_0 \exp - \frac{u}{KT}$$

Cette courbe correspond au cas des dislocations  $\bar{c}$  vis pour lesquelles

$$u \sim 1 \text{ meV} \quad D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2} \quad b \sim 6 \text{ \AA}$$

$$n \sim 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad \rho_0 \sim 10^{-2} \text{ e \AA}^{-1}$$



La forme de la courbe  $\mu^{-1}(1/T)$ , ainsi que l'ordre de grandeur des valeurs obtenues ( $\mu_{MAX}^{-1}, T_{MAX}$ ) sont en bon accord avec la courbe expérimentale chapitre III, figure 17.

Dans le cas des dislocations  $\bar{c}$  vis, l'hypothèse de la diffusion des porteurs libres par la charge linéique que porte la dislocation est donc plausible.

Par contre, ce résultat théorique ne correspond pas au comportement de  $\mu^{-1}(1/T)$  des dislocations  $\bar{a}$  coin que l'on a trouvé

- 1) anisotrope,
- 2) pratiquement indépendant de la température.

### 3-2. POTENTIEL DE DEFORMATION

#### 3-2.1 Généralités

Le potentiel de déformation est proportionnel à la dilatation introduite dans le matériau par les dislocations. Le champ de déformation des dislocations est fortement affecté par l'anisotropie du tellure. Ainsi la dislocation  $\bar{c}$  vis introduit une dilatation comparable à celle de la dislocation  $\bar{a}$  coin. Ce fait nous permet de négliger les effets associés au terme correctif introduit par Bonch - Bruevich.

Les composantes  $\epsilon_{ij}(\bar{r})$  du tenseur de déformation des dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis ont été calculées suivant la méthode proposée par Eshelby [95]. Elles s'expriment de façon très complexe à l'aide de coefficients déterminés par un calcul machine. Néanmoins la trace du tenseur de déformation peut toujours se mettre sous la forme

$$\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{r}) = \frac{b_0}{2\pi} \frac{f(\theta)}{\rho} \quad (3-2.1.1)$$

où  $f(\theta)$  est une fonction périodique (période  $2\pi$ ) analysable en série de Fourier. La transformée de Fourier de  $\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{r})$  est alors obtenue sous forme d'une série, en calculant la transformée de Fourier de chacun des termes de la série exprimant  $f(\theta)/\rho$  (cf. Annexe A-2.1)



On obtient alors

$$V_{\text{ex}}(\bar{q}, \varphi) = E_1 \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) = - 2\pi j \frac{E_1 b}{q} \delta(q_z) F(\varphi) \quad (3-2.1.2)$$

où

$$F(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{2n+1} \cos \left\{ (2n+1) (\varphi - \varphi_{2n+1}) \right\} \quad (3-2.1.3)$$

Les termes  $A_{2n+1}$  et  $\varphi_{2n+1}$  dépendent du type de dislocation considéré et des coefficients du tenseur élastique.

La fonction  $F(\varphi)$  est obtenue avec la précision désirée à l'aide d'un calcul machine. La série exprimant  $F(\varphi)$  converge très vite. Elle a été néanmoins calculée numériquement jusqu'à l'ordre 20.

Introduisant  $V_{\text{ex}}(q, \varphi)$  dans l'expression de l'énergie perdue (2-10), on obtient dans l'approximation de Boltzmann :

$$\frac{1}{\mu} \Big)_{\text{Boltz}} = \frac{b^2 E_1^2 e^2 m^{1/2} D}{2 (2\pi)^{3/2} \epsilon_0^{1/2} \epsilon_L^{5/2} K^2} \frac{n^{1/2} f_4(n, T)}{T} A(\xi) \quad (3-2.1.4)$$

où

$$f_4(n, T) = f_4(p) = \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^{-px^2}}{(1+x^2)^2} dx$$

est une fonction numériquement calculable.

$A(\xi)$  est la fonction exprimant l'anisotropie de  $\mu_{\text{dislo}}^{-1}$  dans le plan perpendiculaire à la dislocation. Nous donnons son expression en annexe.  $\xi$  est, dans le cas de la dislocation  $\bar{a}$  coin, l'angle formé entre la direction de courant et le vecteur de Burgers.  $A(\xi)$  est une constante pour les dislocations vis.

La dépendance en température de  $\mu^{-1}$ , décrite par la fonction  $T^{-2} f_4(n, T)$  est la même pour les deux types de dislocation  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis.

A température nulle, ou pour les valeurs élevées de la densité de porteurs  $n$ , l'approximation du gaz classique n'est plus valable. Le calcul

peut se faire en utilisant la limite de la fonction diélectrique obtenue dans l'approximation de Thomas Fermi [97]

$$\frac{1}{\mu} \epsilon^{-1}(q, \omega)_{T=0} = - \frac{\pi k_{FT}^2 \omega q}{2 \epsilon_L v_F (q^2 + k_{FT}^2)^2} \quad (3-2.1.5)$$

où

$$k_{FT}^2 = \left( \frac{m e^2}{\hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_L} \right)^{1/2} \left( \frac{3n}{\pi^4} \right)^{1/6}$$

est le paramètre d'écran de Thomas Fermi.

On obtient alors

$$\left. \frac{1}{\mu} \right)_{T=0} = \frac{b^2 E_1^2 \epsilon_0 D k_{FT}^3}{8\pi n e v_F \epsilon_L} F_4(\alpha) \cdot A(\xi) \quad (3-2.1.6)$$

où

$$F_4(\alpha) = \int_0^\alpha \frac{x^4 dx}{(1+x^2)^2} \quad \text{et} \quad \alpha = 2 \frac{k_F}{k_{FT}}$$

### 3-2.2 Dislocations à coin

La figure 2 représente la fonction  $A(\xi)$ . Elle montre que  $\mu^{-1}$  est anisotrope. L'effet de diffusion le plus faible est obtenu lorsque le courant est parallèle au vecteur de Burgers. Le rapport d'anisotropie  $\mu_{//} / \mu_{\perp}$  vaut pratiquement 3, valeur que l'on obtient exactement lorsque l'on considère la dislocation coin d'un milieu isotrope.

Le calcul numérique conduit (dans le cas où le courant est parallèle au vecteur de Burgers) à :

$$\left. \frac{1}{\mu} \right)_{\text{Boltz}}^{\text{a coin } //} \# 1,2 \cdot 10^{-25} D n^{1/2} \frac{f_4(n,T)}{T^2} \text{ (Vs cm}^{-2}\text{)} \quad (3-2.1.7)$$

La figure 3 représente  $\mu_{//}^{-1}$  calculée avec  $D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$  pour différentes valeurs de  $n$ . L'ordre de grandeur que l'on obtient à basse température (pour  $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) est cependant très faible. On trouve à 5 K  $\mu_{//}^{-1} \sim 2 \cdot 10^{-9} \text{ Vs cm}^{-2}$ .

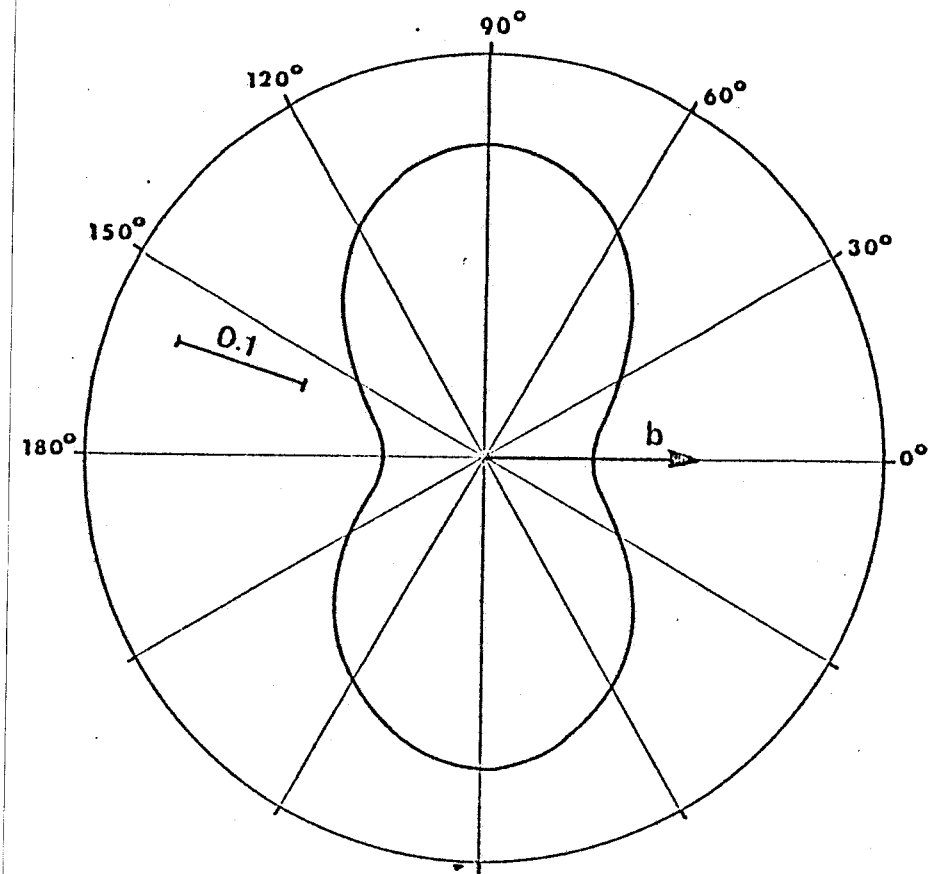


Figure 2 Potentiel de déformation.  
Anisotropie de  $\mu^{-1}$  autour de la dislocation à coin.

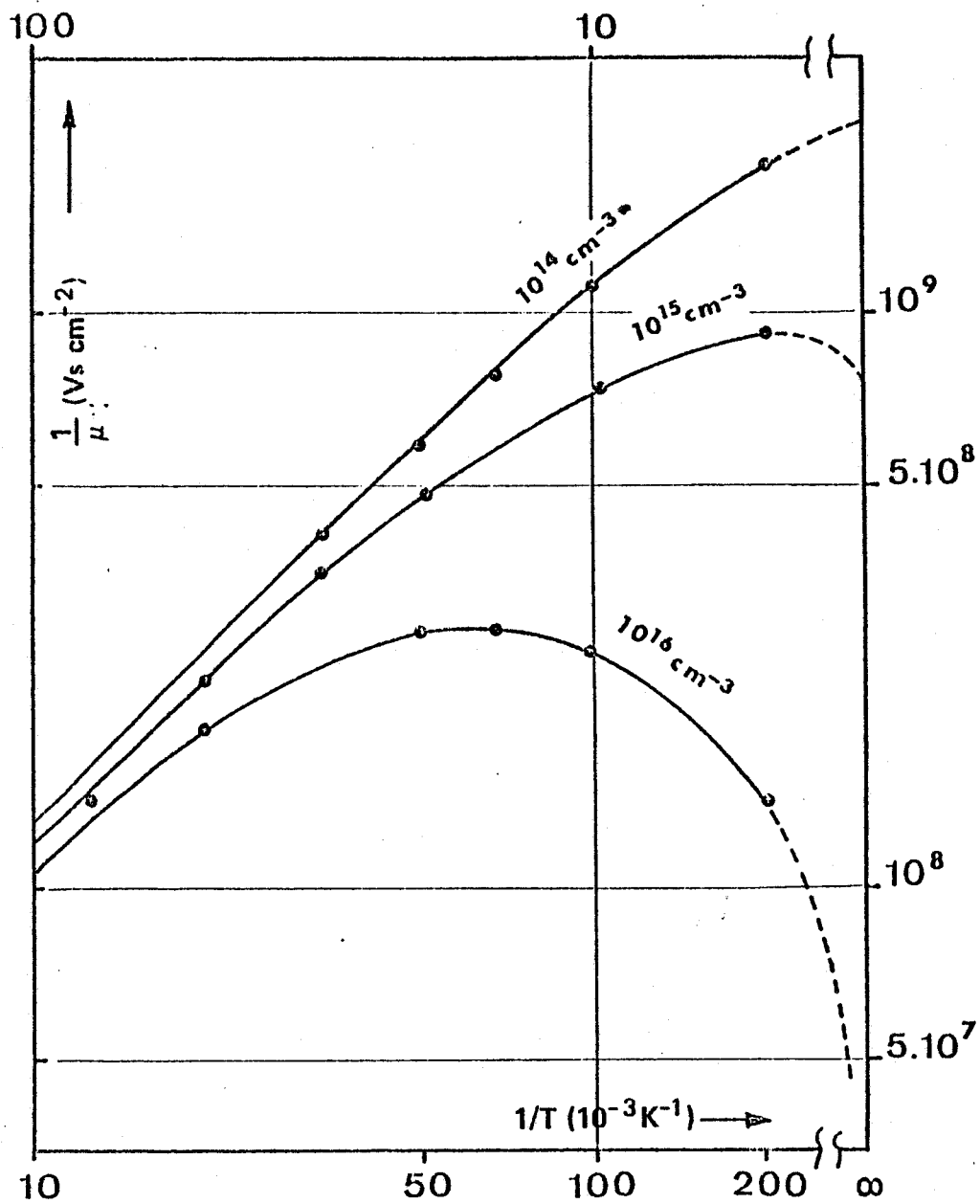


Figure 3 Potentiel de déformation. Ordre de grandeur de  $\mu^{-1}$  obtenu pour  $\sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$  dislocations à coin.

L'effet du potentiel de déformation décrit par la formule de Bardeen et Shockley ne justifie donc pas la valeur expérimentale de la résistivité supplémentaire introduite par les dislocations à coin ( $\sim 3.10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ ).

### 3-2.3 Dislocations $\bar{c}$ vis

Les résultats numériques montrent que la mobilité réciproque est isotrope dans le plan perpendiculaire aux lignes de dislocations. Ce résultat est en bon accord avec l'étude phénoménologique présentée au chapitre III.

La dépendance en température de  $\mu^{-1}$ , identique à celle que l'on trouve pour les dislocations à coin, ne concorde pas avec la forme de la courbe obtenue expérimentalement (chapitre III, figure 17).

La valeur de  $\mu^{-1}$  obtenue à  $T = 5$  K pour  $D = 10^9$   $\text{cm}^{-2}$ ,  $n = 10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$  est de l'ordre de  $10^{-7}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ . Cette valeur est beaucoup plus faible que l'ordre de grandeur ( $10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ ) trouvé expérimentalement.

Le potentiel de déformation ne justifie donc pas la variation de la mobilité des porteurs libres provoquée par les dislocations  $\bar{c}$  vis.

