

N° d'ordre : 715

50376  
1987  
31

# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE FLANDRES ARTOIS

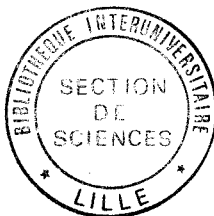
U.F.R. DE PHYSIQUE FONDAMENTALE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Denise FERRÉ



## INFLUENCE DE LA DEFORMATION PLASTIQUE SUR LES PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES DE $IN_{Sb}$ ET $GAAs$

Date de soutenance : le 27 Mars 1987

M.	B.	ESCAIG	Professeur, Université de Lille	Président
M.	J.C.	DESOYER	Professeur, Université de Poitiers	Rapporteurs
M.	Y.	MARFAING	Directeur de Recherche, CNRS Bellevue	
M.	J.L.	FARVACQUE	Maître de Conférences, Lille	
M.	E.	GERLACH	Professeur, Université d'Aix la Chapelle	Examineurs
M.	P.	GROSSE	Professeur, Université d'Aix la Chapelle	
M.	E.	CONSTANT	Professeur, Université de Lille	
M.	A.	FRIEDERICH	Directeur Scientifique LCR Thomson	

*Les grands livres changent la vie, les bons  
l'éclairent, les mauvais l'attristent non seulement  
parce qu'ils sont mauvais, et qu'ils prolifèrent,  
mais parce qu'ils ont toujours quelque côté par où  
l'on pourrait les avoir écrits.*

Marthe ROBERT

Livre de Lectures

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide de l'Université des Sciences et Techniques de Lille, sous la direction de J.L. FARVACQUE que je tiens à remercier tout particulièrement. La progression de mon travail doit beaucoup à son enthousiasme communicatif, à sa compétence et à sa disponibilité constante. Il m'est agréable de souligner ici tout le bénéfice résultant de notre amicale collaboration.

En acceptant la présidence du jury de cette thèse, Monsieur le Professeur ESCAIG témoigne de l'intérêt qu'il a toujours porté aux thèmes de recherche du groupe "semiconducteurs". Je lui exprime toute ma gratitude pour l'honneur qu'il me fait.

Monsieur le Professeur DESOYER a bien voulu juger ce travail, je lui suis très reconnaissante pour l'examen attentif auquel il a soumis mon étude.

Je suis très sensible à l'intérêt que Monsieur Y. MARFAING a manifesté pour mon travail en acceptant lui aussi d'être rapporteur de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de mes plus vifs remerciements.

Je suis particulièrement reconnaissante à Messieurs les Professeurs P. GROSSE et E. GERLARCH d'avoir accepté de faire partie du jury.

Monsieur le Professeur CONSTANT, Directeur du Pôle Microélectronique de la Région Nord - Pas de Calais, et Monsieur FRIEDERICH, Directeur Scientifique du Laboratoire Central de Recherches de la Société Thomson CSF, ont bien voulu porter une attention particulière aux études et travaux effectués au laboratoire. Je suis très honorée de leur présence dans mon jury et je les en remercie.

Qu'il me soit également permis d'associer dans une même pensée tous mes collègues du laboratoire. Leur soutien scientifique et amical a grandement contribué à la réussite de ce travail.

La réalisation du mémoire a bénéficié de l'aide efficace de B. DUPONT pour la dactylographie, M. RAFFAUD pour la réalisation des figures, J.F. DHENIN pour les travaux photographiques et du personnel de l'atelier de reproduction de l'UER de Physique Fondamentale pour l'impression du texte. Tous ont fait preuve d'une compétence, d'une disponibilité et d'un souci du travail bien fait dont je les remercie très sincèrement.

# S O M M A I R E

\*\*\*\*\*

Page

INTRODUCTION.

## CHAPITRE I : PLASTICITE ET NON CENTROSYMETRIE DE LA STRUCTURE CRISTALLINE

I-1. LES DISLOCATIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS A COORDINATION TETRAEDRIQUE.....	11
I-1.1. Le modèle de Read.....	11
I-1.2. Structure de coeur "glide" et "shuffle".....	13
I-1.3. Dissociation des dislocations.....	14
I-1.4. Les dislocations dans les composés III-V.....	16
I-2. INFLUENCE DU CARACTERE POLAIRE DES COMPOSES III-V SUR LEUR COMPORTEMENT PLASTIQUE.....	18
I-2.1. Vitesse des dislocations individuelles.....	18
I-2.2. Comportement macroplastique.....	20
I-2.3. Répartition des caractères A, B, vis sur une boucle.....	21
I-2.4. Choix d'une orientation des éprouvettes de déformation..	24

## CHAPITRE II : ASYMETRIE DE COMPORTEMENT PLASTIQUE.

II-1. TECHNIQUES EXPERIMENTALES.....	37
II-1.1. Matériaux utilisés.....	37
II-1.2. Préparation des éprouvettes.....	39
II-1.3. Montage de déformation.....	41
II-2. COMPORTEMENT MECANIQUE DES COMPOSES III-V.....	43
II-2.1. Asymétrie de déformation.....	43
II-2.2. Analyse de la géométrie du glissement.....	47
II-2.3. Variation de la limite élastique avec la température....	48

	Page
II-3. ORIGINE DE L'ASYMETRIE DE COMPORTEMENT PLASTIQUE.....	50
II-3.1. Introduction bibliographique.....	50
II-3.2. Comportement préplastique de l'antimoniure d'indium.....	53
II-3.3. Observations complémentaires en microscopie électronique en transmission.....	56
II-3.4. Conclusion.....	59
CHAPITRE III : ACTIVATION THERMIQUE DU GLISSEMENT.	
III-1. LES ESSAIS DE RELAXATION MECANIQUE.....	67
III-1.1. Principe de l'essai de relaxation de contrainte	67
III-1.2. Analyse de l'essai de relaxation.....	69
III-1.3. Evolution du volume en fonction du taux de déformation et de la température.....	71
III-2. FORMALISME DE L'ACTIVATION THERMIQUE.....	76
III-2.1. Equation d'état de la déformation.....	76
III-2.2. Détermination du volume d'activation et de la limite élastique.....	80
III-2.3. Méthode d'intégration partielle et détermination de $\Delta G_0$ .....	83
III-3. CONCLUSION.....	86
PRESENTATION BIBLIOGRAPHIQUE.....	93
CHAPITRE IV : FONDEMENT DU MODELE THEORIQUE.	
IV-1. NIVEAUX PROFONDS ASSOCIES AUX DISLOCATIONS.....	111
IV-1.1. Désordre local dans le coeur d'une dislocation..	112
IV-1.2. Influence de la structure de coeur.....	113
IV-2. STATISTIQUE D'OCCUPATION DES NIVEAUX.....	116

	Page
IV-2.1. Fondements du modèle théorique.....	116
IV-2.2. Mécanismes d'écrantage de la dislocation.....	117
IV-2.3. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations.....	121
IV-3. CRITIQUES DU MODELE PROPOSE.....	123
IV-3.1. Validité de l'approximation de Debye-Hückel.....	123
IV-3.2. Déplacement non rigide des bandes d'énergie.....	125
IV-3.3. Délocalisation des états électroniques.....	127
IV-4. MOBILITE INDUITE PAR LES DISLOCATIONS.....	129
IV-4.1. Origines de la réduction de mobilité.....	129
IV-4.2. Méthode de l'énergie perdue.....	130
IV-4.3. Le potentiel de diffusion piezoélectrique.....	132
IV-4.4. Le potentiel de diffusion par effet de ligne chargée.....	134
IV-4.5. Le potentiel de déformation.....	135
IV-4.6. Mobilité induite par les dislocations.....	137

CHAPITRE V : COMPORTEMENT GENERAL DU MODELE THEORIQUE.

V-1. CONDITIONS D'EXPLOITATION DU MODELE - CHOIX DES PARAMETRES.

V-1.1. Caractéristiques du matériau de référence.....	145
V-1.2. Taux d'occupation de la dislocation neutre.....	148

V-2. APPLICATION DU MODELE AU MATERIAU DE TYPE n.

V-2.1. Evolution du taux d'occupation de la dislocation chargée.....	150
V-2.2. Conditions de neutralité électrique de la dislo- cation.....	150
V-2.3. Réduction de la mobilité des porteurs libres.....	160
V-2.4. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations vis.....	164

	Page
V-3. APPLICATION DU MODELE A D'AUTRES SITUATIONS PHYSIQUES....	167
V-3.1. Cas d'un matériau de type p.....	167
V-3.2. Dissociation et reconstruction des dislocations...	169
V-3.3. Délocalisation de la charge piégée par la dislocation.....	171
 CHAPITRE VI : PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES DES ECHANTILLONS DEFORMES.	
VI-1. INFLUENCE DE LA DEFORMATION PLASTIQUE SUR LES PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES.....	183
VI-1.1. Conditions expérimentales.....	183
VI-1.2. Relation entre grandeurs mesurées et grandeurs calculées.....	184
VI-1.3. Effet Hall et résistivité de GaAs déformé.....	185
VI-1.4. Effet Hall et résistivité de InSb déformé.....	190
VI-2. ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX.....	196
VI-2.1. Problèmes liés à la description du matériau de référence.....	196
VI-2.2. Principe de dépouillement.....	201
VI-2.3. Analyse de l'effet Hall dans GaAs déformé.....	206
VI-3. DISCUSSION.....	210
VI-3.1. Comparaison des résultats obtenus dans GaAs et InSb.....	210
VI-3.2. Sur une origine possible des défauts ponctuels créés au cours de la déformation.....	213
CONCLUSION.....	221
ANNEXE A.....	225
ANNEXE B.....	229
ANNEXE C.....	239



## INTRODUCTION

\*\*\*

La qualité des composants électroniques fabriqués à partir de composés III-V ou d'alliages ternaires et quaternaires peut être considérablement limitée par l'existence de défauts. Deux types d'effets sont à l'origine de cette limitation. Le premier, lié aux processus de fabrication des matériaux, tient à la présence de défauts de croissance dont la densité et la répartition sont généralement mal maîtrisées. Le second concerne l'évolution des composants, leur vieillissement, qui est probablement dû à l'apparition de défauts au cours du fonctionnement.

Ces phénomènes de dégradation sont très mal connus mais pourraient être liés à des interactions entre dislocations et défauts ponctuels. De plus, bien qu'il soit maintenant possible de produire des substrats à faible densité de dislocations de croissance (GaAs fortement dopé avec des impuretés isoélectroniques par exemple), l'élaboration des composants eux-mêmes peut provoquer l'apparition de dislocations pour relaxer des contraintes locales.

Notre travail se situe en amont des réalisations technologiques et nous nous sommes fixés pour but

- d'une part de caractériser la plasticité des composés semi-conducteurs III-V, en particulier d'en souligner l'originalité par rapport au cas des semiconducteurs élémentaires,

- d'autre part d'étudier l'influence de la déformation plastique sur les propriétés de transport du matériau.

Après avoir rappelé au chapitre I que l'intérêt d'une étude de la plasticité des composés III-V est lié à l'absence d'un centre de symétrie de la

structure cristallographique, nous montrons au chapitre II comment l'expansion des boucles de dislocations se répercute directement sur le comportement plastique macroscopique ainsi que sur les sous-structures de dislocations laissées dans les éprouvettes après déformation.

Au chapitre III, nous adaptons au cas d'un matériau contenant une très faible densité de dislocations de croissance, le formalisme d'activation thermique généralement proposé pour décrire l'aspect phénoménologique de la déformation plastique dans les solides cristallins. Nous établissons les relations entre les grandeurs théoriques de l'analyse et les grandeurs expérimentales en proposant une détermination cohérente des paramètres de l'activation thermique.

La deuxième partie de ce mémoire s'attache à présenter les problèmes liés à l'interprétation des effets de la déformation plastique sur les propriétés de transport du matériau. Le modèle théorique établissant le rôle des dislocations dans la réduction du nombre des porteurs libres et de leur mobilité est exposé au chapitre IV. La statistique d'occupation électronique des niveaux profonds associés aux dislocations tient compte du déplacement de ces niveaux à l'intérieur de la bande interdite par interaction électrostatique entre porteurs piégés. La mobilité, calculée par la méthode de l'énergie perdue, résulte à la fois de l'effet de diffusion lié à la charge extrinsèque des dislocations, de l'effet piezoélectrique et de l'effet du potentiel de déformation.

L'application de ce modèle à des situations physiques types est donnée au chapitre V où nous examinons en particulier l'influence de la structure de coeur de la dislocation sur l'efficacité du piégeage.

Disposant d'un outil de calcul effectif de la résistivité induite par les dislocations, nous confrontons au chapitre VI les résultats d'une étude expérimentale des phénomènes de transport aux simulations numériques du chapitre V. La compatibilité de ces informations entre elles est examinée en vue d'une identification des défauts responsables de la réduction de conductivité dans le matériau déformé.

PREMIERE PARTIE :

PLASTICITÉ DES COMPOSÉS III-V

- ' Chapitre I : Plasticité et non centrosymétrie de la structure cristalline
- ' Chapitre II : Asymétrie de comportement plastique
- ' Chapitre III : Activation thermique du glissement

CHAPITRE I

PLASTICITÉ ET NON CENTROSYMÉTRIE  
DE LA STRUCTURE CRISTALLINE

## CHAPITRE I

\*\*\*

### PLASTICITE ET NON CENTROSYMETRIE DE LA STRUCTURE CRISTALLINE

#### I-1. LES DISLOCATIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS A COORDINATION TETRAEDRIQUE.

I-1.1. Le modèle de Read.

I-1.2. Structure de coeur "glide" et "shuffle".

I-1.3. Dissociation des dislocations.

I-1.4. Les dislocations dans les composés III-V.

#### I-2. INFLUENCE DU CARACTERE POLAIRE DES COMPOSES III-V SUR LEUR COMPORTEMENT PLASTIQUE.

I-2.1. Vitesse des dislocations individuelles.

I-2.2. Comportement macroplastique.

I-2.3. Répartition des caractères A, B, vis sur une boucle.

I-2.4. Choix d'une orientation des éprouvettes de déformation.

## I-1. LES DISLOCATIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS A COORDINATION TETRAEDRIQUE.

Historiquement, la première théorie électronique des dislocations dans les semiconducteurs covalents est celle de Shockley en 1953 ; à partir d'un modèle simple de structure de coeur d'une dislocation à  $60^\circ$ , Shockley fait l'hypothèse que les états d'énergie électroniques associés aux liaisons pendantes du coeur forment, dans la bande interdite, une bande unidimensionnelle, à moitié remplie dans l'état neutre de la dislocation | 1 |.

Les calculs les plus récents des états électroniques dûs aux dislocations mettent cependant en relief la forte dépendance des niveaux d'énergie avec la structure de coeur. Les travaux de Marklund par exemple, montrent que les reconstructions du coeur qui éliminent toutes les liaisons pendantes ne laissent que peu de niveaux dans la bande interdite | 2 |.

Le choix des positions atomiques dans un cristal contenant des dislocations étant déterminant pour le calcul des niveaux d'énergie, il nous a semblé intéressant de faire un bref rappel des différents modèles et observations du coeur des dislocations dans les semiconducteurs covalents.

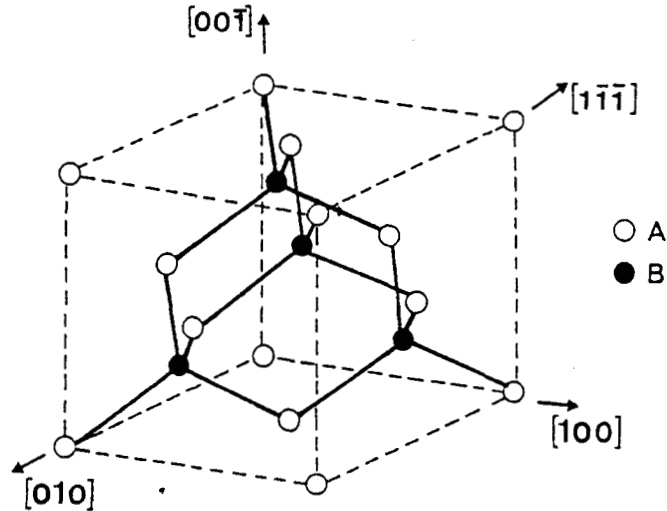
La structure zinc-blende dans laquelle cristallise la majorité des composés III - V présente une grande similitude avec la structure diamant et la connaissance actuelle que nous avons des dislocations dans ces composés découle, pour une grande part, des études très nombreuses menées depuis le début des années 50 sur le silicium et le germanium.

De fait, les composés III - V ont des propriétés mécaniques très comparables à celles des semiconducteurs covalents ; toutefois, en raison même de leur caractère composé, ils s'en distinguent radicalement et présentent des particularités intéressantes notamment en ce qui concerne la structure de coeur très spécifique des dislocations à  $60^\circ$ .

### I-1.1. Modèle de Read des dislocations à $60^\circ$ dans le germanium

Les semiconducteurs covalents cristallisent dans la structure diamant ; le réseau de Bravais est cubique à faces centrées, le motif est constitué

de deux atomes situés respectivement en  $(0,0,0)$  et  $(1/4, 1/4, 1/4)$ . La liaison cristalline est une liaison covalente ; elle résulte de la combinaison d'orbitales  $sp_3$  et localise fortement la densité électronique le long de la droite joignant deux atomes premiers voisins (Fig. I.1).



*Figure I-1 : Maille élémentaire de la structure cubique diamant.*

Dans la structure diamant, les vecteurs de Burgers des dislocations parfaites sont du type  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ , les plans de glissement sont les plans  $(111)$ . En raison d'un frottement de réseau important, les dislocations s'alignent, lorsqu'elles sont en faible densité dans le cristal, suivant les directions  $\langle 110 \rangle$ . Les dislocations parfaites de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$  sont alors, soit de type vis, soit de type  $60^\circ$  lorsque le vecteur de Burgers et la ligne font un angle de  $60^\circ$ .

La dislocation à  $60^\circ$  a suscité un intérêt tout particulier à cause de l'existence possible de liaisons pendantes dans le coeur. Dans le modèle initial de Shockley, établi de manière à minimiser le nombre de liaisons fortement distordues, seules trois des quatre orbitales hybrides  $sp_3$  d'un atome de coeur sont couplées à des atomes en position de premier voisin pour former des liaisons covalentes ; la quatrième orbitale, non appariée, pointe dans le vide, d'où son nom d'orbitale pendante.

I-1.2. Structure de coeur "glide" ou "shuffle".

L'empilement des plans (111) dans la structure diamant se fait suivant une séquence I-1, II-2, III-3, I-1, II ... La figure I-2 a et b montre une vue perspective et sa projection sur le plan (110) de la structure cristalline. Deux plans (1 $\bar{1}\bar{1}$ ) voisins repérés par chiffres différents 1 et II, 2 et III... sont trois fois plus proches que deux plans (1 $\bar{1}\bar{1}$ ) voisins repérés par les mêmes chiffres I et 1, II et 2...

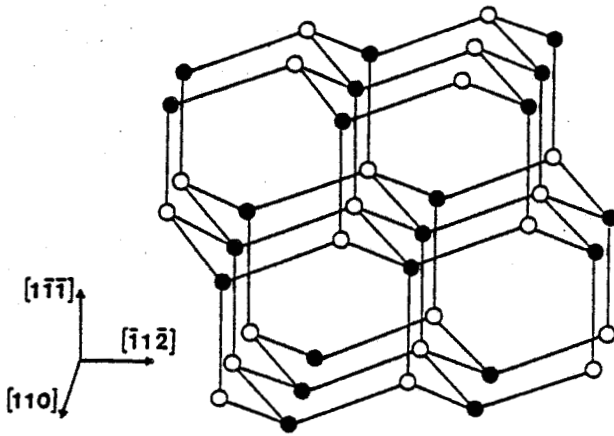
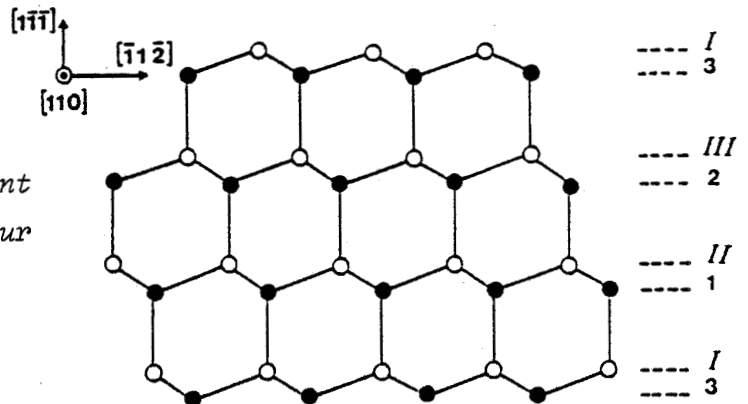


Figure I-2 : a) Vue perspective de la structure diamant.

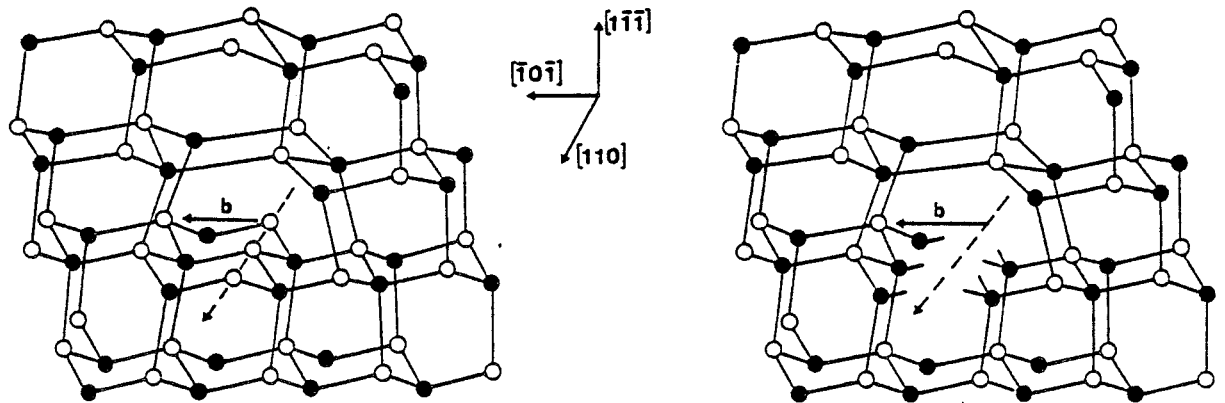
Figure I-2 : b) Structure diamant en projection sur la plan (110).



A cause du groupement des plans de glissement par paires, il convient de distinguer deux types de structure de coeur pour une dislocation suivant qu'elle est créée par cisaillement du cristal entre deux plans successifs 1 et I ou entre deux plans successifs 1 et II par exemple. Par commodité de rédaction, nous utilisons dès maintenant la terminologie classique "glide" et "shuffle" pour désigner les dislocations obtenues respectivement par un



cisaillement entre les plans I et II et entre les plans I et I, bien que ces appellations fassent référence à des possibilités de dissociation dont nous n'avons pas encore discuté (Fig. I-3 a et b).



*Figure I-3*

a) Dislocation parfaite à  $60^\circ$   
de type "shuffle".

b) Dislocation parfaite à  $60^\circ$   
de type "glide".

Si nous remarquons, d'une part que la distance entre les plans I et II est plus faible que la distance entre les plans I et I, d'autre part que le nombre de liaisons covalentes rompues pour créer une dislocation est trois fois plus grand dans le cas "glide" que dans le cas "shuffle", il n'est pas étonnant que la possibilité d'un cisaillement entre les plans I et II n'ait pas retenu l'attention des premiers auteurs.

### I-1.3. Dissociation

Différents modèles de dissociation des dislocations concevables dans la structure diamant ont été étudiés en détail par Hornstra [3] (dislocation "shuffle") et Hirth et Lothe [4] (dislocation "glide"); nous ne faisons que rappeler les principaux résultats de leurs travaux

. une dislocation "glide" peut se dissocier suivant la réaction de Shockley et la dislocation dissociée est glissile.

. la dissociation d'une dislocation "shuffle" fait intervenir sur un des bords du ruban de faute, une dislocation partielle complexe dont le glissement nécessite le mouvement coordonné et dans deux directions différentes d'atomes appartenant à deux plans voisins (shuffling).

. la dissociation d'une dislocation parfaite, "glide" ou "shuffle" ne change pas, globalement, le nombre de liaisons pendantes dans le coeur.

Malgré l'intérêt de ces résultats et faute d'observations expérimentales permettant de choisir entre les configurations "glide" et "shuffle", dissociée et non dissociée, le modèle simple de la dislocation "shuffle" non dissociée pour discuter des propriétés électriques des dislocations a prévalu jusqu'au début des années 70. L'avènement de la technique des faisceaux faibles en microscopie électronique a montré sans ambiguïté que les dislocations introduites par la déformation plastique étaient dissociées sur leur plus grande longueur [5-7]. De plus, il semble maintenant confirmé que le mouvement des dislocations peut se faire sans recombinaison préalable ce qui, compte tenu du caractère sessile d'une des partielles de la dislocation "shuffle" dissociée est plutôt en faveur de la configuration "glide" [8].

Plus récemment encore, des images de réseau obtenues en microscopie électronique à haute résolution ont été interprétées à partir d'un modèle "glide" du coeur de la dislocation à  $60^\circ$  [9-11]. En fait, Bourret, sans remettre en cause les acquis de la microscopie électronique à haute résolution reste plus nuancé quand il analyse la structure de coeur des dislocations dans le silicium obtenu par tirage Czochralski : la partielle à  $90^\circ$  de Shockley semble dénuée de défauts et les positions des atomes correspondent aux modèles géométriques proposés ; pour la partielle à  $30^\circ$  par contre, la colonne atomique située dans le coeur a un contraste très perturbé que Bourret attribue à la présence de défauts (lacunes, intersticiels ou impuretés) [12].

L'émission ou l'absorption de défauts ponctuels simples (lacunes ou intersticiels) transformant localement une dislocation "glide" en une dislocation "shuffle" et réciproquement, il devient difficile, si la dislocation est décorée, d'imaginer ce que peut être sa structure intrinsèque.

#### I-1.4. Dislocations dans les composés III-V

La structure sphalérite ne diffère de la structure diamant que par la nature différente des deux atomes A et B constituant le motif. Cette particularité lui confère un caractère non centrosymétrique puisque le point milieu du segment joignant deux atomes premiers voisins n'est plus, comme dans le germanium et le silicium, un centre d'inversion.

Dans la séquence d'empilement I-1, II-2, III-3, I... des plans (111), les plans atomiques repérés par les chiffres romains sont des plans contenant un seul type d'atomes, par exemple A, les plans repérés par les chiffres arabes ne contiennent que des atomes de l'autre type \*.

A cause du caractère non centrosymétrique de la structure cristalline, deux dislocations  $60^\circ$  de même orientation de ligne et de vecteurs de Burgers opposés ont des configurations de coeur différentes. Si nous nous référons à l'image traditionnelle de la dislocation  $60^\circ$  "shuffle" non dissociée, il apparaît clairement que la rangée d'atomes bordant le demi-plan supplémentaire est, soit une rangée d'atomes A, soit une rangée d'atomes B suivant que le vecteur de Burgers de la dislocation est  $+\bar{b}$  ou  $-\bar{b}$  (Fig. I-4). Cette propriété ne dépend pas du caractère "glide" ou "shuffle" de la dislocation.

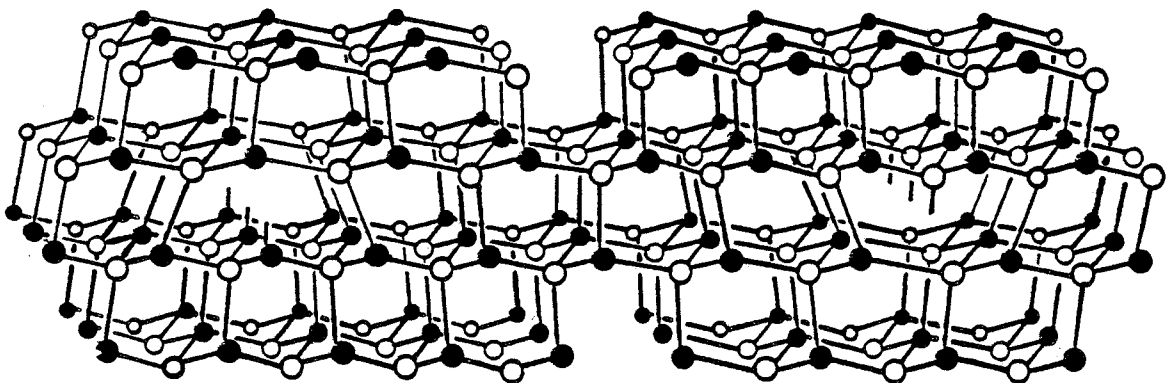


Figure I-4 : Dislocations à  $60^\circ$  de signes opposés dans la structure sphalérite.

Haasen a le premier remarqué que la nature différente des liaisons pendantes au coeur des dislocations  $60^\circ$  du type A ou B devait conduire à des propriétés mécaniques ou électriques spécifiques à chacun des types de dislocations [13]. Cette spécificité fait tout l'intérêt des composés III-V même si l'existence simultanée de deux types de dislocations  $60^\circ$  introduit une complexité supplémentaire par rapport au cas des semiconducteurs élémentaires tétravalents.\*

Les travaux de Gai et Howie sur GaP [14] puis de Gottschalk, Patzer et Alexander [15] sur GaAs, GaSb, InAs, InP et InSb ont montré que les dislocations sont dissociées dans les composés III-V ; l'éventuelle influence du caractère A ou B de la composante coin des dislocations sur la largeur de dissociation n'a toutefois pas été abordée dans ces études. Gomez et Hirsch (1978) ont mesuré, dans GaAs, les mêmes largeurs de dissociation pour des vecteurs de Burgers opposés [16] alors que Feuillet (1982), toujours dans GaAs, note une différence sensible des largeurs de dissociation pour les dislocations A et B [17].

Dans GaAs encore, Tanaka et Jouffrey (1984) ont obtenu en microscopie électronique à haute résolution, des images de dislocations  $60^\circ$  dissociées ; l'interprétation de ces images, subordonnée à des calculs de simulation bien adaptés au cas des composés III-V, s'avère cependant très délicate et ne permet pas de conclure au caractère "glide" ou "shuffle" des dislocations observées [18].

---

\* La direction  $[111]$ , non équivalente à la direction  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  est définie par convention dans les composés III-V comme la direction joignant un atome trivalent A à un atome pentavalent B premier voisin.

---

\* Conformément à la convention adoptée à la conférence de Hunfeld (1978) on appelle Dislocation A (respectivement B) une dislocation pour laquelle les atomes de coeur en positions très distordues sont des atomes A (respectivement B). Le caractère "shuffle" (s) ou "glide" (g) est éventuellement précisé entre parenthèses.

## I-2. INFLUENCE DU CARACTERE POLAIRE DES COMPOSES III-V SUR LEUR COMPORTEMENT PLASTIQUE.

La brève revue bibliographique faite précédemment montre à l'évidence que notre connaissance de la structure de coeur des dislocations dans les semiconducteurs à coordination tétraédrique reste très incomplète. Pour cette raison, et par souci de simplification, nous choisissons de discuter le comportement plastique des composés III-V en termes de dislocations "shuffle" non dissociées ; conformément à la convention de Hunfeld, les dislocations  $60^\circ$  dans ce modèle seront notées A(s) et B(s). Pour faciliter la comparaison de nos travaux avec d'autres études portant sur des sujets voisins, nous rappelons que les dislocations A(s) et B(s) correspondent respectivement aux dislocations notées  $\alpha$  et  $\beta$  dans la terminologie ancienne.

Etudier séparément les propriétés électroniques des dislocations A et B nécessite de savoir les introduire sélectivement et en densité suffisante ; il importe alors de connaître le comportement plastique du matériau afin de pouvoir définir des modes de déformation propres à remplir ces conditions. Comme les structures de coeur des dislocations A et B sont différentes, on peut supposer que les amplitudes de l'énergie de Peierls contrôlant le glissement des dislocations A et B sont également différentes. Si cette hypothèse est fondée, d'une part une boucle de dislocations doit se développer de façon asymétrique sous l'effet d'une contrainte appliquée, et d'autre part, cette asymétrie doit se refléter dans les propriétés plastiques macroscopiques du matériau.

### I-2.1. Vitesse des dislocations individuelles.

Le premier point a été vérifié expérimentalement par des mesures de vitesse de dislocations individuelles, faites le plus souvent en utilisant une technique de double figure d'attaque, effectuées aux points d'émergence de demi-boucles émises à partir d'une rayure [19 - 24]. Le nombre de paramètres intervenant dans ce type d'étude - mode de déformation, orientation des éprouvettes, gamme de température et de contrainte, caractéristiques des matériaux utilisés (dopage, densité de dislocations de croissance etc...) -

rend difficile la comparaison des résultats obtenus par les différents auteurs et explique peut être la dispersion apparente des mesures. De l'ensemble des résultats se dégagent cependant deux caractéristiques communes à tous les composés III-V : c'est d'une part la très grande différence des vitesses des dislocations A, B et vis et d'autre part l'effet important du dopage sur ces vitesses.

En règle générale, dans les matériaux non dopés, la vitesse des dislocations A(s) est, dans tout le domaine de température et de contrainte étudié, toujours beaucoup plus grande que celle des dislocations B(s) d'un facteur  $10^2$  à  $10^3$ .

Les résultats reportés sur la figure I-5, dus à Mihara et Ninomya pour InSb [21], à Choi, Mihara et Ninomya pour GaAs [23], sont caractéristiques de cette différence très importante entre les vitesses des deux types de dislocations  $60^\circ$ .

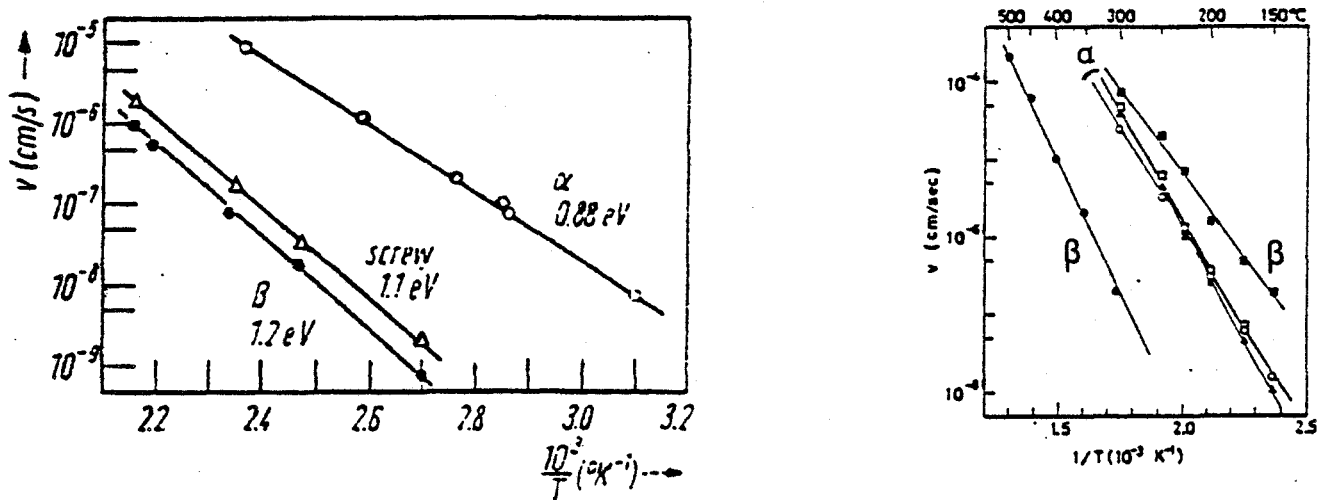


Figure I-5 : Vitesse des dislocations individuelles

a) n - InSb  
d'après Mihara et Ninomya [21]

b)  $\circ \bullet$  n - GaAs ;  $\square \blacksquare$  p - GaAs  
d'après Choi, Mihara, Ninomya [23]

Le dopage n ou p du matériau modifie les vitesses absolues et relatives des dislocations A et B. Dans GaAs, la vitesse des dislocations A(s) est peu sensible au dopage, contrairement à celle des dislocations B(s) qui varie fortement avec la densité d'impuretés ; le dopage p semble conduire aux différences les plus faibles entre les vitesses des deux types de dislocations  $60^\circ$ , le dopage n les accentue au contraire (Fig. I-5).

Des comportements assez semblables ont été observés dans InSb par Erofeeva et Osip'yan [19].

La vitesse des dislocations vis, pour lesquelles un nombre plus restreint de données est disponible, est généralement voisine de celle des dislocations B(s).

L'origine physique de ces différences dans les vitesses des dislocations A et B et vis n'est pas clairement comprise à ce jour, il faut cependant noter que la vitesse de la dislocation dépend de l'énergie de formation d'un double décrochement qui elle-même est fonction de la charge portée par unité de longueur de dislocation. Cette charge est définie par la statistique d'occupation du semiconducteur ; elle dépend à la fois de la position du niveau d'énergie associé à la dislocation - donc du type de dislocation - et de la position du niveau de Fermi dans le matériau de référence - donc du dopage - .

#### I-2.2. Comportement macroplastique.

L'antimoniure d'indium (température de fusion  $T_f = 798$  K) et l'arseniure de gallium ( $T_f = 1513$  K) sont des matériaux fragiles à basse température et deviennent progressivement ductiles lorsque la température s'élève. La transition fragile - ductile, souvent fixée vers  $0,5 T_f$  est en fait difficile à définir précisément car la limite dépend des conditions d'essai (mode de déformation, vitesse de déformation...) et du matériau utilisé (densité initiale de dislocations, état de surface...).

Les courbes contrainte - déformation des composés III-V monocristallins à vitesse de déformation imposée présentent en général, au début de l'essai, un crochet de contrainte dont l'amplitude est d'autant plus grande, pour une vitesse de déformation donnée, que la température est plus basse (ou à température donnée que la vitesse de déformation est plus élevée).

L'existence de ce crochet est due au manque de dislocations mobiles en densité suffisante pour assurer la déformation à la vitesse imposée [25]. La hauteur du crochet dépend des paramètres contrôlant la multiplication des

dislocations, en particulier de l'état de surface et de la densité initiale de dislocations. Un écrouissage superficiel par exemple, en créant des sources en grand nombre permet d'atteindre rapidement une densité de dislocations importante et a pour effet de réduire l'amplitude du crochet.

Compte tenu de ces remarques, il est formellement possible d'introduire sélectivement des dislocations d'un type donné dans les éprouvettes de déformation à condition :

- d'utiliser des monocristaux contenant une densité de dislocations de croissance aussi faible que possible,

- de définir une géométrie des éprouvettes telle qu'une surface convenablement choisie étant écrouie, le type de dislocations émises à partir de cette surface soit déterminé,

- de polir très soigneusement les échantillons pour n'avoir, en dehors de la surface abrasée que très peu de sources accidentelles parasites.

### I-2.3. Répartition des caractères A, B et vis le long d'une boucle hexagonale.

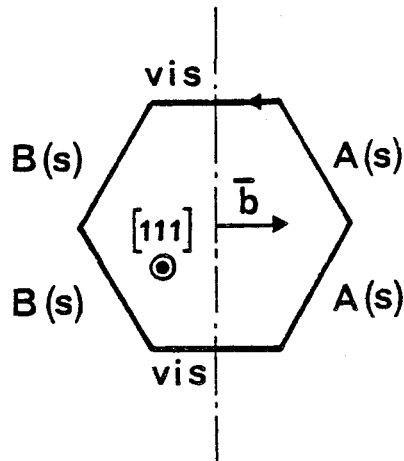
Les dislocations ont un vecteur de Burgers de type  $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ . Elles glissent dans les plans  $\{111\}$  et sont généralement constituées de segments orientés suivant des directions  $\langle 110 \rangle$  ; aussi nous considérons le cas d'une boucle de forme hexagonale. C'est un cas de figure a priori intéressant car une boucle de ce type fait apparaître simultanément le long de la même ligne, les trois caractères A, B et vis répartis comme le montre la Fig. I-6.

Deux segments à  $60^\circ$  contigus sont de même nature A ou B alors que deux segments à  $60^\circ$  séparés par un segment vis sont de natures opposées.

Par suite de la non centrosymétrie de la structure, le caractère A ou B des segments à  $60^\circ$  en front de boucle (relativement au sens du vecteur de Burgers) n'est pas quelconque :



Le front d'une boucle hexagonale, dont la normale est  $[111]$  ou une des trois directions équivalentes ( $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ,  $[\bar{1}1\bar{1}]$ ), orientée dans le sens de rotation d'une vis à droite avançant le long de la normale est de type A en mode "shuffle" (Fig. I-6).



*Figure I-6* : Répartition des caractères A, B et vis le long d'une boucle hexagonale.

Les dislocations créées à partir d'une source voisine de la surface résultent du développement de demi-boucles sous l'effet de la contrainte appliquée. Le caractère des segments de dislocations constituant les demi-boucles émises par une face abrasée est déterminée par la géométrie relative du vecteur de Burgers (sens et direction) et de la surface (Fig. I-7). Nous appelons demi-boucle A, toute demi-boucle émise par une face dont le vecteur de Burgers est un vecteur rentrant (dans l'échantillon) par rapport à la surface et demi-boucle B une demi-boucle de vecteur de Burgers sortant (de l'échantillon). Une demi-boucle de vecteur de Burgers parallèle à la surface est notée V.\*

---

\* ils s'agit toujours ici de boucles dont la normale est  $[111]$  ou l'une des directions équivalentes, orientée dans le sens de rotation d'une vis à droite avançant le long de la normale.

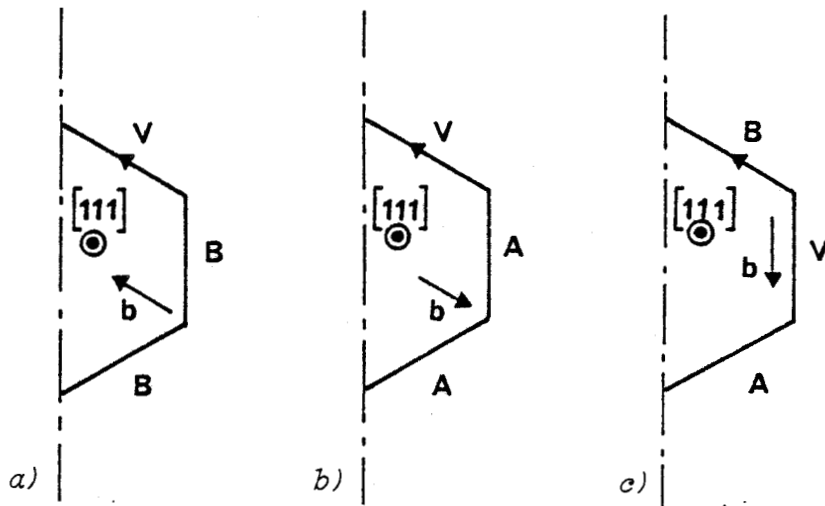


Figure I-7 : Caractère des segments de dislocations le long d'une boucle se développant au voisinage de la surface.

- a) Le vecteur de Burgers  $\vec{b}$  est un vecteur sortant (de l'échantillon)  $b_x < 0$ .  
 b)  $b_x > 0$ .      c)  $b_x = 0$ .

Deux cas limites intéressants sont à considérer lorsque, sur un jeu de deux éprouvettes de même orientation on abrase sur l'une, une face, et sur l'autre la face opposée.

- Le vecteur de Burgers est parallèle à la face abrasée ; les dislocations développées en compression seront identiques dans les deux éprouvettes (Fig. I-8 a).

- Le vecteur de Burgers est orthogonal à la face abrasée : les segments  $60^\circ$  des dislocations développées en compression seront de type A dans l'une des éprouvettes, de type B dans l'autre (Fig. I-8 b).