### 3-3. EFFET PIEZOELECTRIQUE

Le calcul du potentiel piezoélectrique non écranté, dans l'approximation proposée au chapitre précédent, nécessite, comme dans le cas du potentiel de déformation la connaissance des déplacements  $u_k(x_1, x_2)$ . Pour les dislocations à coin et  $\bar{c}$  vis, compte tenu de la forme du tenseur piezoélectrique, ce potentiel (cf. Annexe 2-2) vérifie l'équation :

$$\Delta V_{\text{piezo}}(\bar{r}) = \frac{e_{11}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \left\{ \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} - 2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} \right\} \quad (3-3.1)$$

soit en coordonnées polaires :

$$\Delta V_{\text{piezo}}(\bar{r}) = \frac{e_{11}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \frac{b}{2\pi} \frac{f(\theta)}{\rho^2} \quad (3-3.2)$$

La transformée de Fourier de  $V_{\text{piezo}}(\vec{r})$  s'obtient, de la même façon que pour le potentiel de déformation, en décomposant  $f(\theta)$  en série de Fourier puis en intégrant terme à terme.

On trouve :

$$V_{\text{piezo}}(\vec{q}, \varphi) = \frac{\pi b e_{11}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \frac{\delta(q_z)}{q^2} F(\varphi) \quad (3-3.3)$$

où

$$F(\varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n} \cos 2n(\varphi - \varphi_{2n})$$

les termes  $A_{2n}$  et  $\varphi_{2n}$  dépendent du type de dislocation considéré et des coefficients du tenseur élastique.

L'expression (3-3.3) correspond bien à la transformée de Fourier du potentiel piezoélectrique qu'avait proposée Merten [24] :

$$\delta V_{\text{ex}}(\vec{r}) = \sum_n \alpha_{2n} \cos 2n(\theta - \theta_{2n}) \quad (3-3.4)$$

Ce potentiel non écranté est indépendant de la distance à l'axe de la dislocation.

Introduisant l'expression (3-3.3) dans la formule (2-10), on obtient l'expression de la mobilité

■ dans le cas classique (Approximation de Boltzmann)

$$\left. \frac{1}{\mu} \right)_{\text{Boltz}} = \frac{b^2 e_{11}^2 m^{1/2} D}{8(2\pi)^{3/2} \epsilon_0^{3/2} \epsilon_L^{7/2} K} A(\xi) \frac{f_2(n, T)}{n^{1/2} T} \quad (3-3.5)$$

où  $f_2(n, T)$  est la fonction déjà rencontrée dans le cas de la ligne chargée (section 3-1).  $A(\xi)$  est la fonction d'anisotropie.

■ à  $T = 0$  (Approximation de Thomas - Fermi)

$$\left. \frac{1}{\mu} \right)_{T=0} = \frac{b^2 e^2 D k_{FT}}{32\pi \epsilon_0 \epsilon_L^3 n e v_F} A(\xi) F_2(\alpha) \quad (3-3.6)$$

où

$$F_2(\alpha) = \int_0^\alpha \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^2} \quad \alpha = 2 \frac{k_F}{k_{FT}}$$

La dépendance en température de  $\mu_{\text{piezo}}^{-1}$  est décrite par la fonction  $T^{-1} f_2(n, T)$ . Cette fonction est la même que celle d'une ligne chargée dont la densité linéique serait indépendante de la température. La figure 4 représente la fonction  $T^{-1} n^{-1/2} f_2(n, T)$  pour différentes valeurs du paramètre  $n$ .

### 3-3.1 Dislocations à coin

La fonction d'anisotropie  $A(\xi)$  est représentée figure 5. Cet effet d'anisotropie est pratiquement identique à celui que l'on obtient dans le cas du potentiel de déformation. L'effet de diffusion le plus faible est obtenu lorsque le courant est parallèle au vecteur de Burgers. Le rapport d'anisotropie  $\mu_{//} / \mu_{\perp}$  est de l'ordre de 3. La similitude provient sans doute du fait que les termes de dilatation du tenseur de déformation jouent un rôle prépondérant dans l'expression de  $V_{\text{piezo}}(q, \varphi)$ .

Le calcul numérique conduit à

$$\left. \frac{1}{\mu} \right)_{\text{Boltz}} \text{ // a coin} = 1,9 \cdot 10^{-8} \frac{D}{n^{1/2}} \frac{f_2(p)}{T} \text{ Vs cm}^{-2} \quad (3-3.1.1)$$

soit un effet maximum de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-6}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$  pour  $D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$  et  $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Bien que plus important que l'effet associé au potentiel de déformation, ce résultat ne justifie pas la valeur expérimentale ( $3 \cdot 10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ ) observée.

### 3-3.2 Dislocations $\bar{c}$ vis

Elles produisent un effet piezoélectrique du même ordre de grandeur que celui que l'on obtient dans le cas de la dislocation à coin.

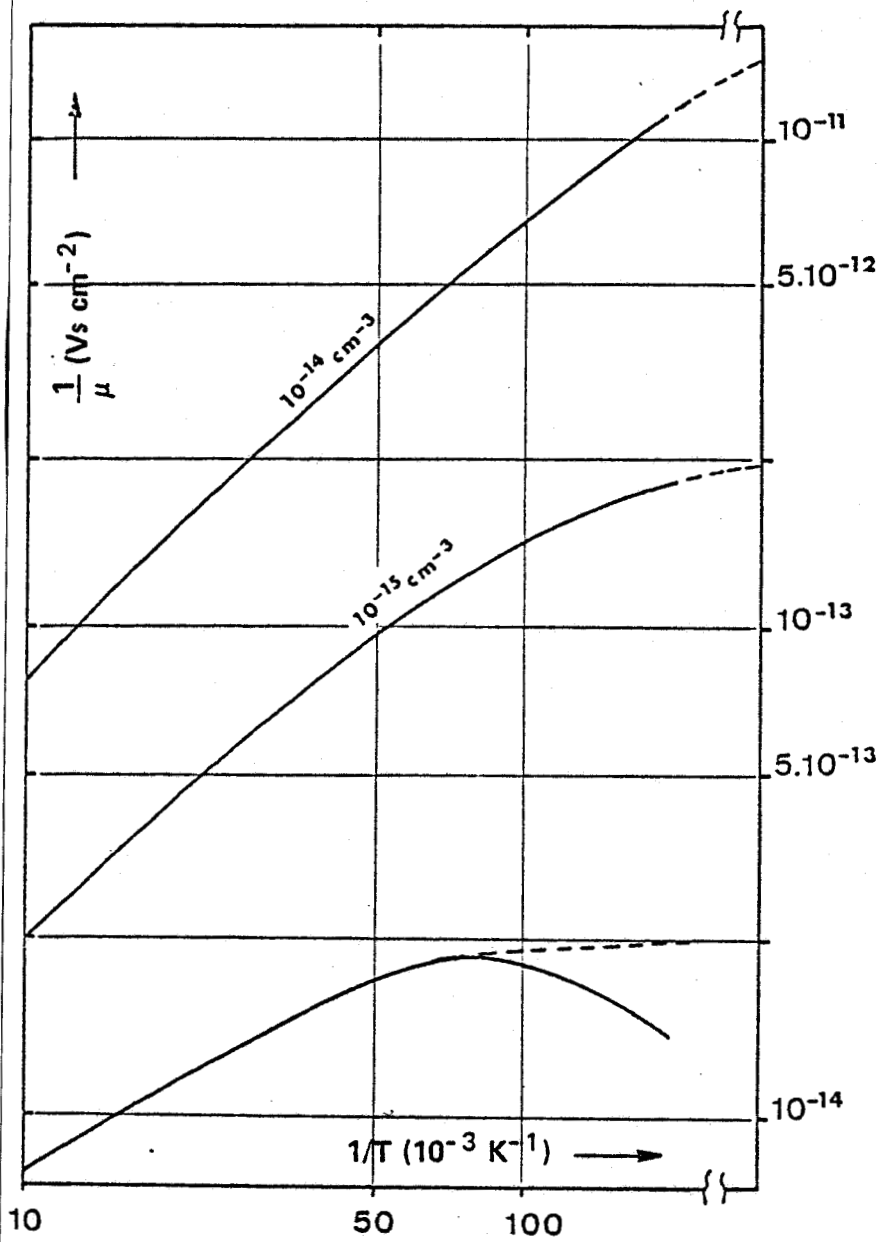
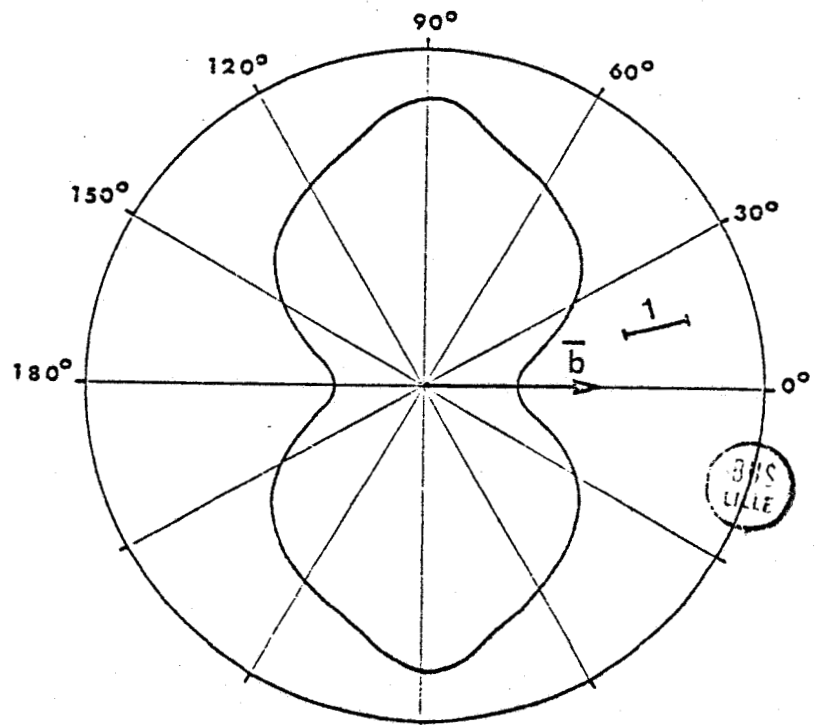


Figure 4 Potentiel piezo-électrique. Tracé de la fonction

$$T^{-1} n^{-1/2} f_2(n, T)$$

pour différentes valeurs de la densité  $n$  de porteurs libres.

Figure 5 Potentiel piezoélectrique. Anisotropie obtenue autour de la dislocation a coin.



Compte tenu de la densité plus grande de dislocation  $\bar{c}$  vis ( $10^9 \text{ cm}^{-2}$ ), on peut attendre un effet de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-5}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ . Cet ordre de grandeur est trop faible pour justifier les résultats expérimentaux. La forme de la courbe théorique (pour  $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) tendant vers sa valeur maximale à  $T = 0$  ne correspond pas au comportement de la courbe expérimentale (présence d'un maximum).

#### §-4. CONCLUSION

Les différents processus de diffusion que nous avons étudiés séparément, agissent en fait simultanément sur les porteurs libres.

Attribuer un type de diffusion donné n'a donc de sens que dans la mesure où l'un des effets possibles est nettement supérieur aux autres.

Nous comparons les résultats expérimentaux avec les résultats théoriques sur les trois points suivants :

- 1) L'ordre de grandeur de la résistivité induite,
- 2) La dépendance en température de  $\mu^{-1} (1/T)$ ,
- 3) L'existence éventuelle d'un comportement anisotrope de la mobilité.

Les différents résultats théoriques et expérimentaux sont schématisés dans le tableau suivant.

L'hypothèse de la diffusion des porteurs libres par les charges de coeur concorde parfaitement avec les résultats expérimentaux obtenus pour les dislocations  $\bar{c}$  vis (ordre de grandeur, forme de la courbe). Les effets de diffusion reliés au champ de déformation sont trop faibles et ne peuvent donc être retenus pour justifier les résultats expérimentaux.

En ce qui concerne les dislocations  $\bar{a}$  coin, par contre, aucun des effets supposés ne conduit à un ordre de grandeur convenable de la résistivité induite ni à une dépendance en température de  $\mu^{-1} (1/T)$  en accord avec l'expérience.



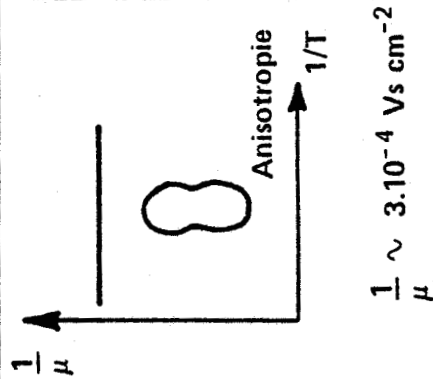
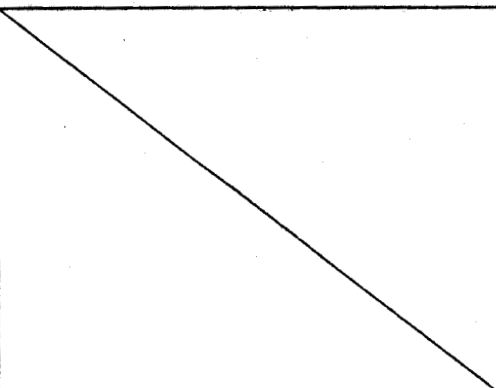
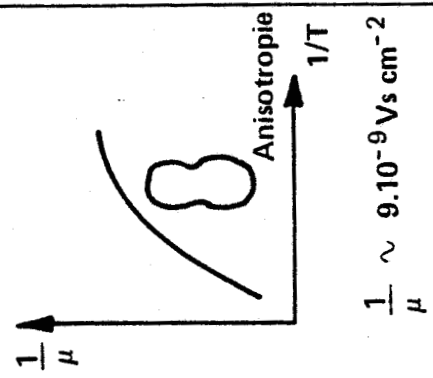
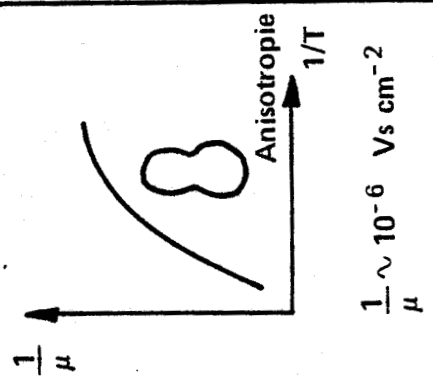
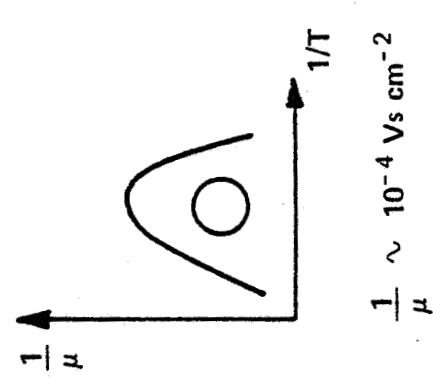
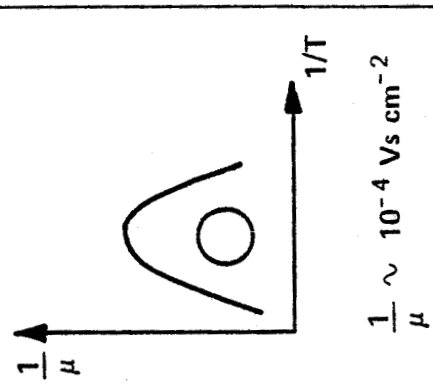
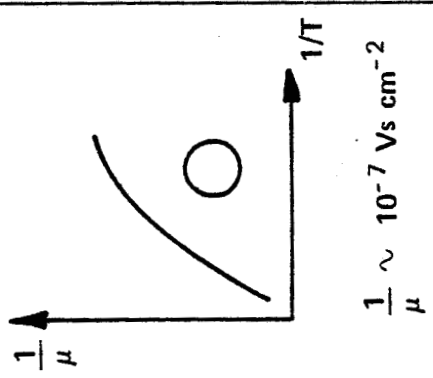
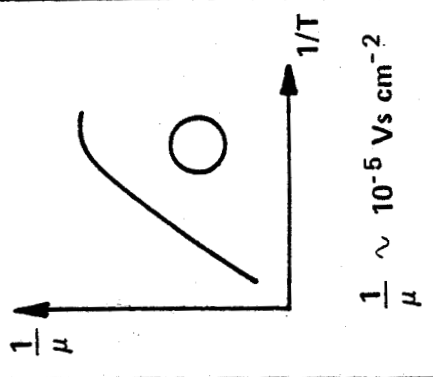
	RESULTATS EXPERIMENTAUX	LIGNES CHARGÉES	POTENTIEL DE DEFORMATION	POTENTIEL PIEZOELECTRIQUE
DISLOCATION à COIN $D \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 3 \cdot 10^{-4} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>		 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 9 \cdot 10^{-9} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 10^{-6} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>
DISLOCATIONS $\bar{c}$ VIS $D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 10^{-4} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 10^{-4} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 10^{-7} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>	 <p><math>\frac{1}{\mu} \sim 10^{-5} \text{ Vs cm}^{-2}</math></p>