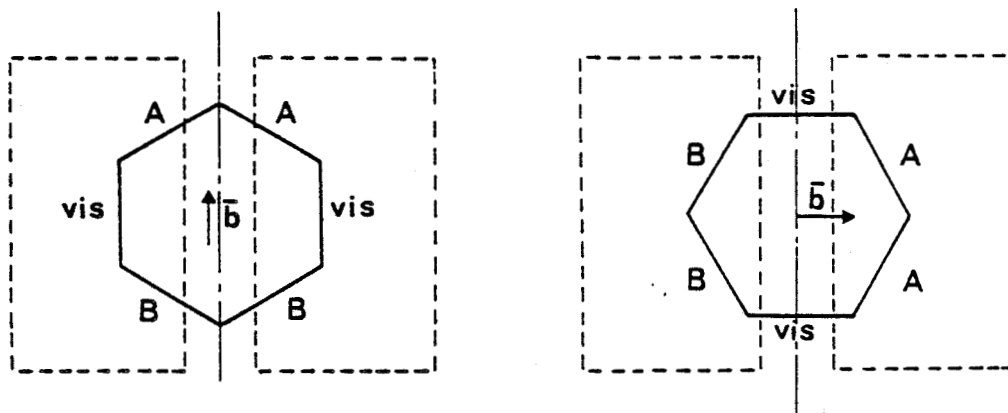


Figure I-8 : Caractères des demi-boucles émises par une face et son opposée.

- a)  $\vec{b}$  est parallèle à la surface.  
 b)  $\vec{b}$  est perpendiculaire à la surface.

#### I-2.4. Orientation des éprouvettes de déformation.

L'orientation des éprouvettes de déformation est schématisée sur la figure I-9. C'est une orientation classique de déformation en glissement simple : l'axe de compression est parallèle à une direction  $\langle 123 \rangle$  les faces latérales étant des plans  $\{111\}$  et  $\{541\}$ .

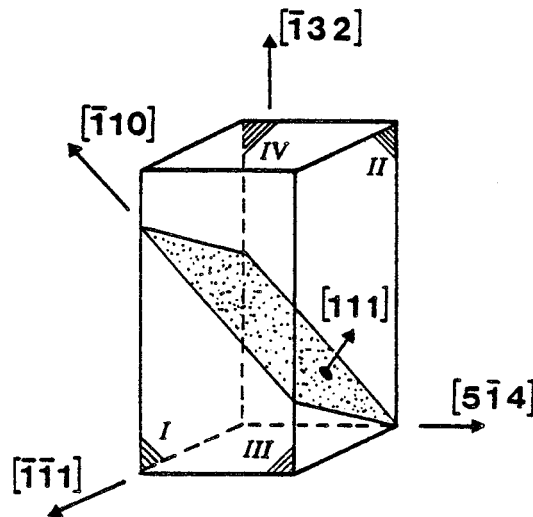


Figure I-9 : Orientation des éprouvettes de déformation.

Le système de glissement principal est  
 $(111) \frac{1}{2} [\bar{1}10]$  .

Dans la suite de l'exposé, les faces de l'échantillon seront notées :

- I pour la face latérale gauche  $(\bar{5}1\bar{4})$
- II pour la face latérale droite  $(5\bar{1}4)$
- III pour la face avant  $(\bar{1}\bar{1}1)$
- IV pour la face arrière  $(11\bar{1})$

Seules seront émises par les faces de l'éprouvette de déformation, les boucles susceptibles de s'agrandir sous l'effet de la contrainte appliquée, c'est à dire celles pour lesquelles la composante dans le plan de glissement de la force de Peach et Koehler est dirigée vers l'extérieur de la boucle.

Le tableau ci-dessous donne les facteurs de Schmid des différents systèmes de glissement susceptibles d'être activés dans cette géométrie. Sont également notés dans le tableau les caractères des demi-boucles qui se développent à partir de chacune des faces de l'éprouvette et ce, pour les différents systèmes de glissement.

Plan de glissement	Vecteur de Burgers		$\phi$	I	II	III	IV
( 111 ) ABC	$\frac{a}{2} [\bar{1} 1 0]$	AB	0,47	B	A	V	V
	$\frac{a}{2} [\bar{1} 0 1]$	CB	0,36	B	A	B	A
	$\frac{a}{2} [0 1 \bar{1}]$	AC	0,11	B	A	A	B
( 1 $\bar{1}\bar{1}$ ) ADC	$\frac{a}{2} [\bar{1} \bar{1} 0]$	CD	0,36	B	A	B	A
	$\frac{a}{2} [\bar{1} 0 \bar{1}]$	AD	0,21	B	A	V	V
	$\frac{a}{2} [0 \bar{1} 1]$	CA	0,15	A	B	B	A
( $\bar{1} 1 \bar{1}$ ) DBC	$\frac{a}{2} [0 1 1]$	DB	0,26	A	B	V	V
	$\frac{a}{2} [\bar{1} 0 1]$	CB	0,16	B	A	B	A
	$\frac{a}{2} [1 1 0]$	DC	0,11	A	B	A	B

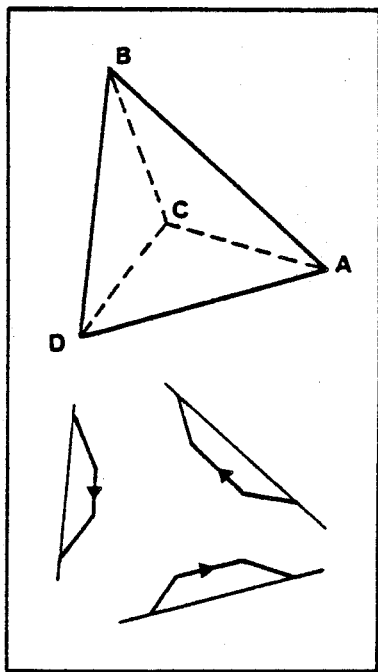
*Tableau des facteurs de Schmid des différents systèmes de glissement pour la géométrie de la Fig. I-9.*

Sur la figure I-10 a, b, c, d, nous avons indiqué l'orientation des plans de glissement, les directions préférentielles des segments de dislocations et des vecteurs de Burgers telles qu'elles apparaissent sur chacune des faces de l'éprouvette. La convention adoptée pour représenter le tétraèdre de Thomson est celle de Hirth et Lothe [4]. Pour chaque face, la figure I-10 montre les demi-boucles appartenant à chacun des trois plans de glissement sollicités telles qu'elles se développent dans l'échantillon à partir d'une source voisine de la surface. Ces schémas ne rendent pas

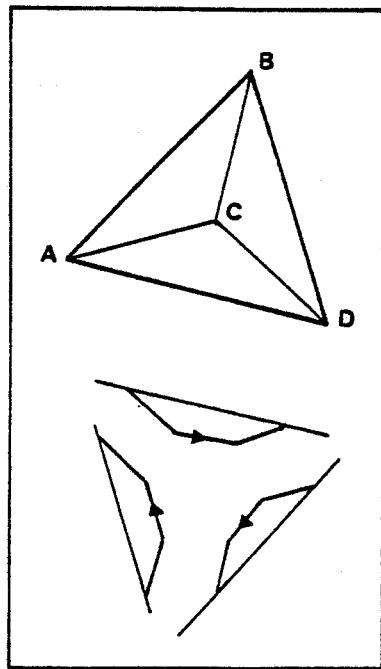
compte d'une éventuelle modification de la forme semi-hexagonale des boucles pendant leur développement, dû à la différence de vitesse des différents segments.

Dans l'hypothèse où la déformation est entièrement assurée par le système de glissement primaire ( $\phi = 0,47$ ), les demi-boucles de dislocations qui se développent à partir de sources créées en abrasant la face I sont constituées de segments vis et de segments B(s) ; dans le cas où la face II est abrasée les segments à  $60^\circ$  sont de type A(s).

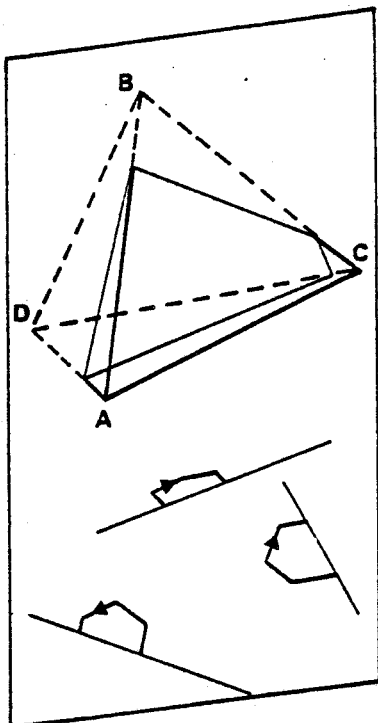
Les vitesses des dislocations individuelles A, B et vis étant très différentes, il en résulte un développement asymétrique des boucles de dislocations, le comportement plastique, en compression, d'une éprouvette dont la face I est abrasée peut ne pas être identique à celui d'une éprouvette abrasée sur la face II. La présentation et l'analyse, au chapitre II, du comportement mécanique des couples d'éprouvettes abrasées sur les faces I et II nous permettra de revenir sur ce qui fût, à l'origine de cette étude, une hypothèse de travail.



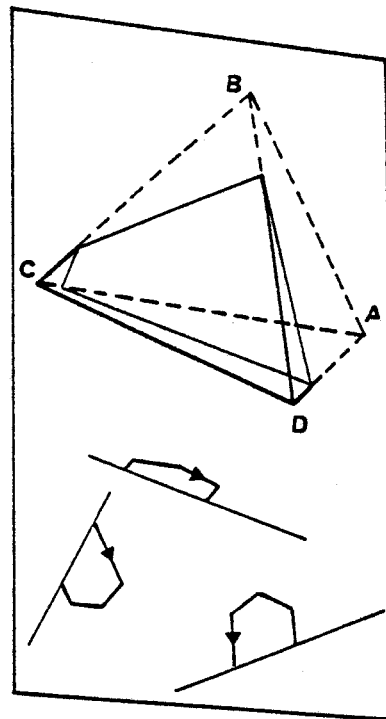
$(\bar{1}\bar{1}1)$  : face III



$(11\bar{1})$  : face IV



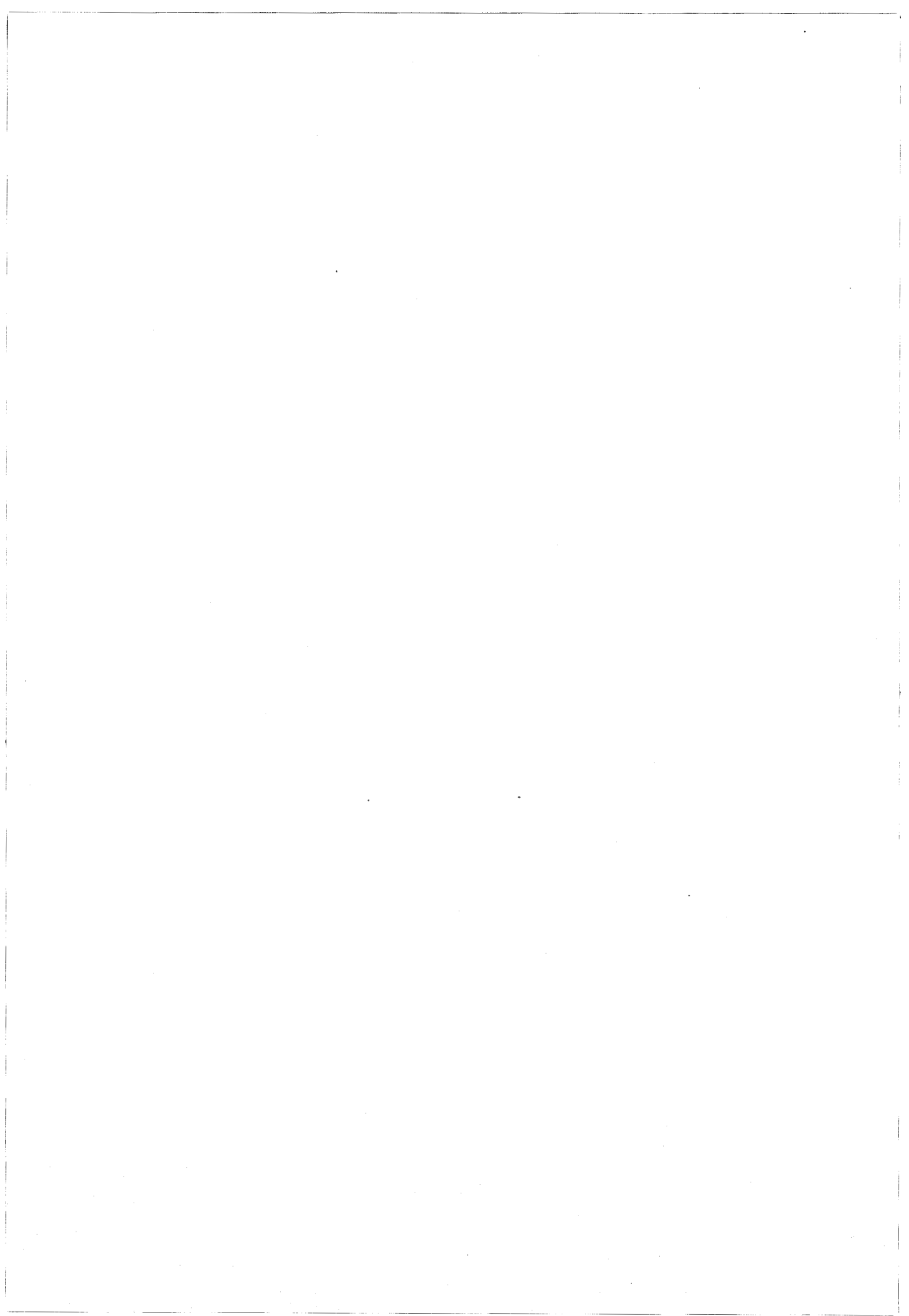
$(\bar{5}1\bar{4})$  : face I



$(5\bar{1}4)$  : face II



Figure I-10 : Orientation des plans de glissement et des demi-boucles de dislocations dans les éprouvettes de compression.



BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE I

- [1] SHOCKLEY W.  
Phys. Rev. 91 (1953) 228.
  
- [2] MARKLUND S.  
J. de Phys. Suppl. C4 (1983) 25.
  
- [3] HORNSTRA J.  
J. Phys. Solids 5 (1958) 129.
  
- [4] HIRTH J.P., LOTHE J.  
"Theory of dislocations" Mc Graw Hill, New-York 1968.
  
- [5] RAY I.R.L., COCKAYNE D.J.H.  
J. Microsc. 98 (1973) 170.
  
- [6] HAUSSERMANN F., SCHAUMBURG H.  
Phil. Mag. 27 (1973) 745.
  
- [7] GOMEZ A., COCKAINE D.J.H., HIRSCH P.B., VITEK V.  
Phil. Mag. 31 (1975) 105.
  
- [8] GOMEZ A., HIRSCH P.B.  
Phil. Mag. 36 (1977) 169.
  
- [9] BOURRET A., DESSEAUX J., RENAULT A.  
J. Micr. Spectr. Elec. 2 (1977) 467.
  
- [10] ANSTIS G.R., HIRSCH P.B., HUMPHREYS C.J., HUTCHINSON J.L.  
OURMAZD A.  
Inst. Phys. Conf. Series n° 60 (1981) 15.
  
- [11] OLSEN A., SPENCE J.C.H.  
Phil. Mag. A43 (1981) 945.



- [12] BOURRET A., DESSEAUX - THIBAUT J., LAUCON F.  
J. de Phys. Suppl. C4 (1983) 15.
- [13] HAASEN P.  
Acta Met. 5 (1957) 598.
- [14] GAI P.L., HOWIE A.  
Phil. Mag. 30 (1974) 939.
- [15] GOTTSCHALK H., PATZER G., ALEXANDER H.  
Phys. Stat. Sol. (a) 45 (1978) 207.
- [16] GOMEZ A., HIRSCH P.B.  
Phil. Mag. A 38 (1978) 733.
- [17] FEUILLET G.  
M. Sci. Dissert. (1982) Oxford.
- [18] TANAKA M., JOUFFREY B.  
Phil. Mag. A 50 (1984) 733.
- [19] EROFEEVA S.A., OSIP'YAN Yu A.  
Soviet. Phys. Solid. State 16 (1975) 2076.
- [20] SHIMIZU H., SUMINO K.  
Phil. Mag. 32 (1975) 123.
- [21] MIHARA M., NINOMYA T.  
Phys. Stat. Sol. (a) 32 (1975) 43.
- [22] EROFEEVA S.A., OSIP'YAN Yu. A.  
Soviet. Phys. Solid. State 15 (1973) 538.
- [23] CHOI S.K., MIHARA M., NIMOMYA T.  
Japan J. of Appl. Phys. 16 (1977) 737.

- [24] STEINHARDT H., HAASEN P.  
Phys. Stat. Sol. (a) 49 (1978) 93.
  
- [25] ALEXANDER H., HAASEN P.  
Sol. State Physics. 22 (1968) 27.



## CHAPITRE II

### ASYMÉTRIE DE COMPORTEMENT PLASTIQUE



## CHAPITRE II

\*\*\*

### ASYMETRIE DE COMPORTEMENT PLASTIQUE

#### II-1. TECHNIQUES EXPERIMENTALES.

II-1.1. Matériaux utilisés.

II-1.2. Préparation des éprouvettes.

II-1.3. Montage de déformation.

#### II-2. COMPORTEMENT MECANIQUE DES COMPOSES III-V.

II-2.1. Asymétrie de déformation.

II-2.2. Analyse de la géométrie du glissement.

II-2.3. Variation de la limite élastique avec la température.

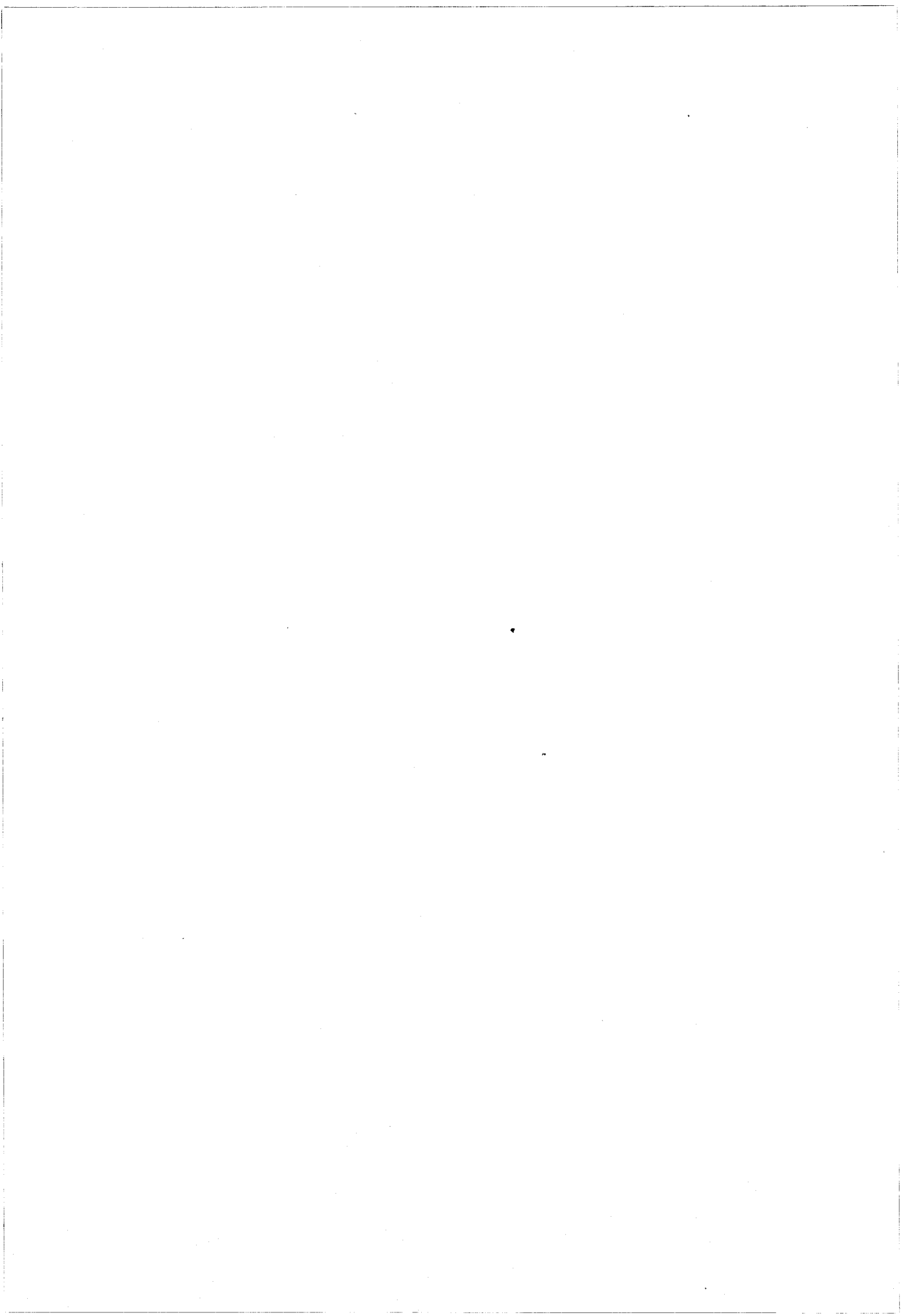
#### II-3. ORIGINE DE L'ASYMETRIE DE COMPORTEMENT PLASTIQUE.

II-3.1. Introduction bibliographique.

II-3.2. Comportement préplastique de l'antimoniure d'indium.

II-3.3. Observations complémentaires en microscopie électronique  
en transmission.

II-3.4. Conclusion.



## II-1. TECHNIQUES EXPERIMENTALES.

### II-1.1. Matériaux utilisés.

Nous avons montré au chapitre précédent pourquoi il est important, si l'on veut exploiter en plasticité macroscopique, les propriétés de développement asymétrique des boucles de dislocation, de disposer de matériaux contenant une densité initiale aussi faible que possible. La densité de dislocations de croissance dans l'antimoniure d'indium monocristallin obtenu par tirage Czochralski est inférieure à  $100 \text{ cm/cm}^3$ . Dans l'arséniure de gallium non dopé et quelle que soit la technique de croissance utilisée, les densités courantes sont de l'ordre de  $10^4$  à  $10^5 \text{ cm/cm}^3$ . Des études expérimentales récentes montrent qu'il est possible de réduire fortement cette densité, soit en diminuant le niveau de contraintes thermiques pendant la croissance, soit en ajoutant au bain liquide des impuretés isoélectroniques en concentration importante (de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) [1,2]. Les monocristaux obtenus dans ces conditions restent cependant rares et nous n'en avons pas utilisé dans notre travail.