Tableau récapitulatif des résultats théoriques.



L'anisotropie de  $\mu^{-1}$  observée expérimentalement, concorde cependant avec l'anisotropie trouvée théoriquement tant dans le cas du potentiel de déformation que dans le cas de l'effet piezoélectrique. Ce fait suggère que l'effet de diffusion est bien lié au champ de déformation de la dislocation.

Nous montrons dans le chapitre suivant que la diffusion des porteurs libres par les dislocations à coin peut être attribuée à un effet de potentiel de déformation dont nous formulons une expression différente de celle proposée par Bardeen et Shockley.

**VI - POTENTIEL DE DIFFUSION  
ASSOCIE AUX CHAMPS DE  
DEFORMATION HETEROGENE**

## §-1. INTRODUCTION

Ce chapitre a pour objet d'établir l'expression du potentiel de diffusion des porteurs libres associé aux champs de déformation hétérogène statiques d'un cristal.

Dans le cas des dislocations, la condition de Burgers conduit à décrire les champs de déplacement au moyen de fonctions multiformes des coordonnées. Cette multiformité n'a cependant aucun effet sur la diffusion des porteurs libres pour qui, si l'on excepte la région du coeur, les atomes du cristal semblent n'être que légèrement déplacés de leur position d'équilibre. Ce fait est bien décrit par les dérivées du champ de déplacement qui éliminent la translation  $b$  supplémentaire que subissent certains atomes de la structure. En dehors du coeur des dislocations, le champ de déformation est décrit correctement par l'élasticité compatible. De façon à établir l'expression du potentiel de diffusion, nous imaginons qu'il règne, à l'intérieur du cristal, un champ de déplacement hétérogène mais compatible.

Le phénomène de diffusion des porteurs libres associé aux déformations hétérogènes provient du déplacement des potentiels atomiques initialement centrés aux sites du réseau parfait et dont la superposition constitue le potentiel périodique du cristal. Le potentiel de diffusion que l'on cherche résulte donc de l'état de déformation en tout point du cristal. Ce fait n'est pas contenu dans la formulation de Bardeen et Shockley où le potentiel de diffusion en  $r$  est uniquement proportionnel à la déformation au point  $r$ .

Restreignant le problème au cas de déformations faibles et variant lentement, on peut tenter d'exprimer l'écart à la périodicité sous forme d'une perturbation du hamiltonien du cristal non déformé. Outre la modification apportée localement à la structure de bande, cette perturbation jouera également le rôle du potentiel de diffusion des porteurs libres car elle sera le seul terme non périodique du potentiel du cristal déformé.

La définition de cette perturbation pose cependant quelques problèmes de principe liés :

- 1) au déplacement des singularités des potentiels atomiques
- 2) à la dilatation macroscopique éventuelle du cristal.

Nous examinons ces différents points dans les paragraphes suivants avant d'établir l'expression de la transformée de Fourier du potentiel de déformation.

Introduisant enfin un facteur de sous-structure décrivant la répartition des dislocations dans le cristal, les calculs de mobilités effectués avec ce potentiel permettent de rendre compte des résultats expérimentaux obtenus pour les deux types de dislocations étudiés.

## §-2. PROBLÈME DU DÉPLACEMENT DES SINGULARITÉS ATOMIQUES

Puisque les ions sont déplacés, le potentiel du cristal déformé possède des singularités en des points différents des sites  $\bar{R}_j$  du réseau parfait.

Si l'on écrit le hamiltonien  $H_\epsilon$  sous la forme

$$H_\epsilon = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{\sum_j V_{at}(\bar{r} - \bar{R}_j)}_{H_0} + \underbrace{\sum_j V_{at}(\bar{r} - \bar{R}_j - u(\bar{R}_j)) - V_{at}(\bar{r} - \bar{R}_j)}_{\delta V(\bar{r})} \quad (2-1)$$

$$H_\epsilon = H_0 + \delta V(\bar{r})$$

le terme  $\delta V(\bar{r})$  contient des singularités différentes de celles du hamiltonien non perturbé. A priori,  $\delta V(\bar{r})$  n'est donc pas une perturbation de  $H_0$  même si les déplacements  $\bar{u}(\bar{R}_j)$  sont très petits.

Ce problème se pose avec acuité lorsque l'on décrit la structure de bande à l'aide de méthodes de liaisons fortes (où de manière plus générale à l'aide des fonctions de Wannier), car les solutions du problème non perturbées sont des combinaisons d'orbitales centrées aux sites  $R_j$  du cristal parfait. Ces solutions ne sont plus adaptées lorsque l'on déplace les ions du réseau. Une façon de lever cette difficulté consiste à déplacer les orbitales atomiques avec les potentiels (Labbé, méthode LCAO [101] ; Teichler, méthode des fonctions de Wannier [102]).

En fait, ce problème n'intervient pas lorsqu'il s'agit de décrire le comportement des électrons de la bande de valence. Ces électrons ne peuvent évidemment pénétrer le coeur des ions déjà occupés par les électrons des couches profondes. On décrit ce fait en orthogonalisant leurs fonctions d'onde aux orbitales de coeur, c'est-à-dire en adoptant des fonctions de la forme :

$$\psi_k(\vec{r}) = |k\rangle - \sum_{n,j} \langle b_n(\vec{r} \cdot \vec{R}_j) | k \rangle |b_n(\vec{r} - \vec{R}_j)\rangle \quad (2-2)$$

où  $b_n(\vec{r} - \vec{R}_j)$  est la  $n^e$  orbitale de coeur du  $j^e$  atome et  $|k\rangle$  peut être par exemple, mais pas nécessairement, une onde plane.

Cette remarque est le point de départ des méthodes d'ondes planes orthogonalisées ou des méthodes de pseudo-potentiel.

Si l'on introduit ce type de fonction d'onde (2-2) dans l'équation de Schrödinger, on voit que pour obtenir les états d'énergie  $E(k)$ , il est équivalent de considérer les électrons de valence décrits par les fonctions d'onde  $|k\rangle$  mais évoluant dans un potentiel effectif

$$V^{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_j \left\{ V_{\text{at}}(\vec{r} - \vec{R}_j) - \sum_n (E_n - E_0(k)) |b_n^j\rangle \langle b_n^j| \right\} \quad (2-3)$$

$$V^{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_j V_{\text{at}}^{\text{eff}}(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

où  $E_n$  est bien approximé par l'énergie de l'état  $b_n$  de l'atome libre.

Le potentiel cristallin agissant effectivement sur les électrons de valence, peut être considéré comme la somme de pseudo-potentiels atomiques. Il exprime essentiellement le fait physique que les électrons de valence ne peuvent pénétrer le coeur de chaque ion. Par conséquent, chacun des pseudo-potentiels atomiques  $V_{\text{at}}^{\text{eff}}(\vec{r} - \vec{R}_j)$  contient un terme répulsif qui compense la singularité en  $\vec{r} = \vec{R}_j$  de chaque potentiel atomique [103]. Nous ne nous soucierons donc pas du problème des singularités dans la mesure où nous utiliserons ce type de pseudo-potentiel.

Dans la suite de ce chapitre, nous serons amenés à utiliser la transformée de Fourier du pseudo-potentiel atomique. Sans aller plus avant dans la méthode des pseudo-potentiels, remarquons que chaque pseudo-potentiel est un opérateur non local de sorte qu'il peut être délicat d'envisager le calcul de sa transformée de Fourier. De façon à lever cette difficulté, nous postulerons que ces pseudo-potentiels atomiques peuvent être décrits de façon approchée par des représentations locales (comme le modèle du coeur vide [104]). Nous admettrons, de plus, que lors du déplacement, l'ion ne subira aucune déformation (modèle de l'ion "rigide") de sorte qu'il suffira de "déplacer" la représentation locale des pseudo-potentiels atomiques.

### §-3. PROBLÈME DE LA DILATATION MACROSCOPIQUE DU CRISTAL

Le choix des conditions aux limites détermine l'ensemble des vecteurs  $k$  permis et donc l'ensemble des solutions  $E(k)$  qui décrivent la structure de bande du problème à un électron. Néanmoins quel que soit le choix des conditions aux limites (annulation de la fonction d'onde aux extrémités du cristal, conditions cycliques de Born, Von Karman, etc...), les vecteurs d'onde permis dépendent essentiellement des dimensions du cristal. Aussi lorsqu'une déformation modifie ces dimensions, l'ensemble des vecteurs d'onde  $k'$  du cristal déformé est totalement différent de l'ensemble des vecteurs d'onde  $k$  du cristal non déformé.

Dans le cas d'une simple déformation homogène, où le cristal déformé est encore périodique, une autre façon de voir le problème, consiste à remarquer que le groupe spatial du cristal déformé est totalement différent de celui du cristal non déformé. En conséquence les deux hamiltoniens  $H_e$  et  $H_o$  ne possèdent pas de système de vecteurs d'onde communs.

Le problème consiste alors à trouver le moyen de comparer les états d'énergie  $E_e(k')$  du cristal déformé aux états  $E_o(k)$  du cristal non déformé.

Ce problème est résolu exactement dans le cas d'une déformation homogène et est détaillé dans l'ouvrage de Bir et Rikus "Symmetry and strain-induced effects in semiconductors" [93].

Afin de pouvoir comparer les états d'énergie  $E_e(k')$  et  $E_0(k)$ , on impose un changement de métrique à l'espace de l'échantillon déformé de façon à ce que les vecteurs d'onde  $k'$  redeviennent identiques aux vecteurs d'onde  $k$ .

Pour ce faire, si les sites  $\bar{R}_j'$  du cristal déformé sont reliés aux sites  $R_j$  par la relation

$$\bar{R}_j' = (\bar{\delta} + \bar{\epsilon}) \bar{R}_j, \quad (3-1)$$

on impose le changement de métrique

$$x = (\bar{\delta} - \bar{\epsilon}) x' \quad (3-2)$$

Cette transformation de l'espace métrique a pour effet de modifier le terme d'énergie cinétique  $P^2/2m$  de la quantité :

$$\delta E_c = \bar{P} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \bar{P} / m \quad (3-3.a)$$

ainsi que le terme d'énergie potentielle  $V(\bar{r})$  de la quantité :

$$\delta V(\bar{r}) = \bar{V} : \bar{\epsilon} \quad (3-3.b)$$

où

$$\bar{V} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_j \frac{V_{at} \{ (1 - \bar{\epsilon}) \bar{r} - \bar{R}_j \} - V_{at}(\bar{r} - \bar{R}_j)}{\bar{\epsilon}}$$

Par suite, le hamiltonien du cristal déformé s'exprime en fonction du hamiltonien "non déformé"  $H_0$  et de ces perturbations

$$H_e = H_0 + \frac{\bar{P} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \bar{P}}{m} + \bar{V} : \bar{\epsilon} \quad (3-4)$$

Les solutions de  $H_e$  peuvent être calculées en utilisant la méthode des perturbations. On obtient, au 1er ordre en  $\epsilon$ , un décalage des états d'énergie pouvant se mettre sous la forme



$$\delta E(k) = E_e(k) - E_o(k) = \sum_{ij} \bar{\theta}_{ij} \epsilon_{ij} \quad (3-5)$$

où  $\bar{\theta}$  est le tenseur du potentiel de déformation.

Dans le cas des semi-conducteurs, ce déplacement des niveaux d'énergie conduit à une variation du nombre de porteurs thermiquement activés, variation qui affecte la conductivité. De plus lorsque les semi-conducteurs possèdent plusieurs vallées, dont les axes principaux sont différents, il se produit également une diffusion inter-vallée [105].

De tels effets sont effectivement observés dans les expériences de piezorésistance où l'on mesure la conductivité d'un matériau subissant une déformation homogène. Néanmoins l'expression (3-5) ne contient pas l'explication du phénomène de diffusion des porteurs libres par les champs de déformation hétérogène. L'expression (3-5) ne peut donc être extrapolée au cas des déformations hétérogènes et ne peut justifier la forme locale du potentiel introduit par Bardeen et Shockley.

#### §-4. CAS D'UNE DÉFORMATION QUELCONQUE

Nous regardons maintenant le cas d'une déformation hétérogène conduisant à un changement éventuel des dimensions du cristal.

- 1) Nous considérons d'abord la perturbation apportée par la non périodicité du cristal déformé (C.D.), par rapport à un cristal moyennement déformé (C.M.D.), périodique et de mêmes dimensions que le C.D.
- 2) Nous ramenons enfin le problème au cristal initial (C.I.) en effectuant, de la même manière que dans le cas des déformations homogènes, un changement de métrique du C.M.D. (figure 1)

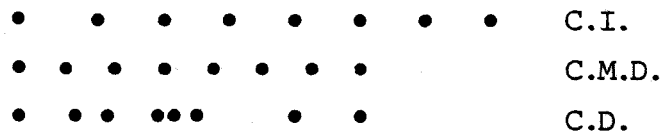


Figure 1

Nous traitons d'abord le cas du cristal uni-dimensionnel de façon à simplifier la présentation du problème.

4-1. CAS DU CRISTAL UNI-DIMENSIONNEL

Soit un cristal initial uni-dimensionnel de longueur  $L$ , légèrement déformé par un champ de déplacement hétérogène  $u(x)$ .

La longueur du cristal déformé est  $L'$ . La position de ses atomes n'est plus périodique.

Le C.M.D. possède la même longueur  $L'$  que le C.D. mais ses ions sont périodiquement situés sur de nouveaux sites  $\tilde{R}_j$  définis par :

$$\tilde{R}_j = \left\{ 1 + \frac{1}{L} \int_0^L \epsilon(x) dx \right\} R_j = (1 + \tilde{\epsilon}) R_j \quad (4-1.1)$$

où  $\tilde{\epsilon}$  est la déformation moyenne.

Soit  $H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}}$ , le hamiltonien effectif du C.M.D. :



$$H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}} = \frac{p^2}{2m} + \sum_j v_{\text{at}}^{\text{ps}}(x - \tilde{R}_j) \quad (4-1.2)$$

et  $\tilde{u}(\tilde{R}_j)$  le déplacement de l'atome  $j$  par rapport aux nouveaux sites  $\tilde{R}_j$ .

1) Le hamiltonien  $H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}}$  du C.D. peut s'écrire au 1er ordre en déplacement à l'aide du  $H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}}$  et d'une perturbation :

$$H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}} = H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x} \left[ v_{\text{at}}^{\text{ps}}(x - \tilde{R}_j) \right] u(\tilde{R}_j) \quad (4-1.3)$$

2) Le changement de métrique  $x = (1 - \tilde{\epsilon}) x'$  permet de trouver la perturbation du hamiltonien  $H_0^{\text{eff}}$  du C.I. Cette transformation implique le changement de l'expression des différents opérateurs :

$$\left. \begin{aligned}
 p^2 &\longrightarrow p'^2 + 2 p' \tilde{\epsilon} p' \\
 \frac{\partial}{\partial x} &\longrightarrow (1 + \tilde{\epsilon}) \frac{\partial}{\partial x'} \\
 u(\tilde{R}_j) (1 - \tilde{\epsilon}) &= u(R_j) - \tilde{\epsilon} R_j
 \end{aligned} \right\} \quad (4-1.4)$$

Appliquant ces règles à l'expression (4-1.3), puis effectuant un changement de notation ( $\xi' \rightarrow \xi$ ), on obtient :

$$H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}} = H_0^{\text{eff}} + \frac{P \tilde{\epsilon} P}{m} + V \tilde{\epsilon} - \sum_j (1 + \tilde{\epsilon}) \frac{\partial}{\partial x} \left\{ V_{\text{at}}^{\text{ps}} \tilde{\epsilon} (x - R_j) \right\} \left( u(R_j) - \tilde{\epsilon} R_j \right) \quad (4-1.5)$$

où

$$V = \lim_{\tilde{\epsilon} \rightarrow 0} \sum_j \frac{V_{\text{at}}^{\text{ps}} \{ (1 - \tilde{\epsilon}) x - R_j \} - V_{\text{at}}^{\text{ps}} \{ x - R_j \}}{\tilde{\epsilon}} \quad (4-1.6)$$

soit, si l'on se limite au 1er ordre en déformation :

$$H_{\tilde{\epsilon}}^{\text{eff}} = H_0^{\text{eff}} + \underbrace{\frac{P \tilde{\epsilon} P}{m}}_1 + V \tilde{\epsilon} - \underbrace{\sum_j \frac{\partial}{\partial x} \left\{ V_{\text{at}}^{\text{ps}} (x - R_j) \right\}}_2 \left( u(R_j) - \tilde{\epsilon} R_j \right) \quad (4-1.7)$$

Le hamiltonien effectif du cristal déformé s'exprime en fonction du hamiltonien du cristal non déformé et de différents termes de perturbation.

- La partie 1 de la perturbation correspond aux termes que l'on trouve dans le cas de la déformation homogène.
- La partie 2 est un terme supplémentaire spécifique de la déformation hétérogène. Ce terme disparaît d'ailleurs lorsque l'on considère une déformation homogène pour laquelle  $u(R_j) = \tilde{\epsilon} R_j$ .

Ce deuxième terme contient une fonction aperiodique :

$$\delta V(x) = - \sum_j \frac{\partial}{\partial x} \left\{ V_{\text{at}}^{\text{ps}} (x - R_j) \right\} u(R_j) \quad (4-1.8)$$

Cette fonction est la seule pouvant conduire à une diffusion des électrons de valence. Elle est l'expression du potentiel diffuseur que nous associons aux déformations hétérogènes.

#### 4-2. CAS DU CRISTAL TRI-DIMENSIONNEL

On considère, maintenant, le cas plus réaliste d'un cristal tri-dimensionnel dont les ions sont déplacés par un champ de déformation faible (par exemple le champ de déplacement à longue distance des dislocations). Le tenseur de distorsion contient maintenant une partie symétrique  $\epsilon_{ij} = 1/2 (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$  et une partie antisymétrique  $\omega_{ij} = 1/2 (\partial u_i / \partial x_j - \partial u_j / \partial x_i)$  de sorte que :

$$\bar{u}(\bar{R}_j) = \int_{O R_j} d\bar{u} = \int_{O R_j} (\bar{\epsilon}(\bar{r}) + \bar{\omega}(\bar{r})) d\bar{r} \quad (4-2.1)$$

Remarquons cependant, que tant que l'on reste dans le domaine de l'élasticité compatible, et tant que l'on considère des cristaux dont toutes les dimensions sont "grandes"\* , le déplacement éventuel d'un point M obtenu par rotation est toujours petit par rapport à une transition élémentaire du réseau, quel que soit le point M considéré dans le cristal. De plus les termes antisymétriques ne conduisent à aucune variation de volume du cristal.

Ainsi les déplacements introduits par la partie antisymétrique du tenseur de distorsion font partie de la perturbation apportée au cristal moyennement déformé. Le cristal moyennement déformé est donc défini uniquement par le terme symétrique du tenseur de distorsion.

$$\bar{R}_j^\alpha = \left\{ \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{\Omega} \int \epsilon_{\alpha\beta} d^3r \right\} \bar{R}_j^\beta \quad (4-2.2)$$

---

\* Nous excluons les cas particuliers de flexion élastique de tiges ou de fines plaques.

En appliquant le même raisonnement que dans la section précédente (4-1), on obtient l'expression générale du hamiltonien effectif d'un cristal déformé

$$H_{\epsilon}^{\text{eff}} = H_0^{\text{eff}} + \sum_{\alpha\beta} \left\{ \frac{P_{\alpha} \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} P_{\beta}}{m} + V_{\alpha\beta} \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} \right\} - \sum_j \bar{\nabla} v_{\text{at}}^{\text{ps}}(\bar{r} - \bar{R}_j) \{ \bar{u}(\bar{R}_j) - \tilde{\epsilon} \cdot \bar{R}_j \} \quad (4-2.3 a)$$

où (en utilisant les mêmes notations que dans [93])

$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2 - \delta_{\alpha\beta}} \lim_{\epsilon_{\alpha\beta} \rightarrow 0} \sum_j \frac{v_{\text{at}}^{\text{ps}} \{ (\bar{\delta} - \tilde{\epsilon}) \bar{r} - \bar{R}_j \} - v_{\text{at}}^{\text{ps}} \{ \bar{r} - \bar{R}_j \}}{\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}} \quad (4-2.3 b)$$

Le terme apériodique

$$\delta v_{\text{ex}}(\bar{r}) = - \sum_j \bar{\nabla} v_{\text{at}}^{\text{ps}}(\bar{r} - \bar{R}_j) \bar{u}(\bar{R}_j) \quad (4-2.4)$$

est responsable de la diffusion des porteurs libres. Ce terme correspond au produit de convolution du gradient du pseudo-potential atomique et du champ de déplacement.  $\delta v_{\text{ex}}(\bar{r})$  ne peut donc se réduire à l'expression du potentiel de déformation proposée par Bardeen et Shockley.

## §-5. TRANSFORMÉE DE FOURIER DU POTENTIEL DE DIFFUSION

L'expression compliquée du potentiel de diffusion (4-2.4) ne peut être aisément utilisée dans les calculs de diffusion classiques. Par contre, sa transformée de Fourier, éliminant le produit de convolution, doit être particulièrement simple.

Soit  $v_{\text{at}}^{\text{ps}}(\bar{r})$ , une représentation locale du pseudo-potential atomique et

$$V_{at}^{ps}(\bar{q}) = \int V_{at}^{ps}(\bar{r}) e^{i\bar{q}\bar{r}} d^3r \quad (5-1)$$

sa transformée de Fourier.

Introduisant  $V_{at}^{ps}(\bar{q})$  et  $\bar{u}(\bar{q})$ , transformée de Fourier du vecteur de déplacement  $\bar{u}(\bar{r})$  dans l'expression (4-2.4), on obtient :

$$\delta V_{ex}(\bar{q}) = -\frac{N}{(2\pi)^3} V_{at}^{ps}(\bar{q}) i\bar{q} \cdot \sum_{\bar{K}} \bar{u}(\bar{q} + \bar{K}) \quad (5-2)$$

où N est le nombre total d'atomes dans le cristal (même lorsque la maille primitive contient plusieurs atomes).  $\bar{K}$  est un vecteur du réseau réciproque.

En utilisant l'égalité  $i\bar{q} \cdot \bar{u}(\bar{q}) = \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q})$  l'expression (5-2) devient :

$$\delta V_{ex}(\bar{q}) = -\frac{N}{2\pi^3} V_{at}^{ps}(\bar{q}) \left\{ \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) + i\bar{q} \cdot \sum_{\bar{K} \neq 0} \bar{u}(\bar{q} + \bar{K}) \right\} \quad (5-3)$$

## §-6. ÉVALUATION DE LA MOBILITÉ RÉCIPROQUE INDUITE PAR CE TYPE DE POTENTIEL

L'expression (5-3) du potentiel de diffusion est particulièrement bien adaptée au cas des électrons libres pour lesquels les éléments de matrice du potentiel diffuseur correspondent simplement à la transformée de Fourier. De plus si l'on considère un champ de déplacement variant lentement, les termes  $\bar{u}(\bar{q} + \bar{K})$  peuvent être négligés lorsque K est différent de 0. On obtient alors :

$$\delta V_{ex}(\bar{q}) = -\frac{N}{8\pi^3} V_{at}^{ps}(\bar{q}) \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) \quad (6-1)$$

Cette expression est simple et conduit à un calcul effectif de la mobilité des porteurs libres par la méthode de l'énergie perdue.

Dans le cas des semi-conducteurs, les fonctions d'onde des états électroniques des électrons de conduction ou des trous de valence ne peuvent plus être approximées par une simple onde plane. Les éléments de matrice du potentiel diffuseur deviennent :

$$V(k, k') = \int u_{k'}^*(r) u_k(r) V(r) e^{i(k-k')r} d^3r \quad (6-2)$$

où  $u_k(\bar{r})$  est la partie périodique de la fonction de Bloch.

Nous montrons dans l'annexe A-1.2, que dans le cas particulier du potentiel diffuseur proposé dans ce chapitre

$$\delta V_{ex}(\bar{r}) = - \sum_j \bar{\nabla} V_{at}^{ps}(\bar{r} - \bar{R}_j) \bar{u}(R_j) \quad (6-3)$$

des termes d'umklapp peuvent subsister à cause

- 1) de la périodicité de la fonction  $u_k(\bar{r})$
- 2) de la présence de la somme sur les différents sites du réseau dans l'expression (6-3).

Nous limitons cependant, dans ce paragraphe, le calcul de la mobilité des porteurs libres au potentiel diffuseur défini par l'expression (6-1). Ceci revient à assimiler les trous de valence du tellure, à un gaz de trous libres doués d'une masse effective (cf. Annexe A-1.2).

Le potentiel diffuseur  $\delta V_{ex}(\bar{q})$  est proportionnel à la dilatation  $\text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q})$ , résultant de la superposition des champs de déformation de toutes les dislocations du cristal.  $\text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q})$  dépend donc de la répartition des dislocations dans le cristal. Avant de tenir compte de cette répartition, nous calculons la réduction de mobilité introduite par une dislocation.

#### 6-1. DIFFUSION PROVOQUEE PAR UNE DISLOCATION

On choisit comme représentation locale des pseudo-potentiels atomiques le modèle du coeur vide représenté figure 2 et dont la transformée de Fourier est :

$$V_{at}^{ps}(\bar{q}) = \frac{Z e}{\epsilon_0} \frac{\cos qR}{q^2} \quad (6-1.1)$$

où R représente le rayon du coeur.

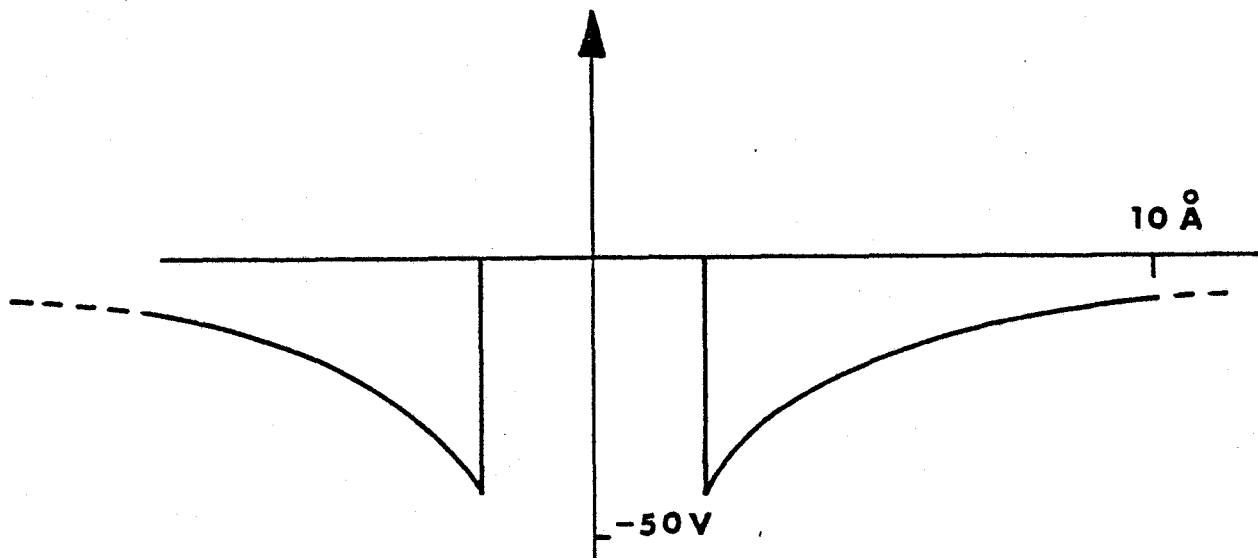


Figure 2

La transformée de Fourier de la dilatation introduite par une dislocation a déjà été calculée au chapitre précédent

$$\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{q}, \varphi) = -j 2\pi b \frac{\delta(q_z)}{q} F(\varphi) \quad (6-1.2)$$

où  $F(\varphi)$  est la fonction angulaire définie par l'expression (3-2.1.2) au chapitre V.