Les effets de piégeage et de diffusion des porteurs libres par les dislocations, que le matériau soit de type n ou p, sont d'autant plus importants que le rapport de la densité de dislocations à la densité d'impuretés est plus grand. Pour cette raison et parce que nous n'avions pas pour objectif de faire une étude en fonction du taux de dopage, nous avons uniquement travaillé sur des matériaux peu ou non dopés.

Tous les monocristaux utilisés ont été fournis par la société Mining and Chemical Products (M.C.P.) : leurs caractéristiques sont regroupées dans le tableau ci-après. L'arséniure de gallium est obtenu par croissance horizontale (CH), l'antimoniure d'indium par tirage Czochralski (CZ).





	type	croissance	dopage* (cm <sup>-3</sup> )	mobilité* cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>	EPD (cm <sup>-2</sup> )
InSb	n	CZ	non dopé n $\approx$ 10 <sup>14</sup>	$\approx$ 600.000	< 100
	p	CZ	dopé Ge p $\approx$ 7.10 <sup>15</sup>	$\approx$ 5200	< 100
GaAs	n	CH	non dopé n $\approx$ 10 <sup>16</sup>	$\approx$ 4000	$\approx$ 10 <sup>4</sup>
	p	CH	dopé Zn p $\approx$ 2.10 <sup>16</sup>	$\approx$ 200	$\approx$ 10 <sup>4</sup>

\* Les caractéristiques électriques sont mesurées à 77 K pour InSb et à 300 K pour GaAs.

### II-1.2. Préparation des éprouvettes

La découpe des éprouvettes de déformation à partir des lingots est effectuée à l'aide d'une scie South Bay Technology à fil métallique mono-boucle. Le mouillage du fil, lisse dans le cas de InSb, diamanté dans le cas de GaAs, est assuré par un mélange glycerol-carborundum. Après découpe, les faces des éprouvettes sont polies mécaniquement au carbure de silicium 18  $\mu$ m puis 6  $\mu$ m en veillant à la perpendicularité des faces entre elles. Les échantillons sont ensuite polis chimiquement par immersion dans la solution suivante : 5g d'oxyde de chrome dissout dans 10 g d'eau + 5 ml d'acide fluorhydrique + 5 ml d'acide chlorhydrique ; ils sont rincés dans l'acide chlorhydrique puis dans l'alcool et enfin séchés à l'air libre.

Le polissage chimique ayant tendance à arrondir légèrement les arêtes, un polissage mécanique léger est refait sur les têtes de l'éprouvette de manière à assurer leur parfaite planéité et leur parallélisme rigoureux. Cette dernière opération doit être menée avec le plus grand soin de manière à préserver la qualité des surfaces polies chimiquement ; toute rayure ou

défaut superficiel est en effet une source potentielle de dislocations qui peut modifier le comportement mécanique de l'échantillon.

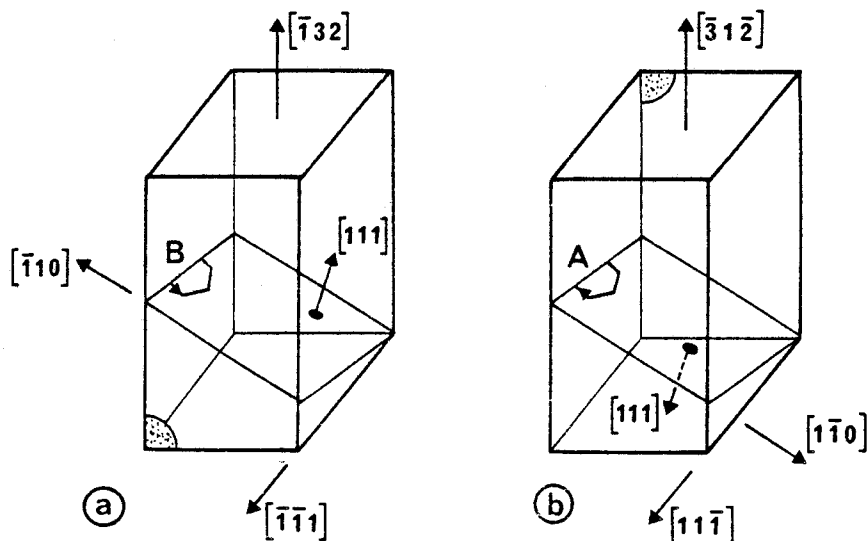


Figure II-1 : Géométrie de deux éprouvettes indiscernables à partir d'un cliché de Laüe mais non équivalentes du point de vue de leur comportement plastique.

Le système de glissement principal est  $(111) \frac{1}{2} [\bar{1}10]$  pour l'éprouvette (a),  $(111) \frac{1}{2} [1\bar{1}0]$  pour l'éprouvette (b).

☐ repère la face sur laquelle apparaissent les piqûres de corrosion (voir texte).

La mise en oeuvre de la déformation nécessite que nous repérons sans ambiguïté quelle est la face latérale de l'éprouvette (I ou II) à partir de laquelle vont se développer, dans le système de glissement principal, les demi-boucles de type A. Un cliché de Laüe, insensible au caractère polaire de la structure cristalline, ne permet pas, à lui seul, de choisir entre deux orientations non équivalentes, telles, par exemple, celles représentées sur la figure II-1. Pour lever cette indétermination, il faut savoir différencier une face  $(11\bar{1})$  d'une face  $(\bar{1}\bar{1}1)$ . Ceci est en principe faisable puisque les faces  $\{111\}$  réagissent de façons différentes à l'action des solvants chimiques. La face  $(11\bar{1})$ , formée d'atomes appartenant à la colonne V du tableau de Mendeleïev possède une forte réactivité ; elle est par suite

plus rapidement attaquée et dissoute que la face (111) opposée formée d'atomes de la colonne III. La face ( $\bar{1}\bar{1}1$ ) qui se polit plus lentement est aussi celle qui se couvre de piqûres de corrosion aux points d'émergence des défauts  $|3|$ . La solution que nous avons utilisée pour le polissage chimique développe effectivement des piqûres de corrosion sur l'une des faces {111} de l'éprouvette à l'inverse de la face opposée qui reste non altérée.

L'orientation de chaque éprouvette est ainsi contrôlée, avant déformation, par un cliché de Laue et un repérage des faces {111}. Des considérations géométriques simples permettent alors de déterminer la nature des demi-boucles émises à partir des faces I ou II dans le système de glissement principal. Les dimensions des éprouvettes sont typiquement de l'ordre de  $(3,5 \times 3,5 \times 13) \text{ mm}^3$  soit un rapport  $\frac{l_0^2}{S} \approx 14$ . Les sources superficielles nécessaires à la déformation sont créées sur une face latérale de l'éprouvette par abrasage de cette face au carborundum juste avant l'essai.

### II-1.3. Le montage de déformation

Les essais ont été réalisés en compression sur une machine Instron conventionnelle à une vitesse imposée de l'ordre de  $3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ , ce qui correspond à une vitesse de déplacement de la traverse mobile égale à  $10 \mu\text{m}$  par minute. Le porte échantillon est un montage inversé où le plateau inférieur est relié à la cellule dynamométrique et le plateau supérieur est solidaire de la traverse mobile. L'utilisation du montage inversé permet à l'éprouvette de se déformer librement et d'atteindre la forme en S caractéristique d'un glissement simple ; il présente toutefois des inconvénients par suite de son instabilité (couple parasite) dès que le S devient très prononcé empêchant ainsi d'atteindre des déformations importantes.

Les éprouvettes ont été déformées à différentes températures (de  $200^\circ\text{C}$  à  $350^\circ\text{C}$  pour InSb, de  $350^\circ\text{C}$  à  $500^\circ\text{C}$  pour GaAs). Le chauffage à l'air libre est assuré par un four Adame1 chemisant l'ensemble du montage. La température est mesurée au voisinage immédiat de l'échantillon par un thermocouple chromel-alumel en contact thermique avec le montage.

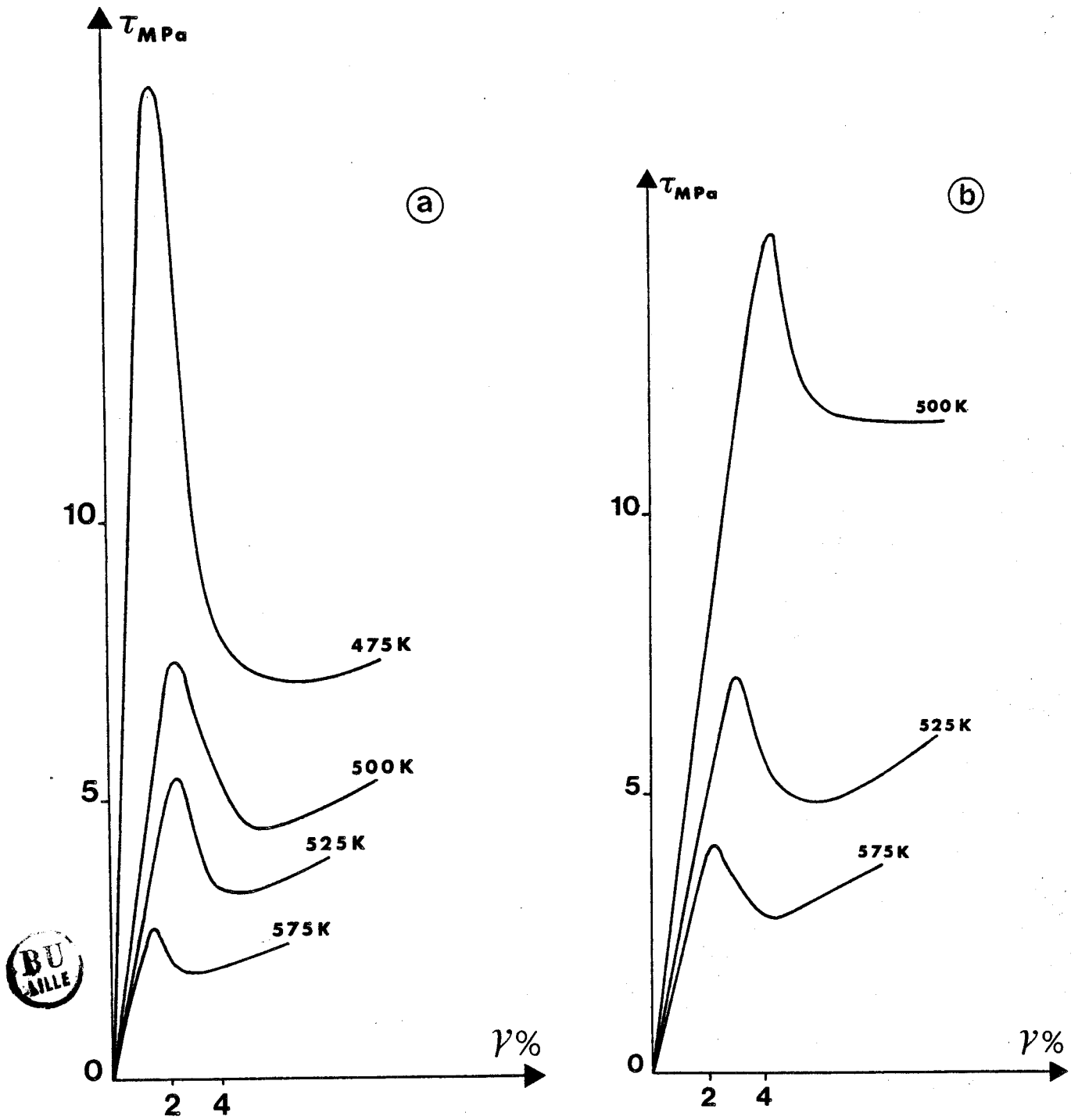


Figure II-2 : Courbes contrainte-déformation de l'antimoniure d'indium

a) comportement plastique "mou"

b) comportement plastique "dur".

Pendant la mise en chauffe et tant que l'équilibre thermique n'est pas atteint, les dilatations différentielles du montage et de l'échantillon provoquent des variations de la force appliquée. Celle-ci est maintenue à une valeur constante très en deça de la limite élastique par un mouvement de rattrapage de la traverse, contrôlé automatiquement.

## II-2. COMPORTEMENT MECANIQUE DES COMPOSES III-V.

Les résultats expérimentaux que nous présentons et discutons dans ce paragraphe correspondent à des essais directs, sans prédéformation, limités à des déformations résolues de l'ordre de 15 %. Les courbes obtenues pour l'antimoniure d'indium et pour l'arseniure de gallium présentent la même allure caractéristique que celles des semiconducteurs covalents à faible densité de dislocations initiales : pic de contrainte suivi d'un stade de faible taux de durcissement. L'amplitude du pic est, comme nous l'avons déjà précisé au chapitre précédent considérablement réduite par écrouissage des surfaces, ce qui permet de déformer sans rupture à des températures relativement basses.

### II-2.1. Asymétrie de déformation

La figure II-2 présente les courbes contrainte - déformation obtenues pour des couples d'éprouvettes d'antimoniure d'indium géométriquement identiques (orientation - celle de la figure I-9 - dimensions) déformées dans les mêmes conditions (température, vitesse de déplacement de la traverse), l'une étant abrasée sur la face II (figure II-2 a), la seconde sur la face I (figure II-2 b). Elle met clairement en évidence un comportement asymétrique en déformation selon la face abrasée.

Les courbes obtenues diffèrent à la fois dans les taux de contrainte atteints au maximum et au minimum du pic de contrainte et dans les pentes de durcissement. Dans la suite de l'exposé, nous désignerons par "cas dur" et "cas mou" ces deux types de comportement pour rendre compte de la différence des niveaux de contrainte nécessaires, dans chacun des cas, à l'obtention d'une déformation donnée [4] .

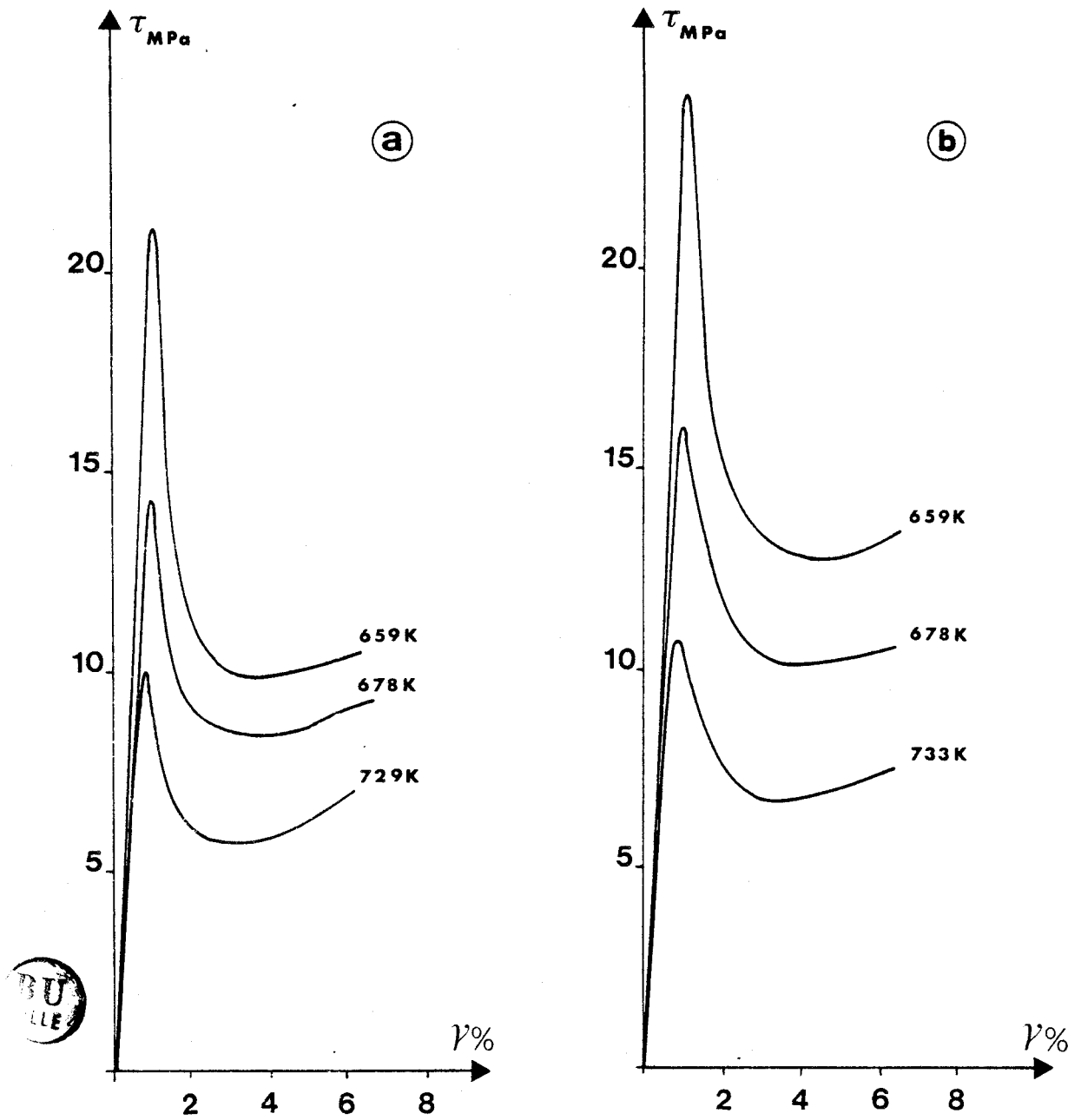


Figure II-3 : Courbes contrainte-déformation de l'arséniure de gallium

a) comportement plastique "mou"

b) comportement plastique "dur".

L'asymétrie de comportement plastique, observée d'abord dans l'antimoniure d'indium, est également caractéristique de l'arséniure de gallium (figure II-3) ; il faut cependant noter :

- que l'amplitude du crochet est généralement moins grande dans GaAs que dans InSb, relativement à la valeur de la contrainte au minimum du crochet.
- que le décalage des niveaux de contrainte atteints dans les cas "dur" et "mou" est moins important dans GaAs que dans InSb.

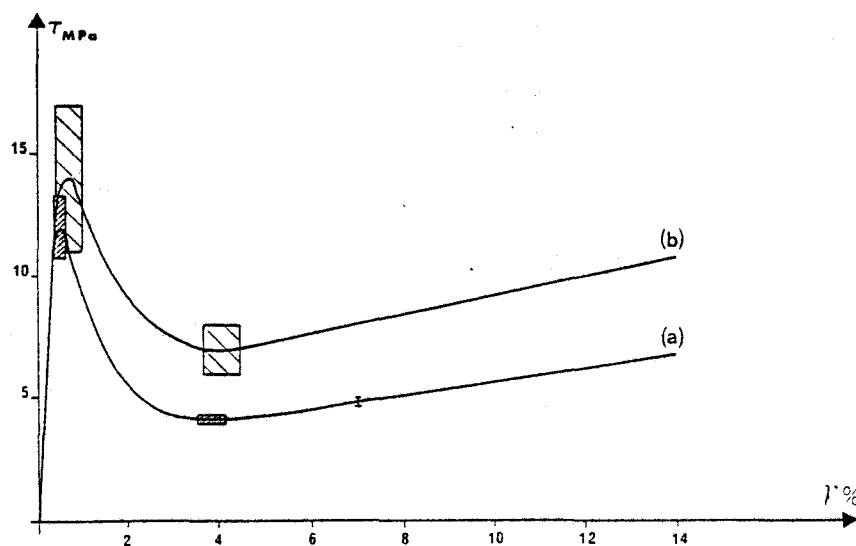


Figure II-4 : Dispersion des valeurs de contrainte mesurées au cours d'un essai de déformation (InSb). (a) cas "mou" (b) cas "dur"

Un grand nombre d'essais effectués à température et vitesse de déformation données, sur des éprouvettes abrasées, soit sur la face I, soit sur la face II, a permis d'apprécier la reproductibilité des courbes obtenues dans les mêmes conditions avec des éprouvettes différentes. De tels essais, résumés sur la figure II-4 [5] appellent plusieurs remarques :

- Les valeurs de contrainte mesurées au maximum du crochet ( $\tau_{u.y.}$ ) sont relativement dispersées aussi bien dans le cas "dur" que dans le cas "mou" ; la dispersion est toutefois plus importante dans le cas "dur".

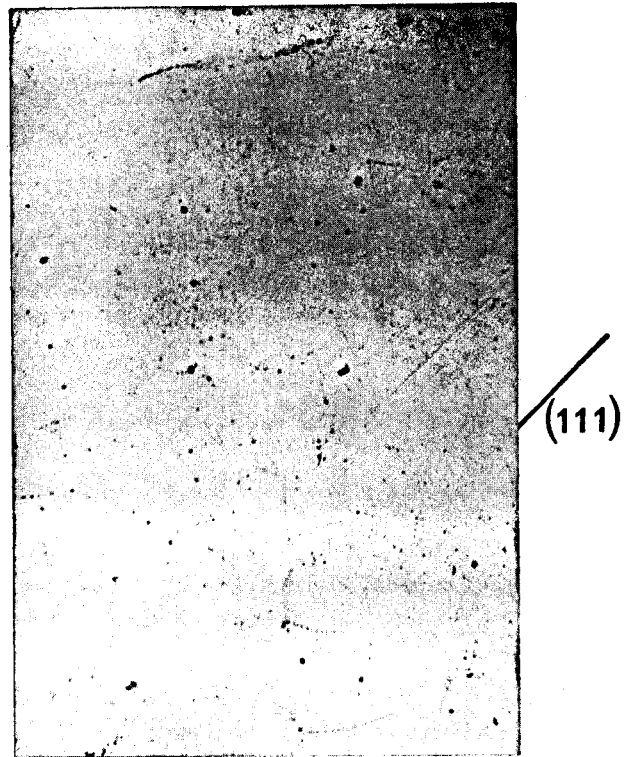
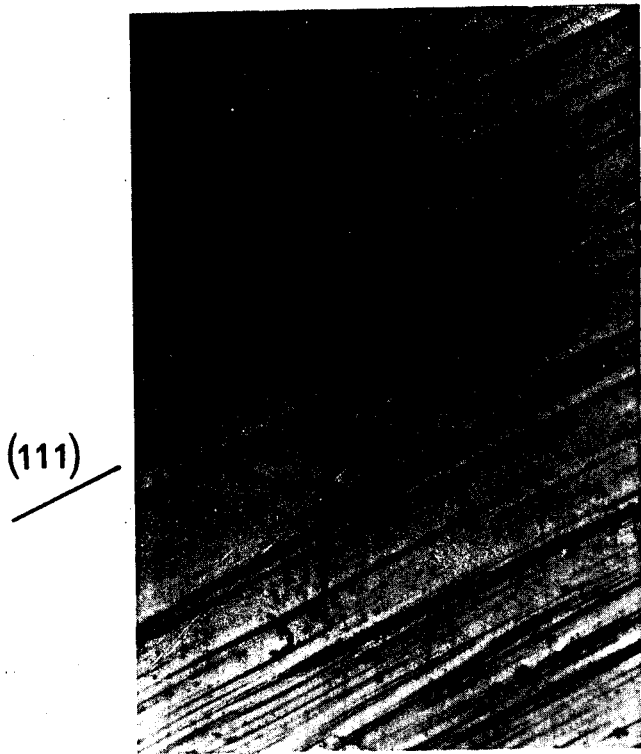
- La contrainte au minimum du crochet ( $\tau_{l.y.}$ ) et dans le stade ultérieur de déformation varie peu d'un essai à l'autre dans le cas "mou" alors que dans le cas "dur", les contraintes mesurées restent très dispersées tout le long de l'essai.



Face I (x50)

CAS "MOU"

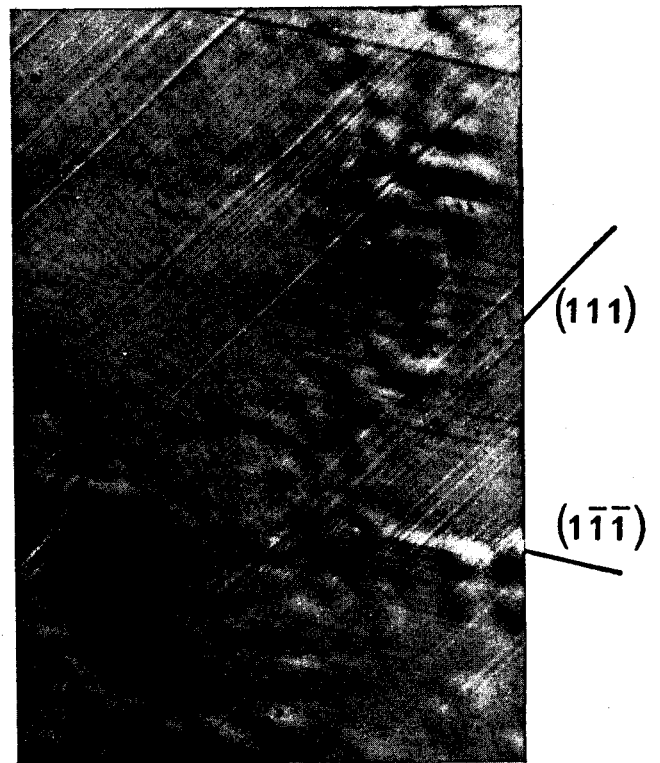
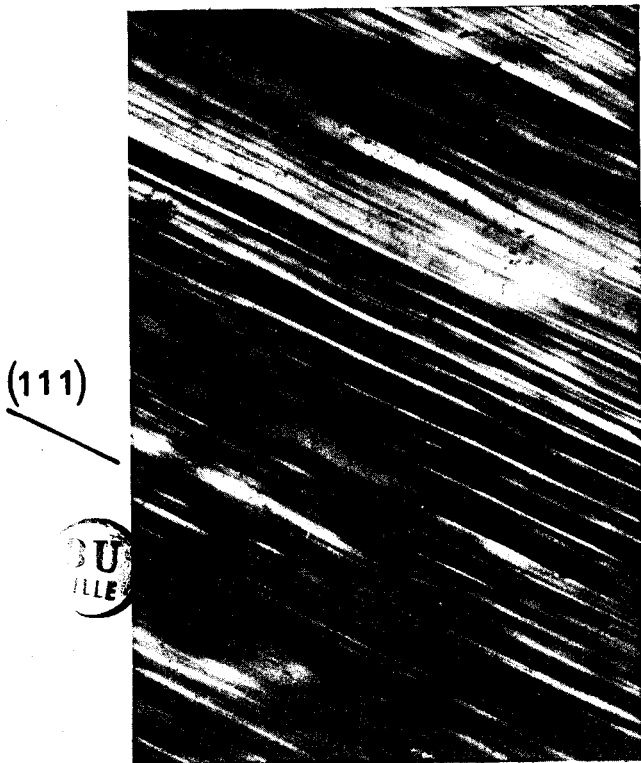
Face IV (x50)



Face II (x50)

CAS "DUR"

Face IV (x50)



Figures II-5 et II-6 : Traces de glissement observées sur des éprouvettes déformées au niveau de contrainte minimale.

Si la distribution des valeurs de contrainte au maximum du crochet est très probablement à rattacher à la difficulté de préparer des éprouvettes d'états de surface identiques, le caractère peu reproductible d'un essai dans le cas "dur" laisse supposer une déformation plus hétérogène sinon plus complexe.

## II-2.2. Analyse de la géométrie du glissement

L'examen au microscope optique des lignes de glissement après déformation reflète, dans GaAs et dans InSb, l'asymétrie du comportement plastique. A faibles déformations, et notamment dans toute l'étendue du crochet, il apparaît clairement que des structures de glissement différentes se sont développées sous contrainte suivant que les éprouvettes ont été abrasées sur la face I ou sur la face II. A plus fortes déformations, les sous-structures de dislocations établies sont déjà très complexes et il n'apparaît pas de différences significatives entre les faciès de glissement observés en surface dans les cas "dur" et "mou".

La figure II-5 montre un exemple caractéristique des structures observées à faibles déformations dans un cas "mou". Sur la face  $\{541\}$ , les traces de glissement sont fines, rectilignes, uniformément réparties sur la surface de l'échantillon et correspondent au plan  $(111)$  attendu. L'absence de lignes sur la face  $(1\bar{1}\bar{1})$  permet de conclure à un glissement dans une direction parallèle à cette face et confirme la prépondérance du système primaire  $\frac{1}{2} [\bar{1}10]$   $(111)$  de facteur de Schmid égal à 0,47.

Dans le cas dur, deux ensembles de traces correspondant respectivement aux plans  $(111)$  et  $(1\bar{1}\bar{1})$  apparaissent dès le début de la déformation sur la face  $(11\bar{1})$  (figure II-6). La présence de ces traces suggère une activité importante des systèmes de glissement secondaires  $\frac{1}{2} [\bar{1}01]$   $(111)$  et  $\frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}0]$   $(1\bar{1}\bar{1})$  de facteurs de Schmid égaux à 0,36 mais ne permet pas de conclure à l'activité du système primaire puisque les traces visibles sur la face  $\{541\}$  sont caractéristiques, à la fois du système primaire  $\frac{1}{2} [\bar{1}10]$   $(111)$  et du système secondaire  $\frac{1}{2} [\bar{1}01]$   $(111)$ . Enfin, la répartition hétérogène des traces observées dans le cas dur reflète apparemment un glissement macroscopique plus difficile à initier que dans le cas mou.

Ces observations rendent dès maintenant caduque l'hypothèse selon laquelle la déformation aurait lieu en glissement simple principal dans tous les cas. Dans ces conditions, l'asymétrie de comportement plastique observées n'est pas d'ue uniquement à la nature différente, selon la face abrasée, des segments de dislocations à  $60^\circ$  le long des demi-boucles émises à partir des sources de surface.

### II-2.3. Variation de la limite élastique avec la température

Les figures II-2 et II-3 où sont représentées les courbes contrainte - déformation obtenues à différentes températures pour des échantillons abrasés soit sur la face I, soit sur la face II, illustrent le caractère thermiquement activé du glissement des dislocations. L'amplitude du crochet, ainsi que les niveaux des contraintes critiques  $\tau_{u.y.}$  au sommet du crochet et  $\tau_{l.y.}$  au pied du crochet, diminuent fortement quand la température de l'essai augmente. Corrélativement à ces variations, le taux de déformation atteint au minimum du crochet est d'autant plus petit que la température est plus élevée alors que les pentes de durcissement n'évoluent pratiquement pas.

Il est important de remarquer ici que l'asymétrie de comportement plastique observée n'est pas subordonnée à un choix particulier de la température de déformation ; elle apparaît, au contraire, être un caractère permanent de la plasticité des composés III-V, tout au moins dans les limites du domaine de température exploré.

La définition, à partir des courbes contrainte - déformation, du seuil de plasticité, ou limite élastique macroscopique, est particulièrement délicate dans le cas où la courbe présente un crochet de contrainte suivi d'un stade de durcissement. La contrainte à la limite élastique ne peut pas, dans ces conditions, être identifiée comme il est habituel de le faire, à la contrainte  $\tau_{l.y.}$  au pied du crochet puisque le minimum résulte d'un compromis entre la multiplication des dislocations et l'écrouissage dû aux interactions entre dislocations. Nous montrerons au chapitre suivant, en développant le formalisme de l'activation thermique du glissement, comment la limite élastique peut se déduire simplement de la mesure, au pied du crochet, de la contrainte appliquée et du volume de relaxation.

L'évolution de la contrainte  $\tau_{l.y.}$  avec la température est illustrée sur la figure II-7 pour InSb et pour GaAs. Sont également reportés sur cette figure, en plus des résultats de nos essais, les points expérimentaux obtenus par Karmouda lors d'une étude complémentaire à la nôtre étendue au domaine des très basses températures [6].

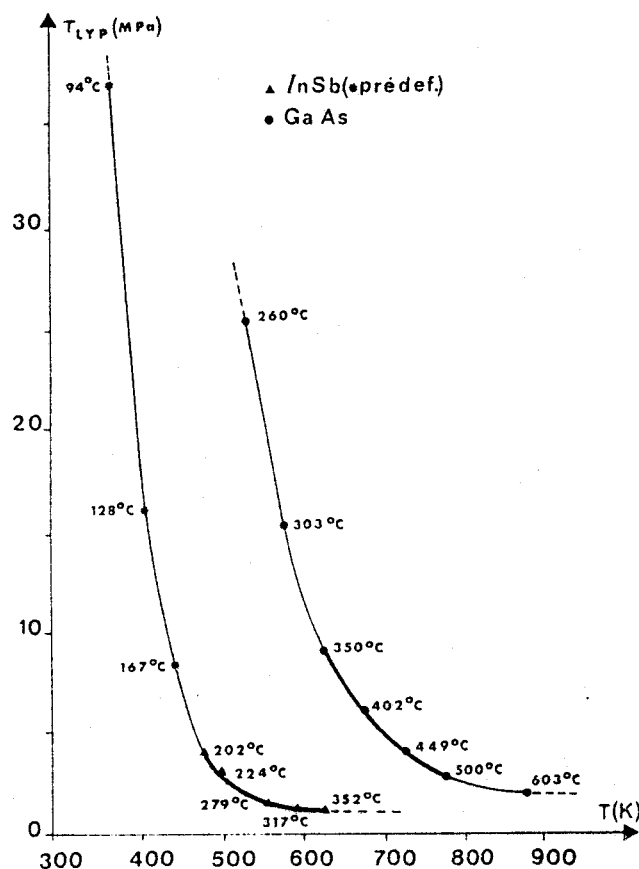


Figure II-7 : InSb et GaAs. Evolution de la contrainte minimale avec la température [6]. Cas mou.

Dans InSb déformé en mode mou, les valeurs de  $\tau_{l.y.}$  s'étagent d'environ 2 MPa pour  $T/T_f = 0,78$  à 35 MPa pour  $T/T_f = 0,46$ . Si la variation est relativement moins marquée dans GaAs, il n'en reste pas moins vrai qu'il existe dans les composés III-V un domaine de température où le glissement est très fortement activé. On notera les valeurs particulièrement basses des contraintes minimales, de l'ordre de 1 à 2 MPa au seuil du palier athermique, qui traduisent un comportement complètement ductile au delà de 300°C dans InSb ( $T \geq 0,7 T_f$ ) et 600°C dans GaAs ( $T \geq 0,6 T_f$ ).

Nous n'avons pas jugé nécessaire d'étudier la variation en fonction de la température de la contrainte  $\tau_{u.y.}$  au sommet du crochet. Etant donné la grande sensibilité de cette grandeur à l'état de surface des éprouvettes, il semble illusoire de donner à sa valeur un sens physique précis.

### II-3. ORIGINE DE L'ASYMETRIE DU COMPORTEMENT PLASTIQUE

#### II-3.1. Introduction bibliographique

Outre des études de plasticité conventionnelles montrant une grande identité de comportement plastique des composés III-V et des semiconducteurs élémentaires, [7-11], des modes de déformation spécifiques ont été proposés afin d'exploiter l'absence de centre de symétrie de la structure zinc-blende.

La flexion alternée d'éprouvettes convenablement orientées fut présentée dès 1958 comme une méthode simple pour introduire sélectivement des dislocations A ou B [12]. L'asymétrie de comportement plastique observée pour les deux sens de la flexion a été interprétée comme une conséquence de la très grande différence de vitesse de chacun des types de dislocations dans le plan de glissement primaire. Les propriétés électriques des échantillons déformés ont ainsi été discutées en termes de dislocations A et B alors que les sous-structures correspondantes n'étaient pas observées de façon directe. La détermination du type et de la densité des dislocations introduites par la déformation plastique était essentiellement liée à l'interprétation des figures d'attaque obtenues le plus souvent sur les faces polaires (111) et ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) [13-15]. Le choix de la face observée et celui de l'agent chimique capable de révéler les émergences des dislocations conditionnaient la validité de la méthode.

De l'analyse des principaux résultats publiés, il ressort que les densités totales de dislocations introduites par flexion sont de l'ordre de  $10^6 - 10^7 \text{ cm}^{-2}$ . Bell, Latkowski et Willoughby évaluent à environ 3 le rapport des densités de dislocations A et B.

Ces résultats appellent plusieurs remarques :

- les densités obtenues en flexion sont trop faibles pour que leur influence sur les propriétés électriques soit sensible, en particulier pour GaAs. Pour accroître la densité de dislocations, il est nécessaire de réduire très fortement le rayon de courbure des échantillons fléchis. Cette technique, utilisée par Gwinner et Labusch doit cependant conduire à une sous-structure très hétérogène et par là même inexploitable [16].

- même en se limitant à des rayons de courbure grands, l'arrangement des dislocations en sous-joints de flexion peut conduire à des effets électriques différents de ceux qui correspondraient à une densité équivalente de dislocations uniformément réparties.

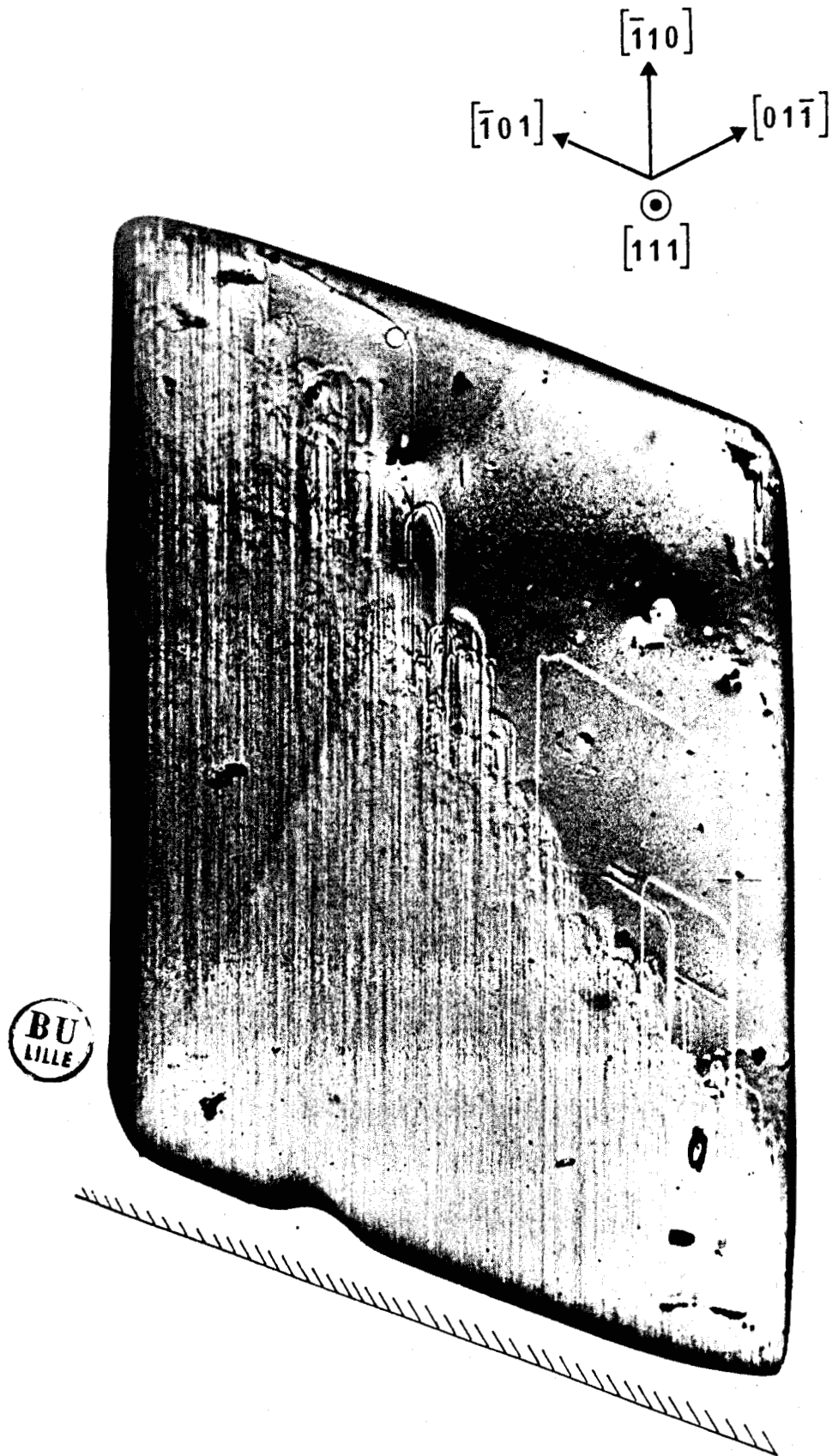
- les températures élevées auxquelles ont été faites une grande part des déformations en flexion ne sont pas favorables à l'établissement d'une sous-structure simple constituée majoritairement de dislocations rectilignes A ou B [9].

Plusieurs études très complètes de la plasticité de l'antimoniure d'indium ont contribué à réexaminer les hypothèses qui fondaient l'intérêt de la flexion alternée. Peissker, Haasen et Alexander [17] montrent que la vitesse de fluage stationnaire pour une flexion In est 1,5 fois supérieure à ce qu'elle est pour une flexion Sb. Ils attribuent cette différence à la différence de vitesse des dislocations A et B dans le plan de glissement primaire. Toutefois, l'énergie d'activation du glissement, déterminée à partir d'une équation phénoménologique de la déformation de la forme :

$$\dot{\epsilon} = A \sigma^n \exp - \frac{U}{kT}$$

est indépendante du sens de la flexion.

Pour des échantillons déformés en flexion dynamique, Shimizu et Sumino [18] partent d'une loi de variation identique pour décrire l'évolution de la contrainte au pied du crochet. Ils concluent eux aussi à une identité des paramètres  $n$  et  $U$  pour les deux sens de la flexion alors que les contraintes sont systématiquement plus élevées pour la flexion Sb que pour la



*Figure II-8 : Topographie aux rayons X en transmission (méthode de Lang). Lamelle plan de glissement. Echantillon "mou". Cas de InSb. D'après Kesteloot | 7 | .*

flexion In. Shimizu et Sumino interprètent leurs résultats en supposant une activité différente des systèmes de glissement secondaires pour les deux sens de la flexion.

Steinhardt et Haasen analysent le fluage en flexion de l'arséniure de gallium en utilisant les arguments développés par Shimizu et Sumino. Ils concluent que dans le cas où la vitesse des dislocations A est très supérieure à celle des dislocations B, la flexion qui devrait permettre d'introduire majoritairement des dislocations B est en fait réalisée par le mouvement de dislocations A et vis, sans contribution notable du mouvement des dislocations B [19].

En exploitant, en compression dynamique cette fois, l'absence de centre de symétrie de la structure cristalline, nous avons retrouvé l'asymétrie de comportement plastique observée antérieurement en flexion [17, 18, 20]. Pour en comprendre l'origine, nous nous sommes appuyés sur des observations complémentaires faites au laboratoire en topographie aux rayons X (Di Persio, Kesteloot) et en microscopie électronique (A. Lefebvre).

### II-3.2. Comportement préplastique de l'antimoniure d'indium

La topographie aux rayons X en transmission (méthode de Lang) ne permet de résoudre des images individuelles de dislocations dans les solides cristallins que si leur densité n'excède pas  $10^4$  à  $10^5$  cm/cm<sup>3</sup>. De ce fait, les sous-structures laissées par la déformation n'ont pas pu être observées dans l'arséniure de gallium puisque la densité de dislocations de croissance est voisine de  $10^4$  cm/cm<sup>3</sup>. Dans l'antimoniure d'indium, l'évolution de la sous-structure avec le taux de déformation a été suivie dans le domaine préplastique (montée élastique et crochet de compression) pour des éprouvettes correspondant au cas dur et mou. Nous renvoyons le lecteur à la thèse de Kesteloot pour le détail des résultats dont nous ne rappelons ici que l'essentiel [5, 21].