Le potentiel de diffusion est alors :

$$\delta V_{ex}(\bar{q}, \varphi) = - \frac{j N Z e b}{(2\pi)^2} \frac{\cos qR}{q^3} \delta(q_z) F(\varphi) \quad (6-1.3)$$

Introduisant (6-1.3) dans la formule de l'énergie perdue, on obtient après intégration :



■ dans l'approximation de Boltzmann

$$\frac{1}{\mu} (\xi)_{\text{Boltz}} = \frac{Z^2 b^2 N^2 m^{1/2}}{2^{3/2} \pi^{1/2} (2\pi)^7 (\epsilon_0 \epsilon_L)^{1/2}} \frac{A(\xi)}{n^{3/2}} f_0(n, T, \beta_{DH}) \quad (6-1.4)$$

où  $A(\xi)$  est la fonction d'anisotropie déjà rencontrée au chapitre précédent et où

$$f_0(n, T, R) = \int_0^\infty \frac{\cos^2(k_{D.H.} Rx) e^{-px^2}}{(1+x^2)^2} dx, \quad p = \frac{k^2 k_{D.H.}^2}{8mKT} \quad (6-1.6)$$

donne la dépendance en température de  $\mu^{-1}$ .

■ dans l'approximation de Thomas - Fermi

$$\frac{1}{\mu} (\xi)_{T=0} = \frac{Z^2 N^2 b^2 m^{1/2}}{3^{1/2} (2\pi)^7 (\epsilon_0 \epsilon_L)^{1/2}} \frac{A(\xi)}{n^{3/2}} F_0(R) \quad (6-1.7)$$

où

$$F_0(R) = \int_0^\alpha \frac{\cos^2(k_{FT} Rx)}{(1+x^2)^2} ; \quad \alpha = 2 \frac{k_F}{k_{FT}} \quad (6-1.8)$$

Le calcul numérique de  $f_0(n, T, R)$  et  $F_0(R)$  montre que le résultat dépend très peu du rayon R du coeur vide. Il conduit aux résultats suivants :

### 1) Dépendance en température

La valeur de  $f_0(n, T, R)$  est pratiquement constante ( $= \pi/4$ ) et ne dépend donc pas de la température dans le domaine de validité de l'approximation de Boltzmann. L'ordre de grandeur obtenu à  $T = 0$  en utilisant l'expression (6-1.7) est pratiquement le même que celui que l'on obtient avec l'expression (6-1.6). La résistivité induite par le potentiel de déformation est donc pratiquement indépendante de la température, résultat en bon accord avec les observations effectuées sur les dislocations à coin.

## 2) Anisotropie de la mobilité

Les fonctions  $A(\xi)$  sont les mêmes que celles que l'on trouve au chapitre précédent à l'aide du potentiel de déformation de Bardeen et Shockley. L'anisotropie de la mobilité que l'on trouve théoriquement dans le cas de la dislocation  $\bar{a}$  coin est donc en bon accord avec les résultats expérimentaux.

## 3) Ordre de grandeur de $\mu^{-1}$

La multiplication par  $D$  (densité de dislocations) de l'effet obtenu pour une dislocation conduit aux résultats suivants :

- pour  $10^8 \text{ cm}^{-2}$  dislocations  $\bar{a}$  coin :  $\mu^{-1} \sim 5 \cdot 10^{-3} \text{ Vs cm}^{-2}$  ,
- pour  $10^9 \text{ cm}^{-2}$  dislocations  $\bar{c}$  vis :  $\mu^{-1} \sim 6 \cdot 10^{-2} \text{ Vs cm}^{-2}$  .

La comparaison avec les résultats expérimentaux montre que

- l'on trouve un facteur 10 en trop dans le cas des dislocations  $\bar{a}$  coin ( $\mu_{\text{exp}}^{-1} \sim 3 \cdot 10^{-4} \text{ Vs cm}^{-1}$ ),
- l'on doit s'attendre dans le cas des dislocations  $\bar{c}$  vis à un effet de potentiel de déformation très supérieur à l'effet de la charge de coeur. On devrait, en particulier observer une mobilité induite indépendante de la température, ce qui n'est pas le cas.

Ces résultats théoriques ont été obtenus sans tenir compte de la répartition des dislocations à l'intérieur du cristal. Nous examinons au paragraphe suivant l'influence de la sous-structure des dislocations.

## 6-2. ORDRE DE GRANDEUR DE $\mu^{-1}$ . INFLUENCE DE LA SOUS-STRUCTURE

### 6-2.1 Généralités

Dans les calculs précédents, la mobilité réciproque induite par  $D$  dislocations est simplement  $D$  fois l'effet d'une dislocation. Ceci peut se comprendre tant que l'on considère les dislocations comme des centres diffuseurs indépendants. Par exemple, dans le cas des effets liés à la charge de coeur, tant que la distance moyenne entre dislocations est nettement supérieure à la longueur caractéristique d'écrantage, le résultat est effectivement proportionnel à la densité  $D$  de dislocations.

Lorsque les potentiels diffuseurs sont reliés aux composantes  $\epsilon_{ij}(\bar{r})$  du tenseur de déformation (potentiel piezoélectrique ou potentiel de déformation), il est nécessaire de tenir compte de la valeur réelle en  $\bar{r}$  des composantes  $\epsilon_{ij}(\bar{r})$  résultant de la présence de toutes les dislocations.

Dans le cas particulier du potentiel de déformation, la dilatation en  $\bar{r}$  est donnée par

$$\text{tr } \bar{\epsilon}_{\text{total}}(\bar{r}) = \sum_{j=1}^D \text{tr } \bar{\epsilon}_{\text{disl}}(\bar{r} - \bar{R}_j) \quad (6-2.1)$$

où  $\bar{R}_j$  décrit la position des dislocations. La transformée de Fourier de cette expression est :

$$\text{tr } \bar{\epsilon}_{\text{total}}(\bar{q}) = \text{tr } \bar{\epsilon}_{\text{disl}}(\bar{q}) \sum_{j=1}^D e^{i\bar{q} \cdot \bar{R}_j} \quad (6-2.2)$$

Le module carré du potentiel de diffusion que l'on introduit dans l'expression de l'énergie perdue est donc proportionnel à la fonction :

$$F_D(\bar{q}) = \left| \sum_{j=1}^D e^{i\bar{q} \cdot \bar{R}_j} \right|^2 \quad (6-2.3)$$

L'évaluation du "facteur de sous-structure"  $F_D(\bar{q})$  dépend de la sous-structure particulière de chaque type d'échantillon. Ce facteur possède des valeurs remarquables dans les cas simples suivants :

- 1) Répartition aléatoire de dislocations d'une même famille de vecteurs de Burgers + et - b

$$F_D(\bar{q}) = 0 \quad (6-2.4)$$

Dans ce cas, aucun effet lié au potentiel de déformation, ou au potentiel piezoélectrique, ne peut être observé.

- 2) Répartition aléatoire de dislocations identiques de vecteurs de Burgers de même signe

$$F_D(\bar{q}) = D \quad (6-2.5)$$

L'effet d'une telle répartition (que l'on pourrait obtenir par exemple à l'aide d'expériences de flexion) est l'addition de D effets individuels, loi que nous avons adoptée jusqu'à présent.

- 3) Distribution périodique de dislocations. La fonction  $F_D(\bar{q})$  est proportionnelle à  $D^2$ , mais cette fois, tous les  $\bar{q}$  ne sont plus permis. Il faut définir un "réseau réciproque" du réseau des dislocations :
- $$Q_\alpha = \frac{2\pi}{l\alpha} \text{ où } l\alpha \text{ est la distance entre dislocations dans la direction } \alpha.$$
- On obtient alors :

$$F_D(\bar{q}) = D^2 \sum_j \delta(\bar{q} - \bar{Q}_j) \quad (6-2.6)$$

La fonction (6-2.6) permet d'envisager le calcul d'effets de diffusion reliés à la présence de sous-joints.

Dans les cas réels, les sous-joints sont plus ou moins bien constitués. Ils ne sont jamais strictement périodiques. Ceci est particulièrement le cas des "sous-joints" grossiers que l'on obtient par glissement  $\bar{a}$ . On peut envisager dans de tels cas un calcul approché de l'effet de diffusion en remplaçant chaque "noeud" du "réseau réciproque" des dislocations par une gaussienne dont la variance jouerait le rôle d'un paramètre de "qualité" du sous-joint.

### 6-2.2 Application qualitative aux cas expérimentaux

#### ■ Les dislocations $\bar{c}$ vis

Elles sont réparties de façon relativement homogène dans le cristal. Chaque orientation du vecteur de Burgers est, en moyenne, également présente. Ceci correspond au cas 1 où  $F_D(\bar{q}) = 0$ . Dans ce type de distribution, les seuls effets de potentiel de déformation (ou de potentiel piezo-électrique) ne peuvent provenir que de l'écart à la répartition homogène. Ces effets sont négligeables. Le phénomène de diffusion prépondérant reste donc l'effet de la charge de coeur calculé au chapitre précédent. Remarquons cependant, que les effets de potentiel de déformation associés aux  $\bar{c}$  vis pourraient apparaître dans d'autres types de sous-structures.

■ Les dislocations  $\bar{a}$  coin

Elles sont regroupées dans des parois de polygonisation ayant le caractère de sous-joints grossiers. Dans chacune de ces parois les dislocations ont donc à peu près le même signe.

Les différentes parois, étant espacées de plusieurs dizaines de  $\mu\text{m}$ , sont indépendantes (leurs champs de déformation décroissent plus vite que celui des dislocations et ne se compensent pas). Ce cas est intermédiaire entre le cas 2 (distribution aléatoire de dislocations de même signe) et le cas 3 (sous-joints). L'effet résultant doit être moins grand que D fois l'effet d'une dislocation. Ceci peut justifier en partie le facteur 10 trouvé au paragraphe (6-1) entre la mobilité calculée et la mobilité mesurée.

En conclusion, la formulation du potentiel de déformation, proposée dans ce chapitre, associée à la notion de facteur de sous-structure permet de justifier les résultats expérimentaux obtenus pour les dislocations  $\bar{a}$  coin, sans modifier l'interprétation des résultats concernant les dislocations  $\bar{c}$  vis par les effets de lignes chargées.

## VII - CONCLUSION

L'étude expérimentale, décrite dans ce travail, constitue un des premiers essais d'observation quantitative des phénomènes électriques associés aux dislocations dans le tellure.

Elle a nécessité la recherche de chemins de déformation particuliers aboutissant à l'obtention de sous-structures, sinon simples, du moins quantitativement caractérisées. Cette recherche préalable a permis d'observer l'influence des dislocations à coin et  $\bar{c}$  vis sur la conductivité du tellure.

Bien que moins raffinés que les résultats obtenus sur les semi-conducteurs covalents, étudiés depuis près de trente ans, nos résultats expérimentaux ont néanmoins montré que chaque type de dislocation modifie de façon spécifique la conductivité du tellure.

- Les dislocations à coin affectent fortement la mobilité des porteurs libres. L'incrément de résistivité qu'elles produisent ( $\mu^{-1} \sim 3 \cdot 10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ ) est pratiquement indépendant de la température. Elles n'affectent cependant pas de façon notable la densité de porteurs.
- Les dislocations  $\bar{c}$  vis induisent des états électroniques dont l'énergie se situe à  $\sim 1$  meV de la bande de valence. L'ionisation de ces états avec la température modifie notablement la densité des porteurs libres ainsi que leur mobilité. L'incrément de résistivité ( $\mu^{-1} \sim 10^{-4}$  Vs  $\text{cm}^{-2}$ ) est une fonction de la température, passant par un maximum à  $T \sim 10$  K).

L'extension et l'utilisation systématique de la méthode de l'énergie perdue pour le calcul de la mobilité a permis d'évaluer quantitativement les caractéristiques de chacun des mécanismes de diffusion proposés dans la littérature :

- Les effets de coeur
- Les effets liés au potentiel de déformation
- Les effets piezoélectriques.

La comparaison de ces résultats théoriques avec les résultats expérimentaux permet de justifier de façon très cohérente les phénomènes liés

aux dislocations  $\bar{c}$  vis par l'effet de leurs charges de coeur. Aucun de ces mécanismes ne conduit cependant à l'explication des phénomènes observés dans le cas des dislocations  $\bar{a}$  coin.

L'analyse des effets du champ de déformation nous a conduit à proposer une expression du potentiel de diffusion différente de celle de Bardeen et Shockley. Associée à la notion de "facteur de sous-structure", cette nouvelle formulation du potentiel de déformation permet de rendre compte de façon assez satisfaisante des effets liés aux dislocations  $\bar{a}$  coin.

L'influence de la sous-structure des dislocations n'a jamais été considérée dans la littérature. Son rôle est cependant prépondérant. L'évaluation du facteur de sous-structure montre par exemple que l'effet de potentiel de déformation, assez élevé, que l'on peut associer aux dislocations  $\bar{c}$  vis n'apparaît pas avec le type de sous-structure homogène qui caractérise les échantillons cisailés. Ceci montre, a posteriori, la nécessité d'une connaissance précise de la distribution des dislocations que l'on étudie.

De façon plus spéculative, l'évaluation des propriétés des dislocations  $\bar{a}$  vis, dont l'orientation favorise un grand couplage piezoélectrique conduit à penser que cet effet de diffusion pourrait être observé avec ce type de dislocation.

Les effets possibles des dislocations sur les propriétés électriques du tellure sont donc multiples. Certains d'entre eux (telle la diffusion piezoélectrique) n'apparaissent pas dans les semi-conducteurs les plus étudiés : le Ge et le Si. Ceci confère au tellure le rôle d'un semi-conducteur modèle pour l'étude de telles propriétés. En dehors de tout intérêt technologique, l'étude des propriétés électriques des dislocations du tellure apparaît donc fondamentale.



A-1 FONCTION DIELECTRIQUE DES PORTEURS EXTRINSEQUES  
D'UN SEMI - CONDUCTEUR

Le calcul de la mobilité des porteurs libres présenté au chapitre V est fondé sur l'utilisation de la fonction diélectrique établie dans le cas des électrons libres. Nous montrons dans cette annexe qu'il peut s'appliquer au cas des porteurs extrinsèques des semi-conducteurs dès que l'on ne considère pas de transition inter-bande, c'est-à-dire dès que l'on suppose les potentiels perturbateurs trop faibles pour créer des paires électrons-trous.

§-1. FONCTION DIÉLECTRIQUE DES SEMI-CONDUCTEURS

Supposons que l'on introduise adiabatiquement, au temps  $t = -\infty$  une perturbation "auto-cohérente" de la forme

$$V(r,t) = V(q) e^{-i\vec{q}\vec{r}} e^{i\omega t} e^{\alpha t} \quad (\alpha = +0) \quad (A-1.1.1)$$

Soit  $H_0$  le hamiltonien du système et  $\rho_0 = \sum_k |k\rangle f(k) \langle k|$  l'opérateur densité au temps  $t = -\infty$ .

Sous l'effet de la perturbation, ces opérateurs deviennent :

$$\left. \begin{aligned} H_0 &\longrightarrow H = H_0 + V(\vec{r}, t) \\ \rho_0 &\longrightarrow \rho = \rho_0(\vec{r}) + \delta\rho(\vec{r}, t) \end{aligned} \right\} \quad (A-1.1.2)$$

Introduisant les expressions (A-1.1.2) dans l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\rho(\bar{r}, t)) = [H, \rho(\bar{r}, t)] \quad (\text{A-1.1.3})$$

on trouve au premier ordre en perturbation :

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\delta\rho(\bar{r}, t)) = [H_0, \delta\rho(\bar{r}, t)] + [V(\bar{r}, t), \rho_0(\bar{r})] \quad (\text{A-1.1.4})$$

Remplaçant  $\delta\rho(\bar{r}, t)$  par la solution forcée

$$\delta\rho(\bar{r}, t) = \delta\rho_0(\bar{r}) e^{i\omega t} e^{\alpha t} \quad (\text{A-1.1.5})$$

on obtient :

$$(i\hbar\alpha - \hbar\omega) \delta\rho_0(\bar{r}) = [H_0, \delta\rho_0(\bar{r})] + [V_0(\bar{r}), \rho_0] \quad (\text{A-1.1.6})$$

Cette dernière expression peut s'écrire à l'aide des éléments de matrice

$$\left. \begin{aligned} \langle k | \delta\rho_0(\bar{r}) | k' \rangle &= \delta\rho(k, k') \\ \langle k | V_0(\bar{r}) | k' \rangle &= V(k, k') \end{aligned} \right\} \quad (\text{A-1.1.7})$$

On trouve

$$\delta\rho_0(k, k') = \frac{f(k') - f(k)}{E(k') - E(k) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} V(k, k') \quad (\text{A-1.1.8})$$

Les éléments de matrice  $\delta\rho(k, k')$  et  $V(k, k')$  ne sont plus de simples transformées de Fourier car les fonctions d'onde des porteurs extrinsèques ne peuvent être approximées par des ondes planes. De façon à calculer ces éléments, introduisons les fonctions de Bloch :

$$|k\rangle = u_k(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}} \quad (\text{A-1.1.9})$$

où  $u_k(\bar{r})$  est une fonction périodique pouvant se décomposer en série de Fourier

$$u_k(\bar{r}) = \sum_G A_G(k) e^{i\bar{G}\bar{r}} \quad (\text{A-1.1.10})$$

On obtient

$$- \delta\rho(k, k') = \sum_{G, G'} A_G^*(k) A_{G'}(k') \delta\rho(\bar{k}' - \bar{k} + \bar{G}' - \bar{G}) \quad (\text{A-1.1.11})$$

où  $\delta\rho(\bar{k}' - \bar{k} + \bar{G}' - \bar{G})$  est la transformée de Fourier de  $\delta\rho_0(r)$

$$- V(k, k') = V(\bar{q}) \sum_{GG'} A_G^*(k) A_{G'}(k') \delta(\bar{k}' - \bar{k} + \bar{q} + \bar{G}' - \bar{G}) \quad (\text{A-1.1.12})$$

L'expression (A-1.1.12) montre que les seules transitions permises sont définies par

$$\bar{k}' = \bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}' \quad (\text{A-1.1.13})$$

Appliquant cette règle de sélection à l'expression (A-1.1.8), on obtient :

$$\begin{aligned} & \delta\rho_k(\bar{q}) \sum_{GG'} A_G^*(k) A_{G'}(k + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') = \\ & = V(\bar{q}) \sum_{GG'} A_G^*(k) A_{G'}(k + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') \frac{f(\bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') - f(\bar{k})}{E(\bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') - E(\bar{k}) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A-1.1.14})$$

Les transitions permises définies par la règle de sélection (A-1.1.13) correspondent à des transitions inter-bande. La perturbation est

faible et n'induit pas la création de paires d'électrons-trous. Ces transitions sont schématisées, figure A-1.

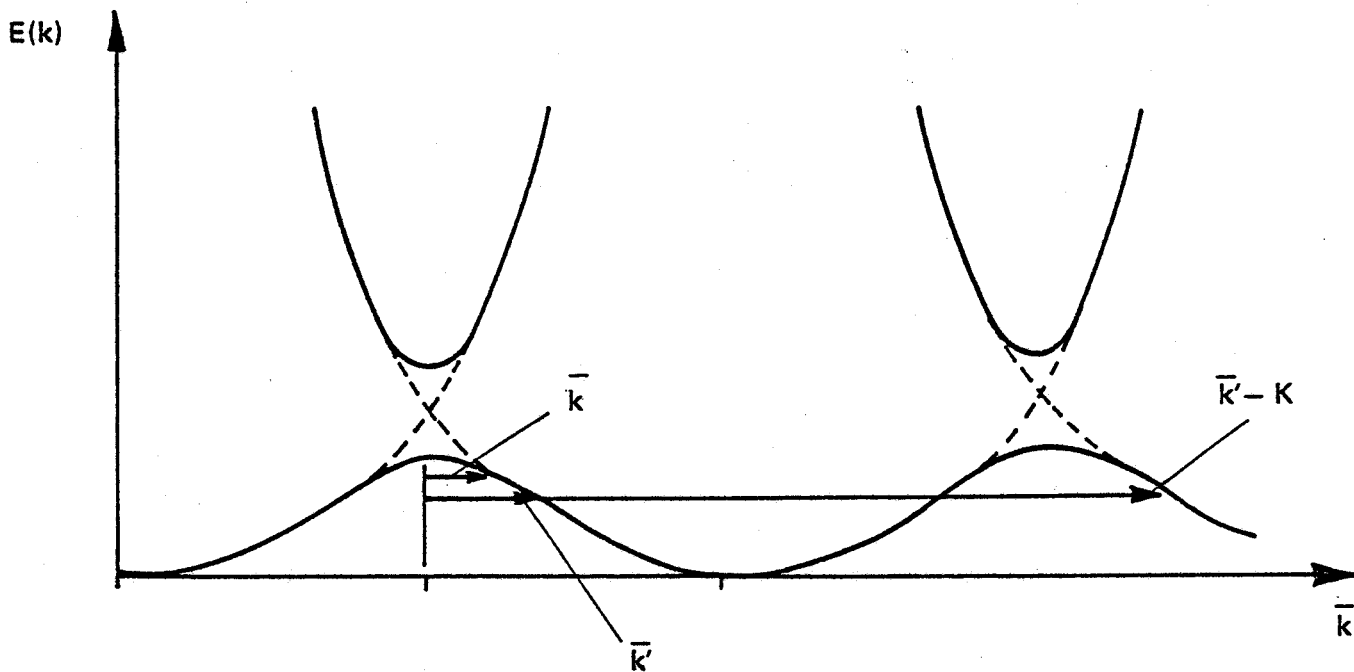


Figure A-1

Les transitions de type  $k' = k + K$  ( $K \neq 0$ ) correspondent à des termes d'umklapp. Pour ce type de transition :

$$\left. \begin{aligned} E(\bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') &= E(\bar{k} + \bar{q}) \\ f(\bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}') &= f[E(\bar{k} + \bar{q} + \bar{G} - \bar{G}')] = f(\bar{k} + \bar{q}) \end{aligned} \right\} \text{(A-1.1.15)}$$

Utilisant (A-1.1.15), l'expression (A-1.1.14) se simplifie et devient :

$$\delta\rho_k(q) = V(q) \frac{f(k+q) - f(k)}{E(k+q) - E(k) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \quad \text{(A-1.1.16)}$$

La variation totale de densité de charge s'obtient en sommant sur tous les états  $k$ ,

$$\delta n(\bar{q}) = e V(\bar{q}) \sum_k \frac{f(k+\bar{q}) - f(k)}{E(k+\bar{q}) - E(k) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \quad \text{(A-1.1.17)}$$

où  $\delta n(q)$  est la transformée de Fourier de la variation totale de densité de charge. Cette variation  $\delta n(q)$  crée un potentiel induit que l'on calcule à l'aide de l'équation de Poisson

$$\epsilon_0 q^2 V_{\text{ind}}(\vec{q}) = \delta n(q) \quad (\text{A-1.1.18})$$

$V(q)$  est la transformée de Fourier du potentiel totale constitué de la somme du potentiel extérieur et du potentiel induit. Définissant la fonction diélectrique  $\epsilon(q, \omega)$  par la relation

$$V(q, \omega) = \frac{V_{\text{ex}}(q, \omega)}{\epsilon(q, \omega)} \quad (\text{A-1.1.19})$$

on trouve

$$\epsilon(q, \omega) = \epsilon_L \left( 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_L q^2} \sum_k \frac{f(q+k) - f(k)}{E(k+q) - E(k) - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \right) \quad (\text{A-1.1.20})$$

Expression identique à celle que l'on obtient dans le cas des électrons libres.

## §-2. CAS PARTICULIER DU POTENTIEL DE DÉFORMATION INTRODUIT AU CHAPITRE VI

$$\delta V_{\text{ex}}(\vec{r}) = - \sum_j \bar{V}_{\text{at}}^{\text{ps}}(r - R_j) u(R_j) \quad (\text{A-1.2.1})$$

Le calcul de l'élément de matrice  $\langle k | \delta V_{\text{ex}} | k+q \rangle$  montre qu'il subsiste des termes d'umklapp à cause de la présence de la sommation sur les différents sites du réseau.

En effet

$$\langle k | \delta V_{\text{ex}}(r) | k+q \rangle =$$

$$= - \sum_{j, GG'} A_G^*(k) A_{G'}(k+q) \int \bar{V} v_{\text{at}}^{\text{ps}}(r-R_j) e^{i(q+G'-G)r} \bar{u}(R_j) d^3r \quad (\text{A-1.2.2})$$

$$= - \sum_{j, GG'} A_G^*(k) A_{G'}(k+q) i(\bar{q} + \bar{G}' - \bar{G}) \bar{u}(R_j) v_{\text{at}}^{\text{ps}}(q+G'-G) e^{i(q+G'-G)R_j} \quad (\text{A-1.2.3})$$

Le calcul de l'énergie perdue demande ici la connaissance des coefficients  $A_G(k)$  et devient très compliqué.

Afin de simplifier le problème, nous admettons que  $v_{\text{at}}^{\text{ps}}(q+K)$  n'a de valeur notable qu'à l'intérieur de la première zone de Brillouin, on obtient alors :

$$\langle k | \delta V | k+q \rangle = - \sum_{j, G} A_G^*(k) A_G(k+q) i \bar{q} \bar{u}(R_j) v_{\text{at}}^{\text{ps}}(q) e^{iqR_j} \quad (\text{A-1.2.4})$$

Nous admettons de plus, que les transitions restent confinées au voisinage des extremum des semi-conducteurs. Dans ce cas les fonctions de Bloch peuvent être approximées par des fonctions de haut de bande pour lesquelles les coefficients  $A_G$  sont indépendants de  $k$ , il vient

$$\begin{aligned} \langle k | \delta V | k+q \rangle &= - \sum_{j, G} |A_G|^2 i \bar{q} \bar{u}(R_j) e^{iqR_j} v_{\text{at}}^{\text{ps}}(q) \\ &= - \sum_j i \bar{q} \bar{u}(\bar{R}_j) e^{iqR_j} v_{\text{at}}^{\text{ps}}(q) \end{aligned} \quad (\text{A-1.2.5})$$

Compte tenu de l'expression :

$$\sum_j \bar{u}(\bar{R}_j) e^{iqR_j} = \frac{N}{(2\pi)^3} \sum_K \bar{u}(\bar{q} + \bar{K}) \approx \frac{N}{(2\pi)^3} \bar{u}(q), \quad (\text{A-1.2.6})$$

(de façon à rester cohérent avec l'approximation déjà faite précédemment, il faut ici aussi restreindre l'extension de  $\bar{u}(\bar{q})$  à l'intérieur de la première zone de Brillouin) on obtient finalement :

$$V(k, k+q) = - \frac{N}{(2\pi)^3} V_{at}^{ps}(q) \text{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) \quad (\text{A-1.2.7})$$

Cette expression permet le calcul approché de l'énergie perdue à l'aide de la fonction diélectrique définie par (A-1.1.20).

En conclusion, cette annexe montre que le calcul de l'énergie perdue tel que nous l'avons présenté au chapitre V peut s'appliquer dans le domaine extrinsèque de conductivité tant que les potentiels perturbateurs considérés "n'ont pas de rapport" avec le réseau cristallin. Par contre, pour le type de potentiel déduit au chapitre VI, où intervient explicitement la présence du réseau, l'utilisation de cette méthode nécessite quelques précautions mais constitue néanmoins une approximation.

A-2    CALCUL DU POTENTIEL DE DEFORMATION ET DU  
POTENTIEL PIEZOELECTRIQUE DANS LE CAS  
DES CRISTAUX ANISOTROPES

---

Ces deux types de potentiel dépendent du champ de déformation introduit par les dislocations. Le calcul de ce champ de déformation dans le cas anisotrope du tellure a été effectué à l'aide de la méthode d'Eshelby [95]. Il conduit à des composantes du tenseur de déformation s'exprimant en coordonnées polaires sous la forme :

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{b}{2\pi} \frac{f(\theta)}{\rho} \quad (\text{A-2.1})$$

où la fonction  $f(\theta)$  s'exprime de manière générale à l'aide de "18" coefficients déterminés par un calcul machine. La complexité des fonctions  $f(\theta)$  exclut la possibilité de calculer exactement la transformée de Fourier des potentiels associés aux champs de déformation.