Dans la montée du crochet de compression, le cas mou correspond à une structure assez simple constituée majoritairement de demi-boucles étroites à front A(s) très mobile se développant, à partir de la face abrasée, dans le système de glissement le mieux sollicité (figure II-8). La densité de dislocations mobiles est insuffisante pour accommoder la déformation à vitesse



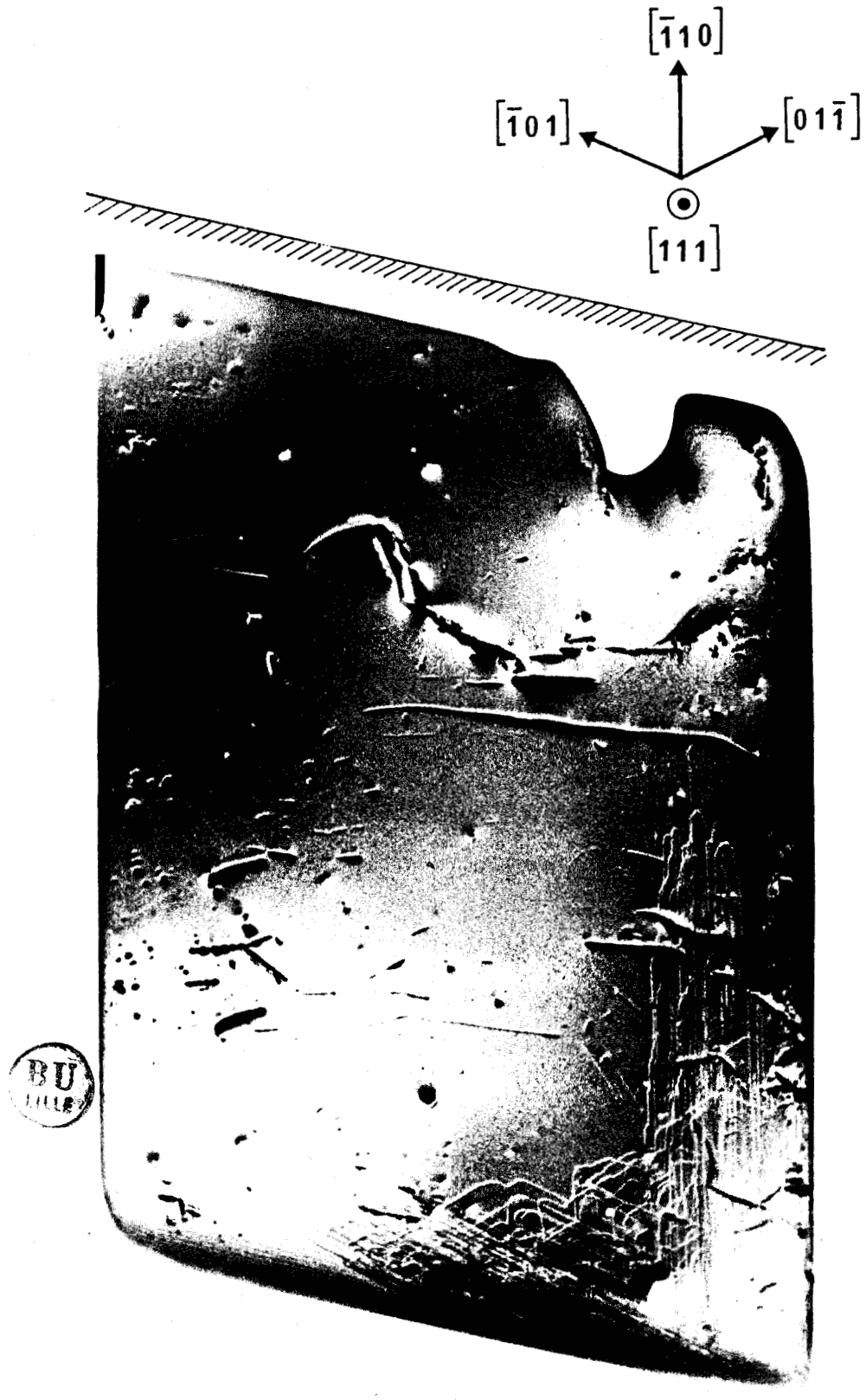
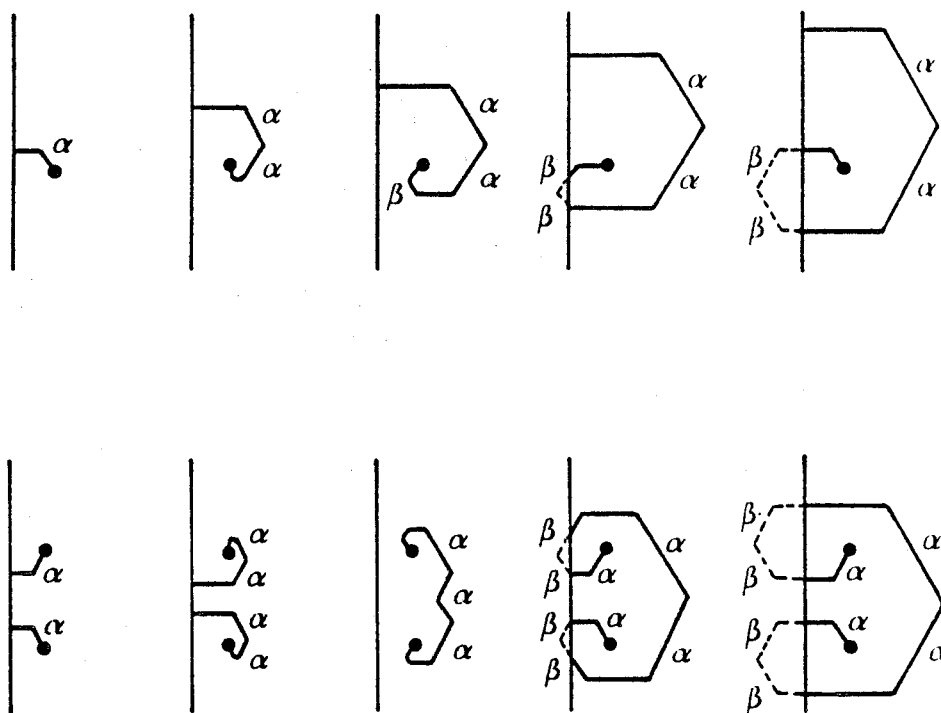


Figure II-9 : Topographie aux rayons X en transmission (méthode de Lang). Lamelle plan de glissement. Echantillon "dur". Cas de InSb. D'après Kesteloot | 7 |.

imposée et la contrainte augmente. Au maximum du crochet, les topographies montrent que le niveau de contrainte est suffisant pour activer les systèmes de glissement secondaires. Le nombre important de sources de surface permet cependant une multiplication rapide des dislocations, la contrainte diminue fortement pour redevenir, avant le minimum du crochet, inférieure au seuil d'activation des systèmes secondaires. Le stade de durcissement linéaire observé à taux de déformation plus élevé correspond aux interactions entre le système de glissement primaire et les systèmes de glissement sécants, peu denses, qui ont été activés pendant le développement du crochet.

Dans le cas dur, les sources créées par abrasion de la surface ne fonctionnent pas, les demi-boucles de type B - constituées de parties vis et  $60^\circ$  B(s) - ne se développent pas sous l'effet de la contrainte, la déformation se fait par émission, à partir de défauts résiduels sur les faces polies chimiquement de demi-boucles de type A. Le faible nombre des sources parasites actives et leur caractère aléatoire conduisent, dès le début de la déformation plastique à une activation simultanée de plusieurs systèmes de glissement. Il en résulte très rapidement un durcissement important et une sous-structure de dislocations très complexe, hétérogène, très variable d'une éprouvette à l'autre (figure II-9).

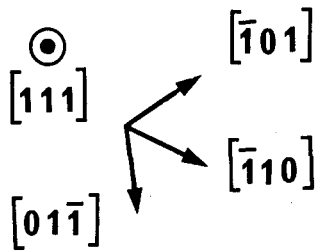
Il ressort de cette étude qu'il n'y a pas de différence fondamentale entre le cas dur et le cas mou en ce qui concerne le mécanisme élémentaire qui gouverne la plasticité de InSb dans le domaine préplastique. Dans tous les cas, la déformation se fait par développement, à partir de sources de surface, de demi-boucles de type A. L'asymétrie observée reflète uniquement la différence de densité des sources superficielles susceptibles de fonctionner. L'absence de sources internes efficaces dans le processus de multiplication des dislocations est due à la très faible mobilité des dislocations  $60^\circ$  B(s) ainsi que nous l'illustrons par un schéma de fonctionnement d'une source de Frank-Read (figure II-10). Dans le cas d'une source interne, les contraintes en retour exercées par les parties  $60^\circ$  B(s), peu mobiles, vont très vite en limiter le fonctionnement. Si la source est au voisinage immédiat de la surface, et à condition que la contrainte appliquée favorise le développement des parties  $60^\circ$  A(s) vers l'intérieur du cristal, les parties B(s) restant virtuelles n'empêchent pas la source de fonctionner.



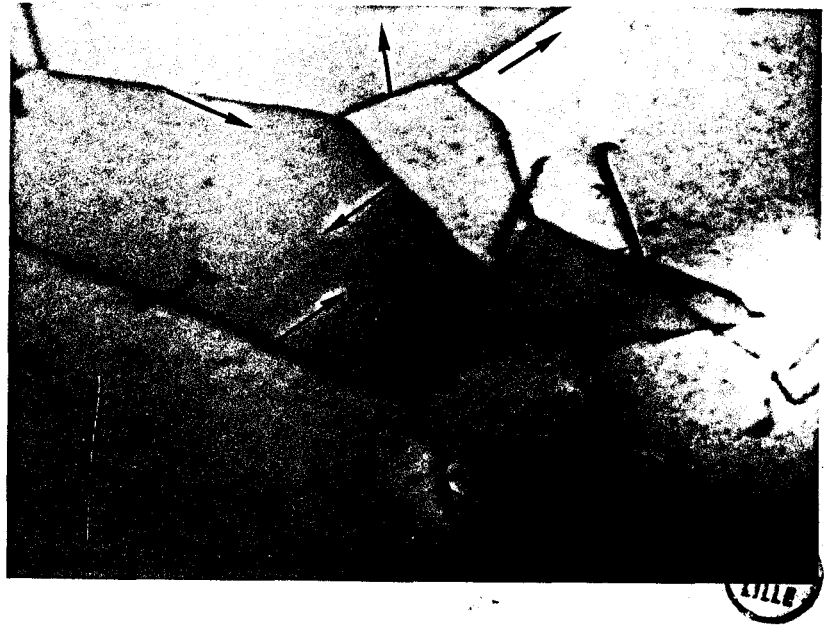
*Figure II-10 : Mécanisme de multiplication des boucles de dislocations à partir d'une source située au voisinage de la surface.*

### II-3.3. Observations complémentaires en microscopie électronique en transmission.

L'observation en microscopie électronique en transmission des sous-structures laissées par la déformation plastique confirme certains aspects de l'interprétation que nous avons donnée de l'asymétrie du comportement plastique [22]. Les micrographies de lames parallèles au plan de glissement primaire (111) dans InSb dur montrent souvent des configurations formées de dislocations de différents vecteurs de Burgers, caractéristiques d'une activité simultanée de plusieurs systèmes de glissement (Figure II-11). Dans le cas mou à  $T = 225^{\circ}\text{C}$  et au minimum du crochet, la distribution des dislocations est constituée d'un enchevêtrement de dipôles, multipôles et boucles coin dont le vecteur de Burgers est celui du système de glissement primaire : nous retrouvons le glissement simplex du cas mou et le glissement multiplex du cas dur observés par topographie aux rayons X.



5  $\mu\text{m}$

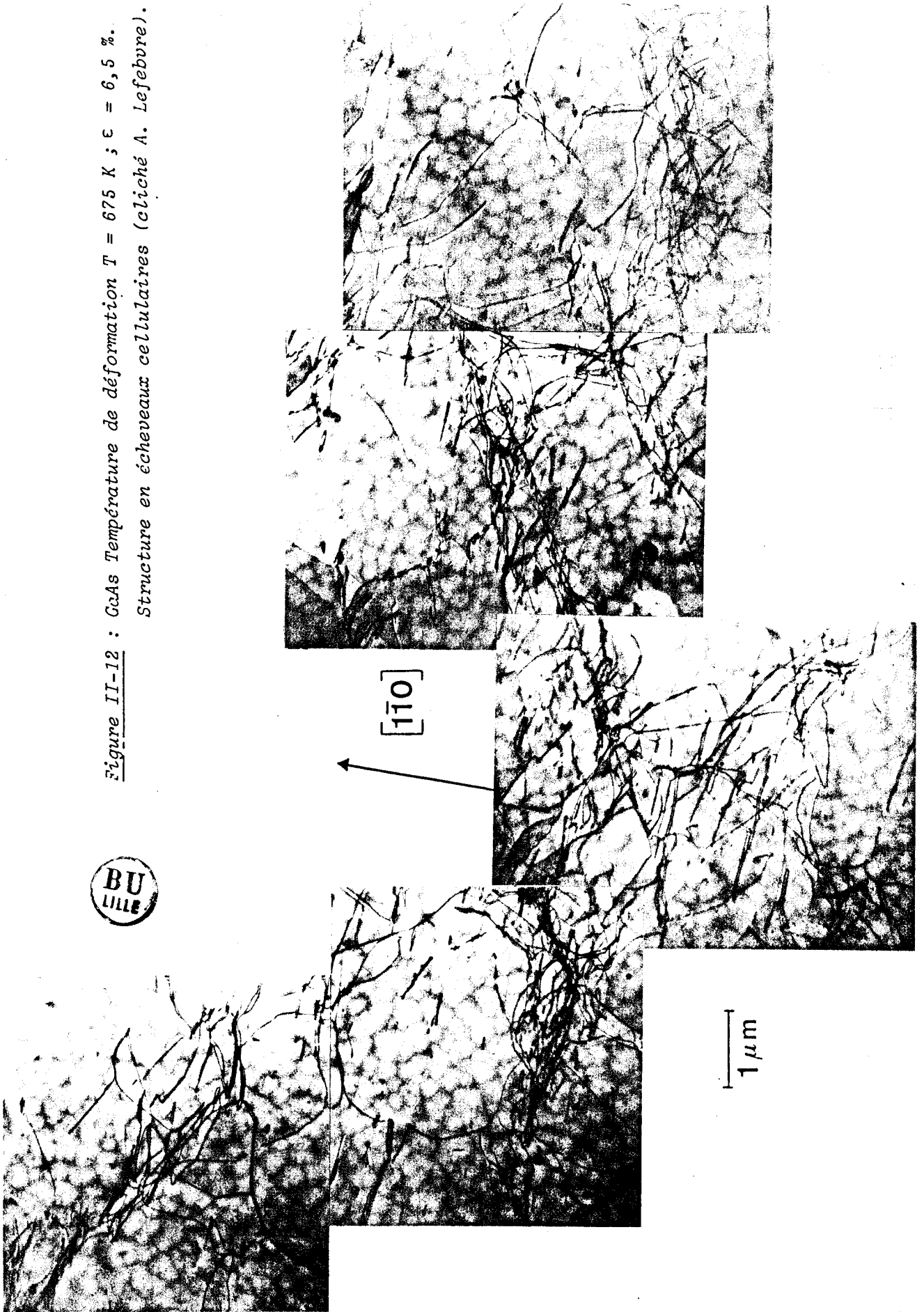


*Figure II-11 : InSb. Température de déformation  $T = 500 \text{ K}$  ;  $\epsilon = 6 \%$ .  
Existence simultanée de plusieurs vecteurs de Burgers  
(cliché A. Lefebvre).*

Nous avons déjà indiqué pourquoi l'étude en topographie aux rayons X du comportement préplastique des dislocations n'avait pas été faite dans l'arséniure de gallium. En l'absence d'observations directes du développement des boucles de dislocations au tout début de la déformation, il est difficile de généraliser les résultats obtenus pour InSb. Cependant, l'identité de comportement plastique macroscopique entre InSb et GaAs et l'analyse des données bibliographiques sur les mobilités des dislocations individuelles suggère l'unicité du mécanisme élémentaire de plasticité dans les deux composés.

Il existe cependant des différences entre l'arséniure de gallium et l'antimoniure d'indium ; la différence dur - mou est peu marquée dans GaAs et les micrographies électroniques ne montrent pas, comme dans InSb, de sous-structures complexes où plusieurs vecteurs de Burgers sont simultanément présents. Ces différences ne remettent pas en cause les hypothèses faites et traduisent plus probablement l'influence de la densité initiale de dislocations de croissance (Figure II-12).

Figure II-12 : GcAs Température de déformation  $T = 675 \text{ K}$  ;  $\epsilon = 6,5 \%$ .  
Structure en écheveaux cellulaires (cliché A. Lefebvre).



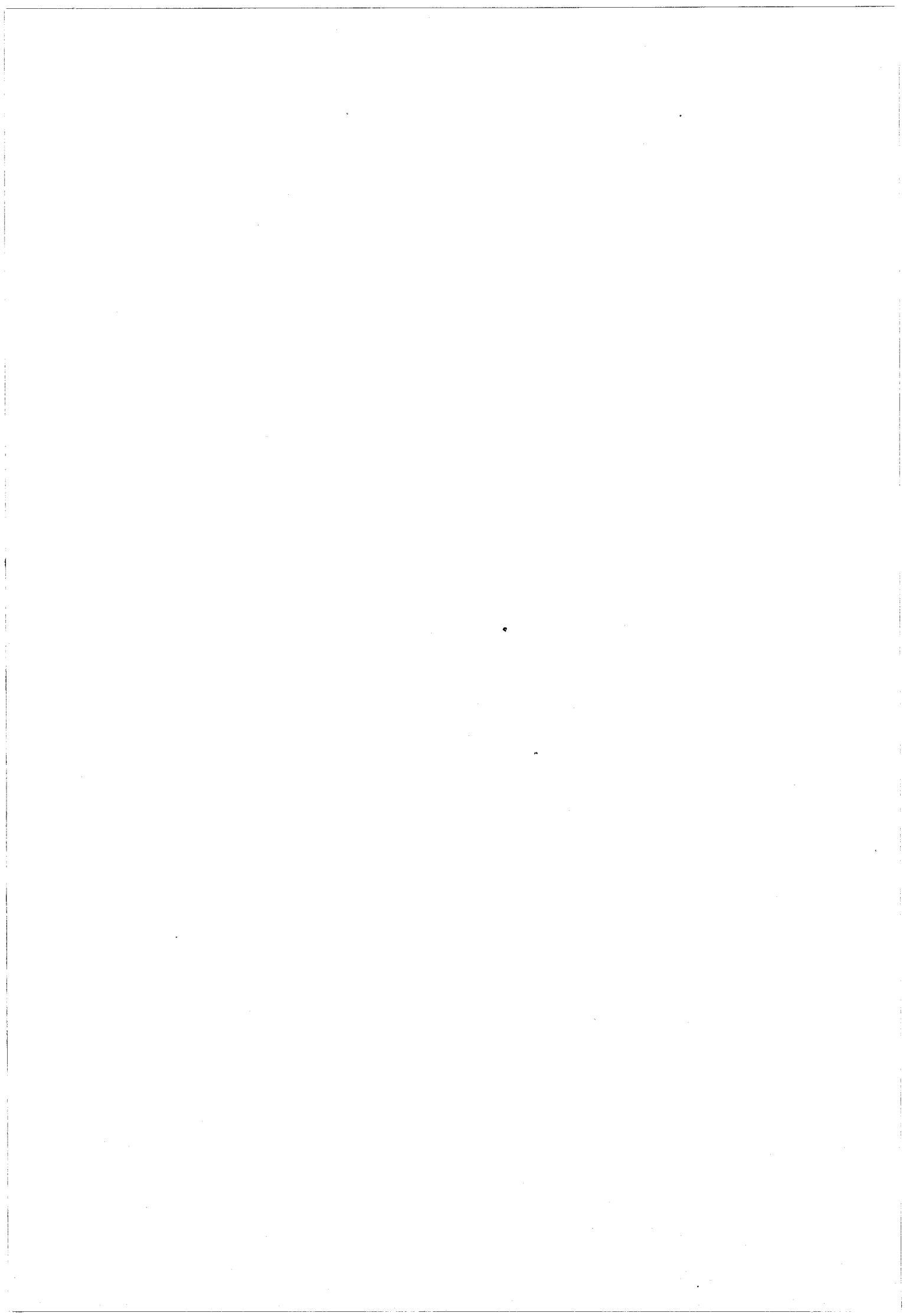
### II-3.4. Conclusion

L'intérêt de l'étude de la plasticité des composés III-V est lié à l'absence de centre de symétrie de la structure cristallographique. Il s'en suit une asymétrie d'expansion des boucles de dislocations qui se répercute directement sur le comportement plastique macroscopique ainsi que sur les sous-structures de dislocations laissées dans les éprouvettes après déformation.

Les différences de comportement plastique entre InSb et GaAs, particulièrement en ce qui concerne le cas dur, sont à relier aux densités initiales de dislocations dans les deux matériaux. Dans GaAs, la densité initiale de dislocations est relativement élevée. Si, par un mécanisme identique à celui observé par George dans InP, des boucles de dislocations se développent sous contrainte aux points d'émergence des dislocations de croissance alors, même dans le cas dur, la densité de dislocations mobiles devient très vite suffisante pour limiter le crochet de compression à une contrainte trop faible pour activer les systèmes secondaires.

Dans InSb, la très faible densité de dislocations de croissance, donc de sources efficaces dans le cas dur, ne permet pas un accroissement de la densité de dislocations mobiles dans le stade préplastique suffisant pour accommoder la vitesse de déformation imposée par l'essai. Ceci conduit à l'apparition d'un crochet de compression très élevé et dont la contrainte est suffisante pour activer simultanément plusieurs systèmes de glissement.

L'étude expérimentale des propriétés galvanomagnétiques des échantillons déformés, que nous présentons dans la seconde partie de ce mémoire, a porté sur des échantillons déformés en mode mou pour lesquels les sous structures de dislocations restent relativement simples et font apparaître un caractère coin marqué.

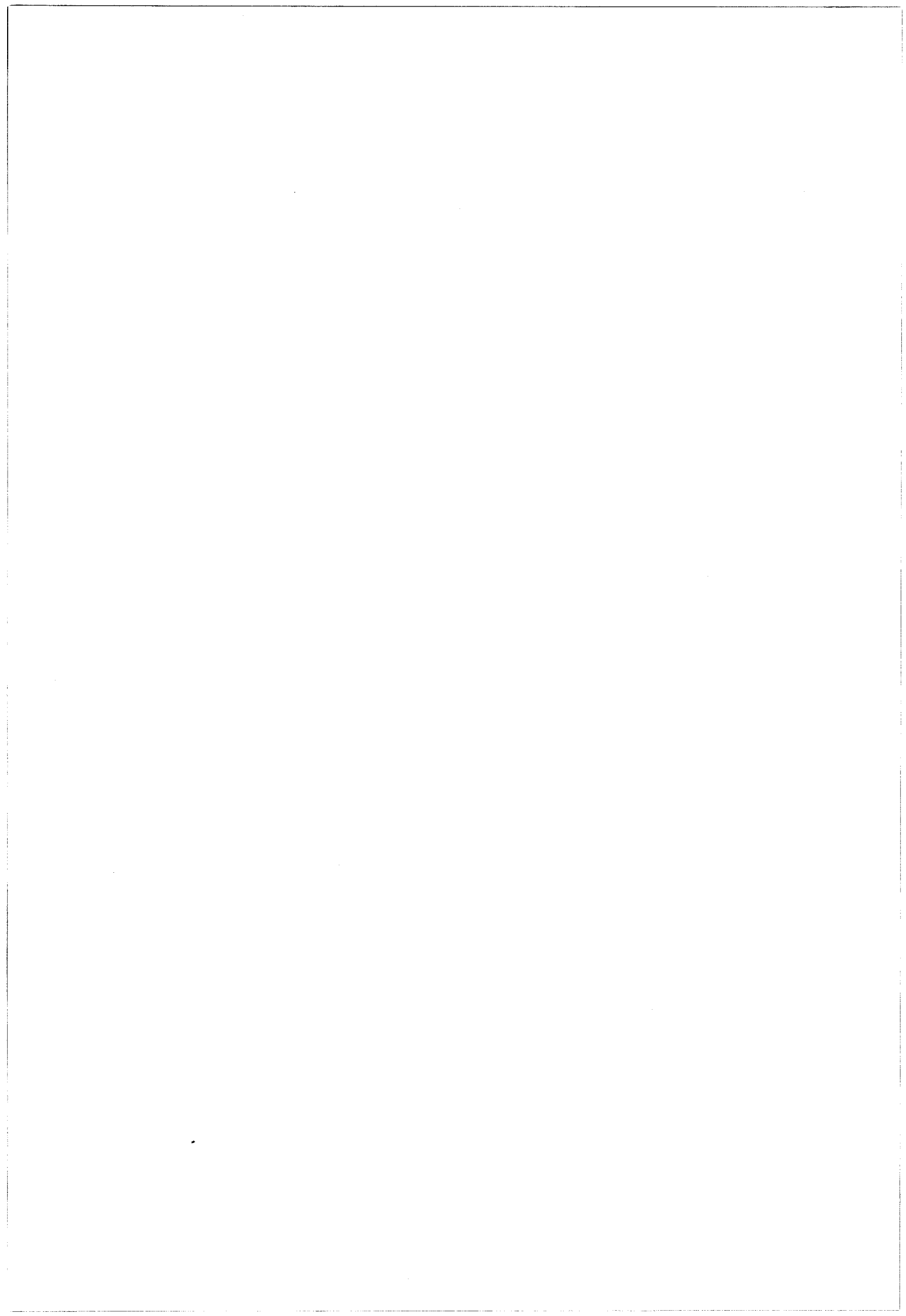


BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE II

- [1] JACOB G.  
Proc. of the S.I. III-V materials conf. Evian (1982) 2.
  
- [2] DUSEAUX M., MARTIN S.  
Proc. of the S.I. III-V materials conf. Kah-nee-ta (1984)
  
- [3] TUCK B.  
J. of mat. Science 10 (1975) 321.
  
- [4] FERRE D., FARVACQUE J.L.  
Phys. Stat. Sol. (a) 49 (1978) 737.
  
- [5] KESTELOOT R.  
Thèse Lille (1981).
  
- [6] KARMOUDA M.  
Thèse Lille (1984).
  
- [7] SCHAFFER S., ALEXANDER H., HAASEN P.  
Phys. Stat. Sol. 5 (1964) 247.
  
- [8] GOTTSCHALK H., PATZER G., ALEXANDER H.  
Phys. Stat. Sol. (a) 45 (1978) 207.
  
- [9] LAISTER D., JENKINS G.M.  
J. Mat. Science 8 (1973) 1218.
  
- [10] SAZHIN N.P., MIL'VIDSKII M.G., OSVENSKII V.B., STOLYAROV O.G.  
Soviet Phys. Solid State 8 (1966) 1539.
  
- [11] OSVENSKII V.B., KHOLODNYI L.P., MIL'VIDSKII M.G.  
Soviet Phys. Doklady 14, 2 (1969) 144.



- [12] VENABLES J.D., BROUDY R.M.  
J. Appl. Phys. Vol. 29, 7 (1958) 1025.
  
- [13] BELL R.L., LATKOWSKI R., WILLOUGHLY A.F.W.  
J. Mat. Science 1 (1966) 66.
  
- [14] MIHARA M., NINOMYA T.  
Phys. Stat. Sol. (a) 32 (1975) 43.
  
- [15] ABRAHAMS M.S., BUIOCCHI C.J.  
J. Appl. Phys. 36, 9 (1965) 2855.
  
- [16] GWINNER D., LABUSCH R.  
J. de Physique Colloque C6 supp. au n° 6 40 (1979) 75.
  
- [17] PEISSKER E., HAASEN P., ALEXANDER H.  
Phil. Mag. 7, 80 (1962) 1279.
  
- [18] SHIMIZU H., SUMINO K.  
Phil. Mag. 32 (1975) 123 et 143.
  
- [19] STEINHARDT H., HAASEN P.  
Phys. Stat. Sol. (a) 49 (1978) 93.
  
- [20] BOOYENS H., VERMAAK J.S., PROTO G.R.  
J. Appl. Phys. 49, 11 (1978) 5435.
  
- [21] DI PERSIO J., KESTELOOT R.  
J. de Physique 41 (1980) L259.
  
- [22] LEFEBVRE A.  
Communication privée.



## CHAPITRE III

### ACTIVATION THERMIQUE DU GLISSEMENT

## CHAPITRE III

\*\*\*

### ACTIVATION THERMIQUE DU GLISSEMENT

#### III-1. LES ESSAIS DE RELAXATION MECANIQUE.

III-1.1. Principe de l'essai de relaxation de contrainte.

III-1.2. Analyse de l'essai de relaxation.

III-1.3. Evolution du volume en fonction du taux de déformation et de la température.

#### III-2. FORMALISME DE L'ACTIVATION THERMIQUE.

III-2.1. Equation d'état de la déformation.

III-2.1.1. Rappel.

III-2.1.2. Cas particulier d'une déformation à vitesse imposée.

III-2.2. Détermination du volume d'activation et de la limite élastique.

III-2.2.1. Relation entre  $V$  et  $\tilde{V}$ .

III-2.2.2. Variation du volume d'activation avec la déformation.

III-2.2.3. Limite élastique.

III-2.3. Méthode d'intégration partielle et détermination de  $\Delta G_0$ .

#### III-3. CONCLUSION.

### III-1. LES ESSAIS DE RELAXATION MECANIQUE.

La forte dépendance en température de la valeur de la contrainte au minimum du crochet, dont nous verrons au paragraphe suivant qu'elle est peu différente de la limite élastique, semble indiquer que l'écoulement plastique est gouverné par des obstacles localisés dont le franchissement peut être activé thermiquement. La démarche expérimentale usuelle pour déterminer les grandeurs thermodynamiques associées au glissement, est d'établir une relation entre la vitesse de déformation, la contrainte appliquée et la température, à partir d'un essai différentiel au cours duquel l'une des trois variables  $\dot{\gamma}$ ,  $T$ ,  $\tau$  étant fixée, on enregistre l'évolution de l'une des deux autres, une variation brutale étant imposée à la troisième.

Nous avons utilisé l'essai de relaxation mécanique dont nous allons rappeler brièvement le principe.

#### III-1.1. Principe de l'essai de relaxation des contraintes

Au cours d'un essai de déformation à vitesse imposée constante, la traverse mobile de la machine est brusquement arrêtée à l'instant  $t$  ; sous la contrainte appliquée  $\tau_a$ , la déformation plastique de l'échantillon se poursuit, et comme la déformation totale est nulle, ceci entraîne une relaxation de la déformation élastique ; il en résulte une diminution de la contrainte appliquée, en fonction du temps, à partir de l'instant  $t$  (instant zéro de la relaxation).

Nous appelons  $t$  la variable temps de l'essai de déformation et notons  $(\cdot)$  les dérivées de fonction par rapport à cette variable.

Pendant un essai de relaxation dont l'instant initial correspond à une valeur particulière de  $t$ , la dépendance en temps de la contrainte appliquée est fonction d'une variable que nous notons  $t'$  ; les dérivées par rapport à  $t'$  s'écrivent (\*)

Le découplage des contributions élastique et plastique s'exprime par :

$$\dot{\gamma}_T^* = \dot{\gamma}_p^* + \frac{\dot{\tau}_a^*}{M}$$

La résolution de cette équation s'obtient en effectuant le développement limité de la vitesse de déformation plastique par rapport à la variation de la contrainte aux premiers instants de la relaxation.

Avec  $\Delta\tau_a = \tau_a(t, t' = 0) - \tau_a(t, t')$  et en limitant le développement au premier ordre, on obtient

$$\dot{\gamma}_p^* [\tau_a(t, t')] = \dot{\gamma}_p^* [\tau_a(t, t' = 0)] \exp - \frac{\tilde{V} \Delta\tau_a}{KT}$$

avec 
$$\tilde{V} = KT \left( \frac{d \text{Log } \dot{\gamma}_p^*}{d \tau_a} \right)_{t'=0, \text{ s.s.}}$$

la notion s.s. précise que la dérivée partielle doit être prise à sous-structure de dislocation constante.

Le volume de relaxation  $\tilde{V}$ , traduit la sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte.

Le report de l'expression de  $\dot{\gamma}_p^*$  dans la relation  $\dot{\gamma}_p^* = -\frac{\dot{\tau}_a^*}{M}$  puis l'intégration par rapport à  $t'$  donne l'évolution de  $\tau_a(t, t')$  sous la forme classique

$$\Delta\tau_a(t, t') = \frac{KT}{\tilde{V}} \text{Log} \left( \frac{t'}{c} + 1 \right)$$

avec 
$$c = \frac{KT}{M \tilde{V} \dot{\gamma}_p^* [\tau_a(t, t'=0)]}$$

### III-1.2. Analyse de l'essai de relaxation

La détermination usuelle du volume de relaxation apparent  $\tilde{V}$  se fait selon la technique de Guiu et Pratt [1]. La décroissance de la force appliquée, enregistrée pendant l'essai de relaxation, est analysée en reportant les variations de contrainte  $\Delta\tau$  en fonction de  $\text{Log } t'$  ; la courbe  $\Delta\tau = f(\text{Log } t')$  ainsi obtenue est ensuite linéarisée en décalant l'échelle des temps d'une constante  $c$  ; la pente  $\lambda$  de la droite  $\Delta\tau = f(\text{Log}(t'+c))$  détermine alors  $\tilde{V}$  qui est donné par

$$\tilde{V} = \frac{KT}{\lambda}$$

Une courbe typique d'exploitation de l'essai de relaxation est présentée sur la figure III-1.

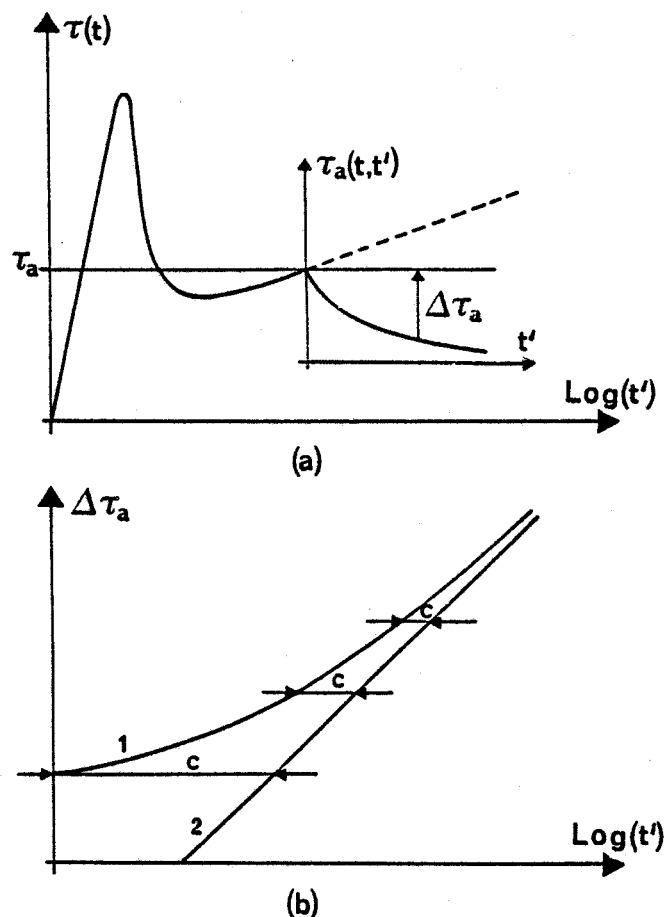


Figure III-1 : L'essai de relaxation de contrainte a) le principe b) le dépouillement

Le rapport  $\frac{c}{\lambda}$ , égal à  $\frac{1}{M \dot{\gamma}_0^*}$  est en principe connu et constant au cours de l'essai de relaxation puisque  $\dot{\gamma}_0^*$  est la vitesse de déformation plastique au point  $\gamma_a(t, t'=0)$  et M un facteur géométrique caractérisant la rigidité de l'ensemble échantillon - machine ; la précision avec laquelle on mesure  $\tilde{V}$  par l'intermédiaire de  $\lambda$ , repose alors sur une estimation correcte de la constante c.

L'utilisation, à toute température, d'une durée de l'essai de relaxation identique conduirait à des résultats peu fiables voire à une impossibilité de dépouillement car la relaxation cesse vite d'être logarithmique et la concavité de la courbe  $\Delta\tau = f(\text{Log } t)$  s'inverse pour des temps grands devant la constante de linéarisation. Cette inversion, caractéristique d'une évolution rapide de la sous structure de dislocations, correspond à des temps de l'essai de relaxation qui se situent hors du domaine de validité de l'analyse de Guiu et Pratt.

Omri, dans une étude sur la déformation plastique du silicium [2] et Karmouda, en poursuivant notre travail exploratoire de l'activation thermique du glissement dans les composés III-V, [3] ont exposé de façon détaillée les précautions méthodologiques requises pour le dépouillement graphique des essais de relaxation ; ils ont également proposé des moyens de contrôler la validité des résultats obtenus.

A basse température (grandes constantes de temps) le dépouillement est aisé et fiable sur des durées longues de l'essai de relaxation (1 à 2 fois la constante de linéarisation). A température élevée, la très faible durée exploitable de l'essai de relaxation entraîne une imprécision grande sur la valeur de c.

Dans le cas où le dépouillement graphique par la méthode de Guiu et Pratt devient trop imprécis, nous avons préféré utiliser un programme de lissage de la courbe  $y = a + b \log x$  pour rendre compte au mieux des données expérimentales dans les premiers instants de la relaxation.



### III-1.3. Résultats expérimentaux.

Le volume d'activation  $\tilde{V}$ , mesuré expérimentalement, est un volume apparent, non égal en général au volume d'activation thermique  $\tilde{V}$  caractéristique du mécanisme qui contrôle le glissement des dislocations. Ainsi dans InSb, le volume  $\tilde{V}$  ne se stabilise pas à une valeur constante au delà de la limite élastique conventionnelle, mais passe par un maximum d'autant plus marqué que la température est plus élevée (Figure III-2). Cette anomalie dans l'évolution du volume  $\tilde{V}$  ne peut pas être attribuée aux difficultés de dépouillement de l'essai de relaxation même si la détermination des constantes  $c$  et  $\lambda$  par méthode graphique ou numérique conduit à une imprécision sur la valeur du volume de relaxation que nous estimons à environ  $10 b^3$ .

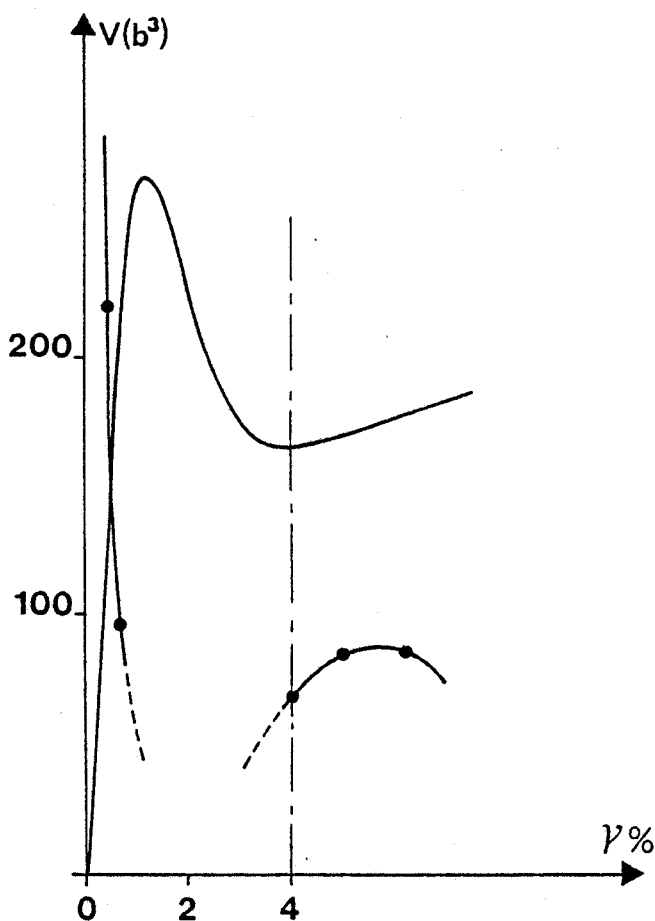


Figure III-2 : Evolution générale du volume d'activation en fonction du taux de déformation des échantillons.

La figure III-3 donne, pour InSb, l'évolution de  $\tilde{V}$  au cours d'un même essai de déformation pour des températures variant entre  $T_1$  et  $T_2$ . Nous montrerons au paragraphe II-2 en établissant une relation entre  $V$  et  $\tilde{V}$  que ce maximum est à associer à la très faible densité de dislocations mobiles au tout début de la déformation. Ce comportement, qui n'avait jamais été signalé auparavant ne semble pas spécifique aux composés III-V ; des mesures du volume d'activation en fonction du taux de déformation, réalisées par Georges dans le  $G_e$  | 4 | ont montré le même type de comportement.

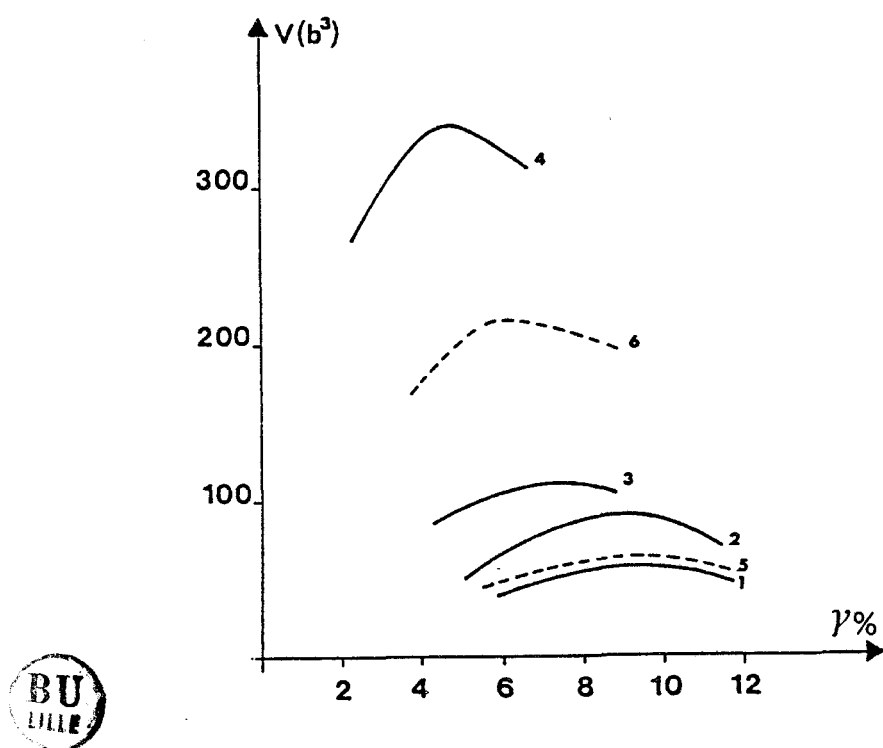


Figure III-3 : Variation du volume d'activation à partir du "Lower yield point" à différentes températures de déformation.

Cas de InSb : (1) (2) (3) (4) comportement plastique "mou"  
 (5) (6) comportement plastique "dur".

(1) 200°C, (2) 225°C, (3) 250°C, (4) 300°C, (5) 225°C, (6) 300°C.

Nous avons reporté sur la figure III-4 les mesures du volume apparent  $\tilde{V}$  déduites d'essais de relaxation à différents taux de déformation pour un échantillon d'arséniure de gallium ; les variations de  $\tilde{V}$  sont faibles, peu significatives et ne permettent pas de conclure à une quelconque loi

d'évolution. Nous admettrons qu'aux incertitudes de la mesure près, le volume est constant au delà du minimum du crochet. Cette conclusion reste vraie quelle que soit la température de l'essai. Ces résultats sont confirmés par une étude récente de l'activation thermique du glissement dans GaAs faite par Astié |5| .