Nous décrivons une méthode permettant de déterminer numériquement ces transformées de Fourier.

§-1. POTENTIELS DE DÉFORMATION

Le potentiel de déformation proposé par Bardeen et Shockley ou celui que nous proposons au chapitre VI, sont tous deux proportionnels à la dilatation  $\text{tr} \bar{\epsilon} (q)$



$$\left. \begin{aligned} V(q)_{B.S.} &= E_1 \operatorname{tr} \bar{\epsilon}(q) \\ V(q)_{\text{chap. VI}} &= -\frac{N}{8\pi^3} V_{at}^{PS}(q) \operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) \end{aligned} \right\} \quad (A-2.1.1)$$

Le calcul de ces potentiels revient au calcul de la transformée de Fourier  $\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q})$  de la dilatation.

En coordonnées polaires  $\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r})$  à la forme :

$$\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r}) = \frac{b}{2\pi} \frac{f(\theta)}{\rho} \quad (A-2.1.2)$$

où  $f(\theta)$  peut s'exprimer à l'aide d'une série de Fourier

$$\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r}) = \frac{b}{2\pi \rho} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \cos n\theta + \beta_n \sin n\theta \quad (A-2.1.3)$$

les coefficients  $\alpha_n$  et  $\beta_n$  peuvent être calculés numériquement sans difficulté.

Posant

$$\varphi_n = \frac{1}{n} \operatorname{Arctg} \frac{\beta_n}{\alpha_n},$$

on obtient :

$$\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{r}) = \frac{b}{2\pi \rho} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\cos n\varphi_n} \cos n(\theta - \varphi_n) \quad (A-2.1.4)$$

La transformée de Fourier est alors :

$$\operatorname{tr} \bar{\epsilon}(\bar{q}) = b \delta(q_z) \sum_n \frac{\alpha_n}{\cos n\varphi_n} \int_0^{\infty} d\rho \left( \int_0^{2\pi} \cos n(\theta + \varphi - \varphi_n) e^{iq\rho \cos \theta} d\theta \right) \quad (A-2.1.5)$$

Utilisant les relations

$$\int_0^{2\pi} \cos n(\theta + \varphi - \varphi_n) e^{iq\rho \cos \theta} d\theta = (-j)^n 2\pi \cos n(\varphi - \varphi_n) J_n(q, \rho) \quad (\text{A-2.1.6})$$

où  $J_n(x)$  est la fonction de Bessel d'ordre  $n$  et

$$\int_0^{\infty} J_n(q\rho) d\rho = \frac{1}{q} \quad (\text{A-2.1.7})$$

cela donne

$$\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{q}) = \frac{b}{q} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\cos n\varphi_n} (-j)^n \cos n(\varphi - \varphi_n) 2\pi \delta(q_z)$$

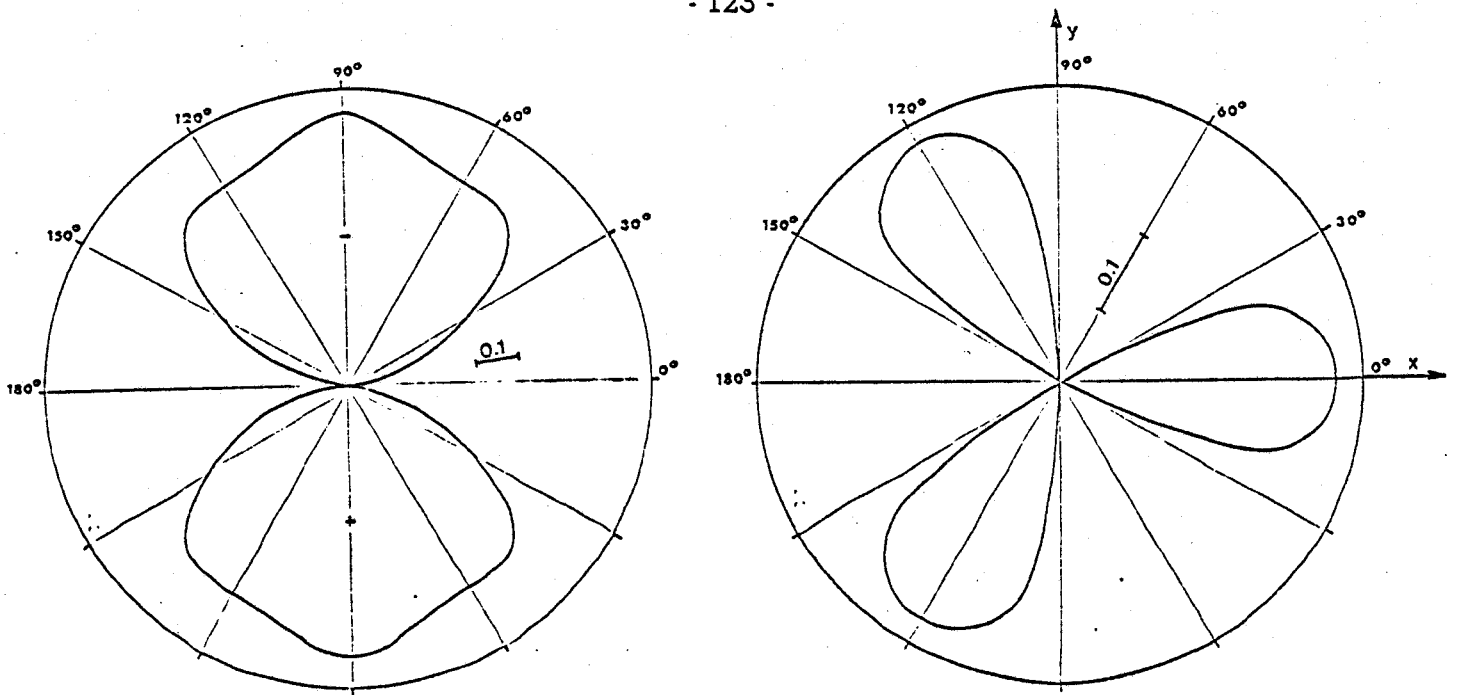
la fonction  $f(\theta)$  change de signe lorsque son argument augmente de  $\pi$ . Par conséquent, seuls les termes de fréquence impaire seront non nuls dans la série de Fourier (A-2.1.3).

En définitive

$$\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{q}) = -j 2\pi \delta(q_z) \frac{b}{q} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \alpha_{2n+1}}{\cos((2n+1)\varphi_{2n+1})} \cos 2n+1(\varphi - \varphi_{2n+1}) \quad (\text{A-2.1.8})$$

$$\text{tr } \bar{\epsilon}(\bar{q}) = -j 2\pi \frac{b}{q} F(\varphi) \delta(q_z)$$

$F(\varphi)$  représente la partie angulaire de la transformée de Fourier du potentiel de déformation.  $F(\varphi)$  se calcule avec la précision que l'on veut à l'aide d'un calcul machine. La figure A-1 représente cette fonction dans le cas des dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis.



dislocation  $\bar{a}$  coin

dislocation  $\bar{c}$  vis

Figure A-1

## §-2. POTENTIEL PIEZOÉLECTRIQUE

Dans le cas particulier des dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis, le potentiel piezoélectrique vérifie l'équation

$$\Delta v_{\text{piezo}}(\bar{r}) = \sum_{jkl} \frac{e_{jkl}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \quad (\text{A-2.2.1.})$$

dont la transformée de Fourier est

$$-q^2 v_{\text{piezo}}(\bar{q}) = \sum_{jkl} \frac{e_{jkl}}{\epsilon_0 \epsilon_L} F \left( \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \right) \quad (\text{A-2.2.2})$$

Les dérivées secondes du champ de déplacement sont toujours de la forme

$$\frac{b}{2\pi} \frac{f(\theta)}{\rho^2} \quad \text{où} \quad f(\theta) = f(\theta + \pi) \quad (\text{A-2.2.3})$$

Dans le cas particulier des dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis, seul le terme  $\rho_{11}$  (notation réduite) du tenseur piezoélectrique intervient dans A-2.2.1.

La transformée de Fourier du potentiel piezoélectrique est donc de la forme :

$$V_{\text{piezo}} = \frac{b\rho_{11}}{\epsilon_0\epsilon_L} \frac{1}{q^2} F\left(\frac{f(\theta)}{\rho^2}\right) \delta(q_z) \quad (\text{A-2.2.4})$$

$f(\theta)$  peut se décomposer en série de Fourier où seuls les termes de fréquence paire sont différents de zéro.  $f(\theta)$  peut alors se mettre sous la forme

$$f(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_{2n}}{\cos 2n\varphi_n} \cos 2n(\theta - \varphi_{2n}) \quad (\text{A-2.2.5})$$

où

$$\varphi_{2n} = \frac{1}{2n} \text{Arctg} \frac{\beta_{2n}}{\alpha_{2n}}$$

le coefficient  $\alpha_0$  est nul (il correspond à la valeur moyenne de la charge dipolaire induite par l'effet piezoélectrique).

$$F\left(\frac{f(\theta)}{\rho^2}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{d\rho}{\rho} \left( \int_0^{2\pi} \cos 2n(\theta - \varphi_{2n}) e^{iq\rho \cos(\theta - \varphi)} d\theta \right) \quad (\text{A-2.2.6})$$

Utilisant la relation (A-2.1.7) et

$$\int_0^{\infty} \frac{J_{2n}(q\rho)}{\rho} d\rho = \frac{1}{2n} \quad (\text{A-2.2.7})$$

on obtient

$$\begin{aligned} V_{\text{piezo}}(\bar{q}) &= \frac{\pi b\rho_{11}}{\epsilon_0\epsilon_L} \frac{\delta(q_z)}{q^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{q_{2n}}{\cos 2n\varphi_{2n}} \cos 2n(\varphi - \varphi_{2n}) \\ &= \frac{b\rho_{11}}{2\epsilon_0\epsilon_L} \frac{F(\varphi)}{q^2} \end{aligned} \quad (\text{A-2.2.8})$$

La figure A-2 représente la partie angulaire du potentiel piezoélectrique associé aux dislocations  $\bar{a}$  coin et  $\bar{c}$  vis.

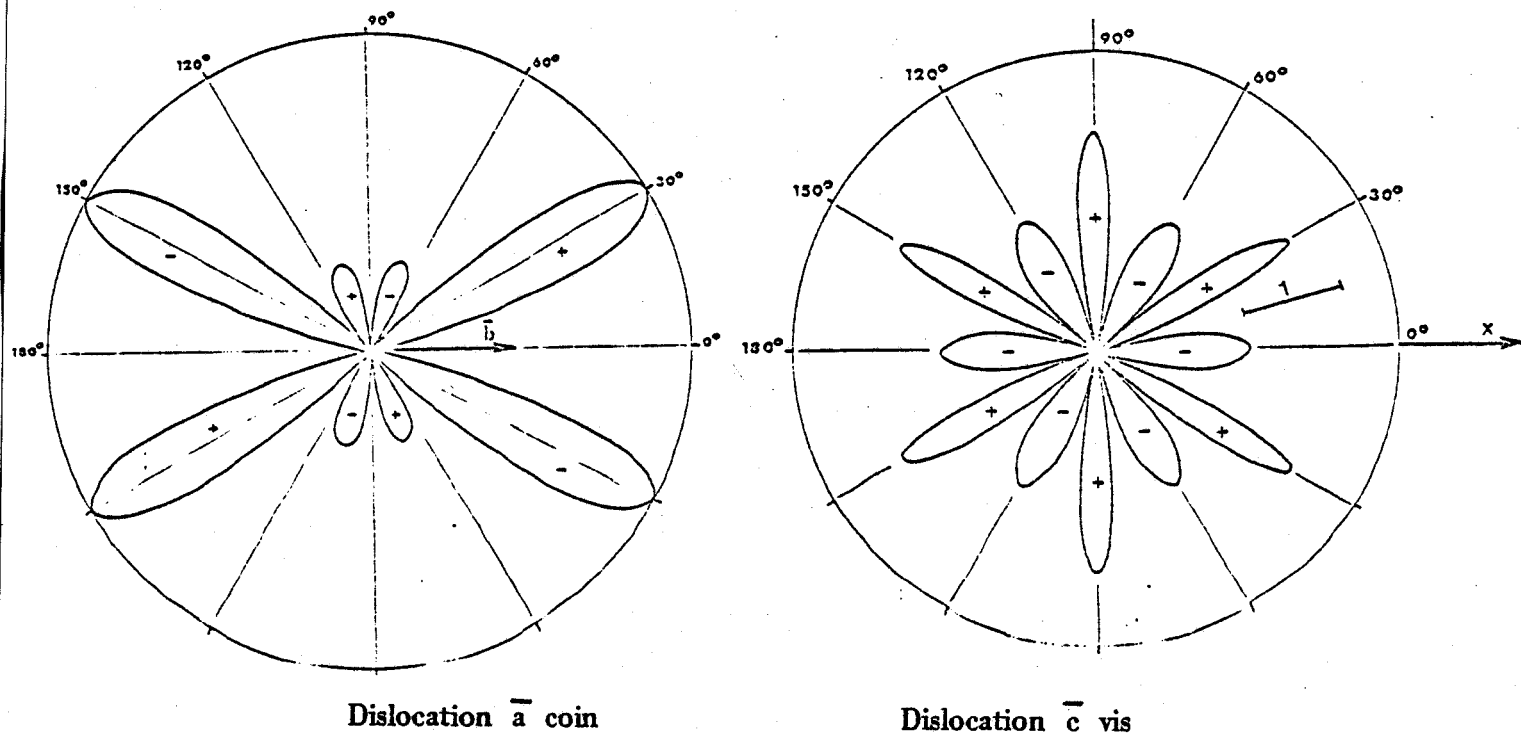


Figure A-2

L'expression (A-2.2.8) correspond à un potentiel indépendant de  $\rho$  dans l'espace direct. En effet :

$$v_{\text{piezo}}(\bar{r}) = F^{-1}(v_{\text{piezo}}(\bar{q})) = \frac{\pi b \rho_{11}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \int_0^\infty \frac{dq}{q} \left( \int_0^{2\pi} F(\varphi) e^{-iq\rho \cos(\varphi - \theta)} d\varphi \right) \quad (\text{A-2.2.9})$$

L'intégrale angulaire peut toujours s'exprimer sous la forme d'une série de fonctions de Bessel

$$v_{\text{piezo}}(\bar{r}) = \frac{\pi b \rho_{11}}{\epsilon_0 \epsilon_L} \sum_n A_n(\theta) \int \frac{J_n(q\rho)}{q} dq = \frac{b \rho_{11}}{2 \epsilon_0 \epsilon_L} g(\theta)$$

### §-3. FONCTION D'ANISOTROPIE

Les deux types de potentiels sont de la forme  $F(\varphi)\delta(q_z)/q^n$ . Introduisant cette expression dans la formule de l'énergie perdue, on obtient

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\epsilon_0}{(2\pi)^3} \int_{\Omega} (q, V)^2 \frac{|F(\varphi)|^2}{q^{2(n-1)}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} I_m \epsilon^{-1}(q, \omega) \right\}_{\omega=0} \delta(q_z) d^3q \quad (\text{A-2.3.1})$$

$\epsilon^{-1}(q, \omega)$  étant uniquement fonction du module de  $q$ , l'expression précédente peut se mettre sous la forme

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\epsilon_0 V^2}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} q^{(5-2n)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} I_m \epsilon^{-1}(q, \omega) \right\}_{\omega=0} dq \int_0^{2\pi} \cos^2(\varphi - \xi) |F(\varphi)|^2 d\varphi \quad (\text{A-2.3.2})$$

où  $\xi$  est l'angle entre le courant et une orientation particulière du cristal (par exemple l'orientation portant le vecteur de Burgers dans le cas des dislocations coin).

La fonction

$$A(\xi) = \int_0^{2\pi} \cos^2(\varphi - \xi) |F(\varphi)|^2 d\varphi$$

décrit l'anisotropie de la mobilité autour de la ligne de dislocation. Cette fonction se calcule numériquement.

L'intégrale en  $q$  donne la dépendance en température de la mobilité.

- REFERENCES -

---

- [1] J.S. KOEHLER Phys. Rev. 75 n°1 (1949)
- [2] J.K. MACKENZIE et E.M. SONDEHEIMER Phys. Rev. 77 n°2, 264 (1950)
- [3] D.L. DEXTER Phys. Rev. 86, 936 (1952)
- [4] D.L. DEXTER et F. SEITZ Phys. Rev. 86 n°2, 964 (1952)
- [5] J. BARDEEN et W. SHOCKLEY Phys. Rev. 80 n°1 (1950)
- [6] G.L. PEARSON, W.T. READ et F.J. MORIN  
Phys. Rev. 93, 666 (1954)
- [7] W.T. READ Phil. Mag. 45 n° 367, 775 (1954)
- [8] W.T. READ Phil. Mag. 45 n° 367, 1119 (1954)
- [9] R.A. LOGAN, G.L. PEARSON et D.A. KLEINMAN  
J. Appl. Phys. 30, 885 (1959)
- [10] J.H.P. VAN WEEREN, R. STRUICKMANS et J. BLOCK  
Phys. Stat. Sol. 19, K 107 (1967)
- [11] B. PODOR Phys. Stat. Sol. 16, K 167 (1966)
- [12] J. BALAZS et B. PODOR Phys. Stat. Sol. 37, 119 (1970)
- [13] J. KRYLOW et J. AULEYTNER Phys. Stat. Sol. 32, 591 (1969)
- [14] R.H. GLAENZER et A.G. JORDAN Solid State Elec. 12, 259 (1969)
- [15] L. BLICK et W. SCHROTER Phys. Stat. Sol. 14, K 55 (1966)
- [16] W. SCHROTER Phys. Stat. Sol. 31, 177 (1969)
- [17] P. HAASEN et H. ALEXANDER In Solid State Physics 22 (1968)
- [18] H. WEBER, W. SCHROTER et P. HAASEN  
Helv. Phys. Acta 41, 1255 (1968)

- [19] P. HAASEN et W. SCHROTER in "Fundamental Aspects of Dislocation Theory", p. 1231, Ed. J.A. Simmons, R de Wit and R. Bullough, N.B.S. Spec. Publ. (1970)
- [20] F. DUSTER and R. LABUSCH Phys. Stat. Sol. b 60, 161 (1973)
- [21] W. SCHROTER et R. LABUSCH Cours donné à l'Ecole d'Eté d'Erice (Sicile) (1974)
- [22] W. SCHROTER et R. LABUSCH in Lattice Defects in Semi-conductors p. 56, Friebourg Conference (1974), The Institut of Physics London and Bristol (1975)
- [23] BONCH - BRUEVICH Soviet Phys. Sol. State 3 n°1 (1961)
- [24] L. MERTEN Phys. Kondens. Materie 2, 53 (1964)
- [25] L. MERTEN Z. Naturf. 21 à 793 (1966)
- [26] I.B. LEVINSON Soviet Phys. Sol. State 7, 2336 (1965)
- [27] G. SAADA Phys. Stat. Sol. b 44, 717 (1971)
- [28] G. FAIVRE et G. SAADA Phys. Stat. Sol. b 52, 127 (1972)
- [29] R. KEEZER, C. WOOD and J.W. MOODY  
J. Phys. Chem. Solids (suppl.) 1, 119 (1967)
- [30] J.C. DOUKHAN Crystal Lattice Defects 3, 109 (1972)
- [31] C. RIGAUX Thèse d'Etat, Paris (1961)
- [32] C. RIGAUX J. Phys. Chem. Solids 23, 805 (1962)
- [33] J.S. BLAKEMORE, D. LONG, K.C. NOMURA et A. NUSSBAUM  
Progress in Semi-Conductors 6, 37 (1962)
- [34] C. RIGAUX, G. DRILHON, Y. ALPERT  
The Physics of Se and Te, p. 31 (1967), édité par Cooper  
Pergamon Press
- [35] N. MIURA et S. TANAKA Europhysics Conference on the Physics of  
Se and Te, Pont-à-Mousson (1971)



- [36] M.V. ORTENBERG Phys. Stat. Sol. b 60, 531 (1973)
- [37] J.S. BLAKEMORE, J.W. SCHULTZ et K.C. NOMURA  
Journal of Appl. Phys. 31 n°12 (1960)
- [38] R.J. STOKES, Ch. LI, T.L. T.L. JOHNSTON  
Acta Met. 9, 716 (1961)
- [39] J.C. DOUKHAN Thèse d'Etat, Lille (1971)
- [40] J. DI PERSIO, J.C. DOUKHAN, G. SAADA  
Journal de Physique 28, 661 (1967)
- [41] J.C. DOUKHAN, N. DOUKHAN, G. SAADA, B. THOMAS  
Phys. Stat. Sol. 35, 835 (1969)
- [42] J. DI PERSIO, J.C. DOUKHAN, G. SAADA  
Phys. Stat. Sol. 42, 281 (1970)
- [43] J. DI PERSIO, J.C. DOUKHAN, G. SAADA  
Phys. Stat. Sol. 42, 297 (1970)
- [44] J.C. DOUKHAN, B. ESCAIG Phys. Stat. Sol. a 7, 441 (1971)
- [45] J.L. FARVACQUE, J. CRAMPON, J.C. DOUKHAN et B. ESCAIG  
Phys. Stat. Sol. a 14, 623 (1972)
- [46] J. CRAMPON, J.C. DOUKHAN, B. ESCAIG et J.L. FARVACQUE  
Phys. Stat. Sol a 24, 167 (1974)
- [47] J.L. FARVACQUE, J.C. DOUKHAN, B. ESCAIG et T. TUOMI  
Phys. Stat. Sol. a 36, 461 (1976)
- [48] U. Von ALPEN, J.C. DOUKHAN, B. ESCAIG et P. GROSSE  
Phys. Stat. Sol. b 55, 667 (1973)
- [49] U. Von ALPEN, J.C. DOUKHAN et P. GROSSE  
Phys. Rev. Lett. 32, 15 (1974)
- [50] E. GERSTENHAUER, G. BAUER et P. GROSSE  
Phys. Stat. Sol a 64, K 103 (1974)
- [51] G. BAUER, J.C. DOUKHAN, E. GERSTENHAUER et P. GROSSE à paraître

- [52] G. FAIVRE Phil. Mag. 29 n°6, 1289 (1974)
- [53] G. FAIVRE in Lattice Defects in semi-conductors, p. 256  
Friebourg Conference (1974) édité par the Institut of Physics,  
London and Bristol (1975)
- [54] S.A. ABAKAROV, E. YU BANYULIS, G.B. BAGDUEV, G.A. IVANOV,  
N.G. POLIKHRONIDI, V.I. CHERNOBAI Fiz. Tekh. Poluprov 7, 579 (1973)
- [55] S.A. ABAKAROV, A.R. AMIROVA, G.B. BAGDUEV et A.M. MAGDIEV  
Fiz. Tverd. Tela 16, 2817 (1974)
- [56] J.C. DOUKHAN, R. DROPE, J.L. FARVACQUE, E. GERLACH et P. GROSSE  
Phys. Stat. Sol. b 64, 237 (1974)
- [57] J. CRAMPON, J.C. DOUKHAN, J.L. FARVACQUE, E. GERLACH et P. GROSSE  
in Lattice defects in semi-conductors, p. 415, Friebourg Conference  
(1974) édité par the Institut of Physics (London and Bristol) (1975)
- [58] J.L. FARVACQUE, J.C. DOUKHAN, U. Von ALPEN, E. GMELIN  
Phys. Stat. Sol. b 79 n°2 (1977)
- [59] J.L. FARVACQUE, J.C. DOUKHAN, Von ALPEN, E. GMELIN  
in Radiation effects in Semi-conductors, Dubrovnic Conference (1976)  
édité par the Institute of Physics, London and Bristol (1977)
- [60] J.L. FARVACQUE, J.C. DOUKHAN et B. ESCAIG  
Phys. Stat. Sol. a 38 (1976)
- [61] J.L. FARVACQUE, E. GERLACH Phys. Stat. Sol. b 77, 651 (1976)
- [62] J.L. FARVACQUE, P. LENGLART Phys. Stat. Sol. b 80 n°1 (1977)
- [63] J.L. FARVACQUE, P. LENGLART Phys. Stat. Sol. b 80 n°2 (1977)
- [64] M. WILKENS Canad. J. Phys. 45, 567 (1967)
- [65] J.L. FARVACQUE Thèse 3e Cycle, Lille (1972)
- [66] A.J. BRADLEY Phil. Mag. 48, 477 (1924)
- [67] P. GROSSE Springer tracts in modern physics n°48, Springer - Verlag  
Berlin Heideberg, New-York (1969)

- [68] R. FOURET, G. LUSSIEZ, M. MORE C.R.A.S. 265, 553 (1967)
- [69] J. FRIEDEL Résultats non publiés
- [70] J. CRAMPON Thèse 3e Cycle, Lille (1973)
- [71] B. ESCAIG J. Phys. c (Solid State Phys.) 27, 205 (1966)
- [72] B. ESCAIG Phys. Stat. Sol. 28, 463 (1968)
- [73] F.C. FRANK Rep. Symp. Plastic Deformation of Crystalline Solids, Carnegie Institute of Technology, Pittsburg (1950), p. 150
- [74] S. AMELINCKX et W. DEKEYSER Solid State Physics vol. 8, p. 325
- [75] F. GUIU et P.L. PRATT Phys. Stat. Sol. 6, 111 (1964)
- [76] J. STÜKE "The Physics of Selenium and Tellurium" édité par W.C. Cooper, Pergamon Press (1967)
- [77] T. OKADA Mem. Fac. Sci. Kyusyu Univ. B n°1, 157 (1955)
- [78] V.E. BOTTOM Phys. Rev. 74 (1948)
- [79] H. ROTH J. Phys. Chem. Solids 8 (1959)
- [80] H.B. CALLEN J. Chem. Phys. 22, 518 (1954)
- [81] A. NUSSBAUM Phys. Rev. 94, 337 (1954)
- [82] R.V. PARFENEV, A.M. POGARSKII and I.I. FARBSHTEIN Soviet Phys. Solid. State 4, 2630 (1963)
- [83] A.G. ARONOV, V.G. KRIGEL and I.I. FARBSHTEIN ZhETF Pis. Red. 14 n°5, 307 (1971)
- [84] KÔKI TAKITA, TAKA AKI MAGIWARA and SHOJI TANAKA J. of the Phys. Soc. of Japan vol. 31 n°5 (1971)
- [85] KÔKI TAKITA, KATUMI SUZUKI and SHOJI TANAKA J. of the Phys. Soc. of Japan vol. 34 n°3 (1973)
- [86] J.C. DOUKHAN Thèse d'Etat, Lille (1971)

- [87] J.C. DOUKHAN, J.L. FARVACQUE Phys. Stat. Sol. a 4, K 1 (1971)
- [88] LANDAU et LIFSCHITZ Elasticité, éditions MIR Moscou
- [89] H. TEICHLER dans "Lattice defects in semi-conductors", p. 374  
Conference de Freiburg (1974) édité par the Institute of Physics  
London and Bristol (1975)
- [90] W. SHOCKLEY Phys. Rev. 91, 228 (1953)
- [91] K. MASCHKE Phys. Stat. Sol. 41, 649 (1970)
- [92] B. KRAMER, K. MASCHKE and L.D. LANDE  
Phys. Stat. Sol. b 59, 219 (1973)
- [93] G.L. BIR and G.E. PIKUS "Symmetry and Strain-induced effects in  
semi-conductors" édité par John Wiley & Sons, New-York - Toronto  
(1974)
- [94] Consulter par exemple W.G. CADY Piezoelectricity Mc Graw-Hill  
N.Y. (1946)
- [95] J.D. ESHELBY, W.J. READ and W. SHOCKLEY  
Acta Metallurgica vol. 1 may (1953)
- [96] N.F. MOTT Proc. Cambridge Phil. Soc. 32, 281 (1936)
- [97] M.G. CALKIN, P.J. NICHOLSON Rev. of Mod. Phys. vol. 39 n°2,  
p. 361 (1967)
- [98] J. LINDHARD Kong Danske Vid. Selsk mat-fys. Medd 28 n°8 (1954)
- [99] E. GERLACH Phys. Stat. Sol. b 61, K 97 (1974)
- [100] E. GERLACH Phys. Stat. Sol. b 62, K 43 (1974)
- [101] J. LABBE Journal de Physique 29, 195 (1968)
- [102] H. TEICHLER Phys. Stat. Sol. b 44, 217 (1971)
- [103] a) M.M. COHEN and V. HEINE Phys. Rev. 122, 1821 (1961)  
b) V. HEINE Sol. Stat. Phys. 24, 20 (1970)

- [104] N.W. ASHCROFT Phys. Letters 23, 48 (1966)
- [105] F.J. BLATT "Physics of Electronic Conduction in Solids"  
Mc Graw Hill (1968)