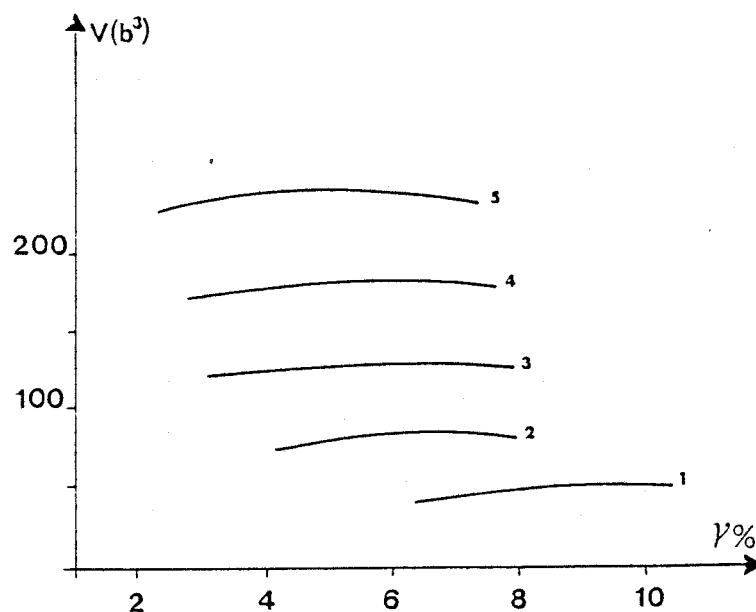


Figure III-4 : Variation du volume d'activation à partir du "Lower yield point" à différentes températures de déformation.

Cas de GaAs : (1)(2)(5) comportement plastique "mou"  
(3)(4) comportement plastique "dur"

(1) 353°C, (2) 386°C, (3) 430°C, (4) 456°C, (5) 475°C.

Le formalisme de l'activation thermique, qui sera développé au paragraphe suivant, établit que le volume apparant au pied du crochet s'identifie au volume vrai. Ceci justifie que la variation de volume avec la contrainte appliquée, présentée sur la figure III-5, corresponde à des volumes mesurés au minimum de contrainte ; la variation est tout à fait classique, avec des volumes très petits aux fortes contraintes (basses températures) et une remontée très rapide aux faibles contraintes. La figure III-6 définit le domaine de température que nous avons exploré et illustre l'extension de notre étude, faite par Karmouda dans le domaine des basses températures |3| .

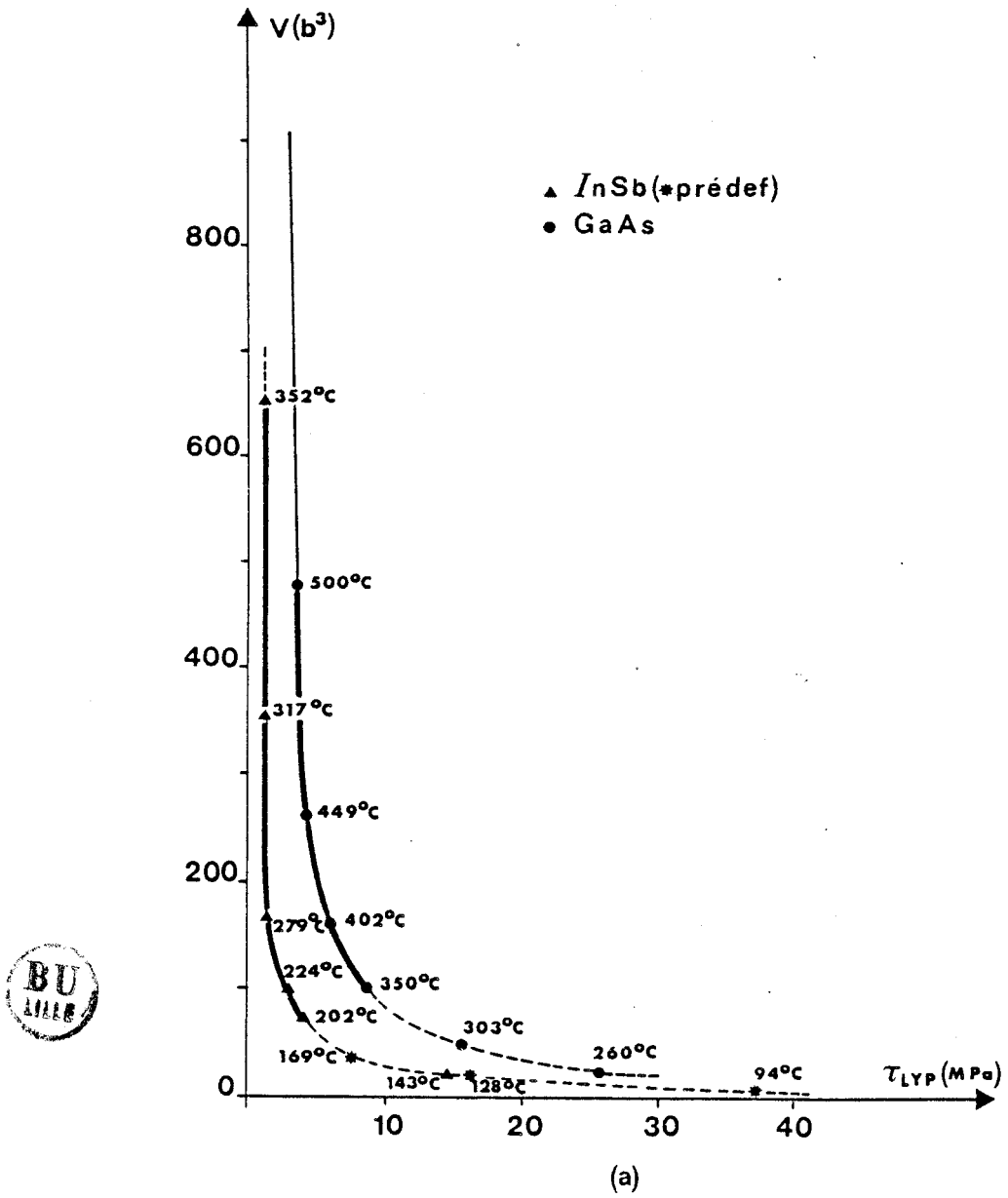


Figure III-6-a : Evolution du volume d'activation en fonction de la contrainte. Cas mou.

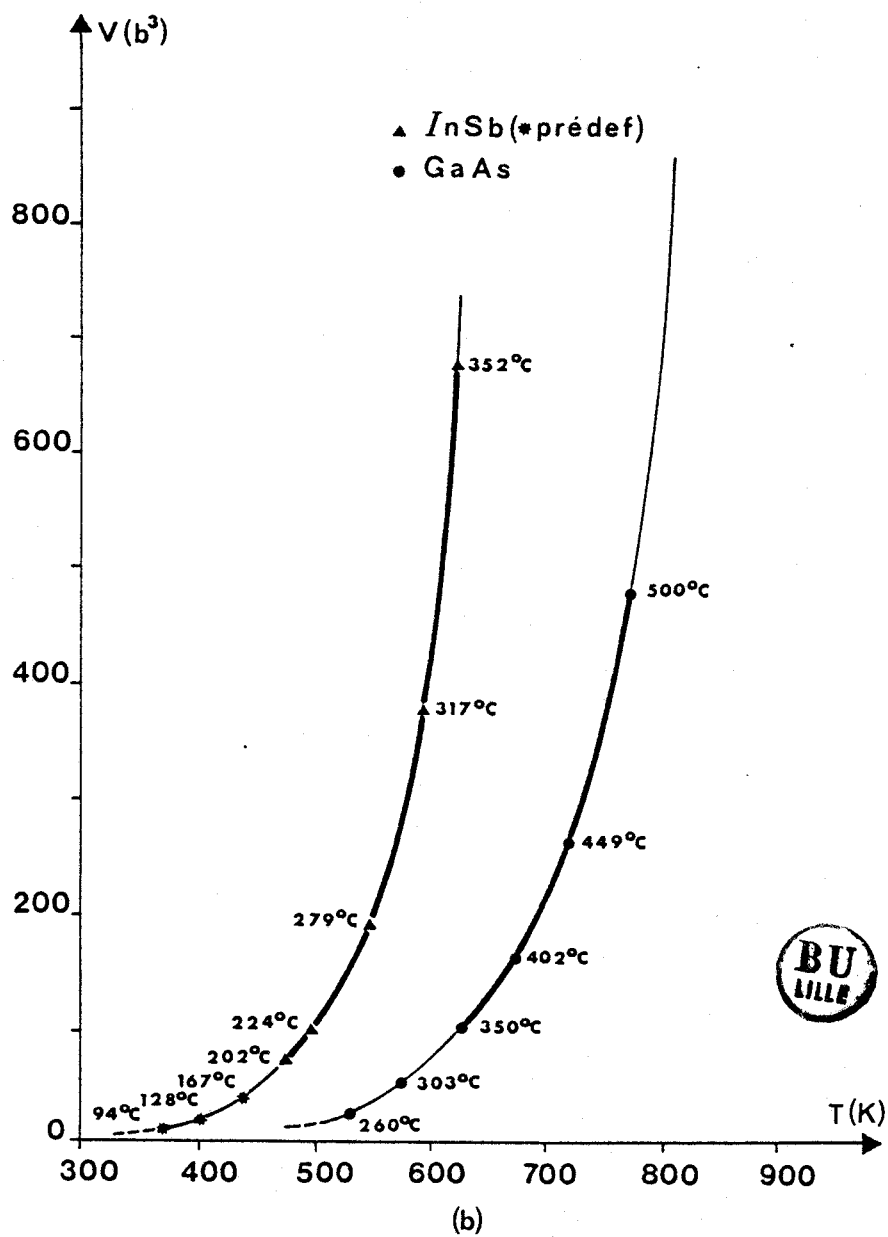


Figure III-6-b : Evolution du volume d'activation en fonction de la température. Cas mou.

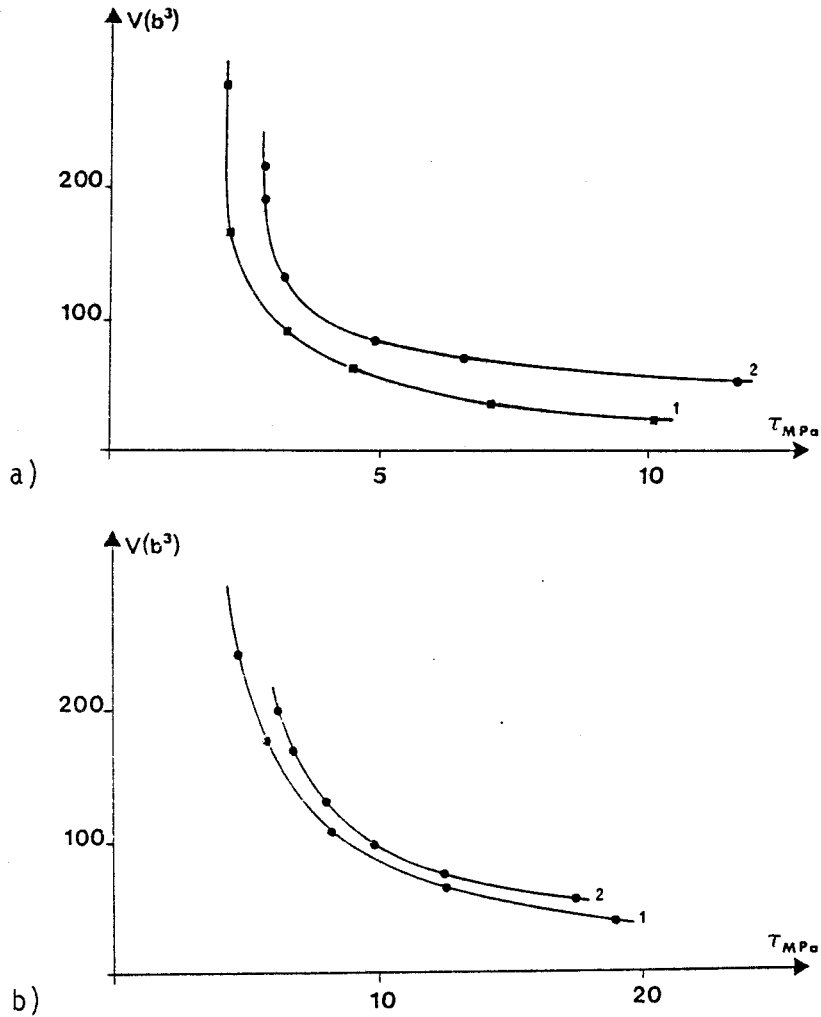


Figure III-5 : Dépendance du volume d'activation avec la contrainte mesurée au "Lower yield point" a) InSb b) GaAs



(1) comportement plastique "mou"  
(2) comportement plastique "dur"

### III-2. FORMALISME DE L'ACTIVATION THERMIQUE

#### III-2.1. Equation d'état de la déformation

##### III-2.1.1. Rappel

L'étude du franchissement activé de barrières d'énergie localisées, par des dislocations, vise à établir une équation d'état reliant la contrainte appliquée  $\tau$ , la déformation plastique  $\gamma$ , la température et un ensemble de paramètres décrivant la structure de l'échantillon et représenté par  $s$  :

$$f(\tau, \gamma, \dot{\gamma}, T, s) = 0$$

Sous certaines conditions, cette équation peut se réduire à une relation d'Arrhénius entre trois variables indépendantes  $\dot{\gamma}$ ,  $\tau$  et  $T$  de la forme

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp - \frac{\Delta G(\tau, T)}{KT}$$

Le glissement activé des dislocations a fait l'objet de développements très complets dont les exposés pourront être trouvés aux références 6 à 10.

Formellement, il s'interprète en introduisant une barrière d'énergie  $\Delta G_0(T)$ , due par exemple au frottement de réseau, que la dislocation doit franchir pour se déplacer avec l'aide de la contrainte et de la température. L'activation thermique du franchissement de l'obstacle correspond à une énergie fournie à la dislocation par les vibrations thermiques cohérentes d'atomes voisins. Par suite, la probabilité que la dislocation franchisse la barrière et donc sa vitesse moyenne de déplacement, sont proportionnelles à  $\exp - \frac{\Delta G(\tau, T)}{KT}$ , où  $\Delta G(\tau, T)$  est la variation d'énergie libre de Gibbs nécessaire pour faire passer la dislocation de son état d'équilibre à la position de col, de façon isotherme.

La vitesse de déformation plastique, résultant du glissement d'une densité de dislocations mobiles  $\rho$ , de vecteur de Burgers  $b$  et animés d'une vitesse moyenne  $v$  est donnée par la relation d'Orowan:

$$\dot{\gamma}_p = \rho b v$$

qui s'écrit dans le formalisme du glissement thermiquement activé

$$\dot{\gamma}_p = \rho b v_0 \exp - \frac{\Delta G(\tau, T)}{KT}$$

où le terme  $v_0$  est supposé ne dépendre ni de la contrainte ni de la température.

La hauteur  $\Delta G_0(T)$  de la barrière à la température  $T$  et la contribution thermique à son franchissement  $\Delta G(\tau, T)$  sont reliées par la relation

$$\Delta G(\tau, T) = \Delta G_0(T) - V \tau$$

où

$$V = - \left( \frac{\partial \Delta G(\tau, T)}{\partial \tau} \right)_T$$

est le volume d'activation, encore égal au produit par le vecteur de Burgers  $b$  de l'aire balayée par la dislocation entre sa position d'équilibre et sa position de col.

La vitesse de déformation plastique est

$$\dot{\gamma}_p = \rho b v_0 \exp - \frac{\Delta G_0(T)}{KT} \exp \frac{V\tau}{KT}$$

La contrainte  $\tau$  dans cette relation est la contrainte locale, au niveau du défaut ; elle diffère de la contrainte appliquée  $\tau_a$  par un terme de contrainte interne à longue portée  $\tau_i$ .

### III-2.1.2. Cas particulier d'une déformation à vitesse imposée.

De manière générale, la déformation totale imposée à l'échantillon est composée d'une réponse élastique de l'ensemble échantillon machine et d'une réponse plastique dès que la contrainte qui s'exerce effectivement sur les dislocations est suffisante, à une température donnée, pour leur permettre de vaincre le frottement de réseau ; ceci s'exprime sous la forme

$$\gamma_T = \gamma_e + \gamma_p = \frac{\tau_a}{M} + \gamma_p$$

$\tau_a$  est la contrainte appliquée,  $M$  est le module qui caractérise la rigidité de l'ensemble échantillon - machine.

Dans la région du crochet, la réponse est d'abord essentiellement élastique, due au manque de dislocations mobiles en densité suffisante pour ac-



comoder la déformation ; dès que la contrainte appliquée libère les dislocations de leurs vallées de Peierls, le processus de multiplication augmente rapidement la densité de dislocations mobiles ; ceci entraîne une décroissance très rapide de la contrainte appliquée jusqu'à une valeur minimum au delà de laquelle la contrainte augmente à nouveau. Ce minimum résulte d'une balance entre le phénomène de multiplication en avalanche des dislocations et celui du durcissement qui l'accompagne, suite aux interactions entre dislocations glissiles.

Au delà du minimum du crochet, l'évaluation expérimentale du terme  $\dot{\gamma}_e$  à partir des courbes  $\tau(\epsilon)$  montre que la contribution élastique  $\dot{\gamma}_e$  à la vitesse de déformation totale est négligeable.

En conséquence, à partir du minimum du crochet, la relation

$$(1) \quad \dot{\gamma}_p = \rho b v_0 \exp - \frac{\Delta G_0(T)}{KT} \exp \frac{\tau V}{KT} \simeq \dot{\gamma}_T = \text{cte}$$

constitue une bonne approximation de l'équation d'état de la déformation lors d'un essai à vitesse imposée constante. Cette relation approchée est strictement exacte lorsque le taux de durcissement est nul, c'est à dire en particulier au maximum et au minimum du crochet.

L'existence d'un durcissement conduit à définir les contraintes internes comme une fonction  $f(\rho)$  ne dépendant explicitement que de la densité de dislocations mobiles. La contrainte appliquée pendant l'essai de déformation est alors reliée à la contrainte effective au niveau du défaut par :

$$(2) \quad \tau_a = \tau + f(\rho)$$

$\tau$ , par la relation (1) et  $\tau_a$ , par la relation (2) sont alors complètement déterminés par la variation de  $\rho$  au cours de l'essai. Le fait que  $\dot{\gamma}_p$  (approximé à  $\dot{\gamma}_T$ ) soit constant au cours de l'essai permet, en calculant  $\frac{d}{dt} (\text{Log } \dot{\gamma}_T)$ , de trouver une relation particulière entre la

dérivée de la fonction  $f(\rho)$  au minimum du crochet et la densité de dislocations mobiles au même point.

$$\frac{d}{dt} (\text{Log } \dot{\gamma}_T) = 0 = \dot{\rho} \left[ \frac{1}{\rho} - \frac{V}{KT} f'(\rho) \right] + \frac{V}{KT} \dot{\tau}_a$$

Au minimum du crochet où  $\dot{\tau}_a = 0$  on a :

$$\left[ f'(\rho) - \frac{KT}{\rho V} \right]_{LYP} = 0$$

### III-2.2. Volume d'activation et limite élastique [10]

#### III-2.2.1. Relation entre $V$ et $\tilde{V}$

La dérivée du logarithme de la vitesse de déformation plastique par rapport à la contrainte appliquée peut s'écrire sous la forme

$$\frac{d \text{Log } \dot{\gamma}_p^*}{d \tau_a} = \frac{d \text{Log } \dot{\gamma}_p^*}{dt'} \cdot \frac{dt'}{d \tau_a}$$

ce qui entraîne, compte tenu des relations établies au paragraphe précédent :

$$\tilde{V} = KT \left\{ \left[ \frac{\dot{\rho}^*}{\rho} \left( \frac{1}{\rho} - \frac{V}{KT} f'(\rho) \right) + \frac{V}{KT} \frac{\dot{\tau}_a^*}{\tau_a} \right] \frac{1}{\frac{\dot{\rho}^*}{\tau_a^*}} \right\}_{t'=0}$$

La quantité  $\tilde{V}$ , accessible expérimentalement à partir de l'essai de relaxation est donc reliée au volume d'activation thermique par

$$\tilde{V} = V + KT \left[ \left( \frac{1}{\rho} - \frac{V}{KT} f'(\rho) \right) \frac{\dot{\rho}^*}{\tau_a^*} \right]_{t'=0}$$

Les quantités  $\rho(t, t'=0)$  et  $\frac{df(t, t'=0)}{d\rho}$  coïncident avec les valeurs de  $\rho(t)$  et  $f'(\rho(t))$  à l'instant  $t$  de l'essai de déformation. A l'instant initial de la relaxation, la relation  $\tau_a^* = -M \dot{\gamma}_p^*$  est vérifiée et la vitesse de déformation plastique  $\dot{\gamma}_p^*$  est peu différente de la vitesse de déformation totale. Le seul paramètre dans l'équation exprimant le volume mesuré  $\tilde{V}$  en fonction du volume vrai  $V$  est  $(\dot{\rho})_{t'=0}^*$ ; l'évolution de  $\tilde{V}$  au cours d'un essai de déformation dépend d'une loi d'évolution de la densité de dislocations mobiles pendant l'essai de relaxation, à partir de la densité  $\rho(t, t'=0)$ .

A la limite de  $t'$  tendant vers l'infini,  $\tau_a^* = 0$  et donc  $\dot{\gamma}_p^* = 0$ , ce qui correspond à une densité de dislocations mobiles tendant également vers zéro. Nous pouvons exprimer cette décroissance de la densité  $\rho$  au cours de la relaxation par une relation de la forme

$$\rho(t, t') = \rho(t, t' = 0) \exp - \alpha t'$$

ceci permet d'écrire  $\tilde{V}$  sous la forme

$$\tilde{V} = V + \frac{\alpha KT}{M \dot{\gamma}_T} \left[ 1 - \frac{V \rho f'(\rho)}{KT} \right]$$

Quel que soit le choix de la fonction  $f(\rho)$  caractérisant le durcissement, la relation ci-dessus, appliquée au minimum du crochet, conduit au résultat remarquable suivant : le volume d'activation apparent  $\tilde{V}$ , mesuré au minimum du crochet de compression, est égal au volume d'activation thermique.

### III-2.2.2. Variation du volume d'activation avec la déformation

Le volume d'activation et la limite élastique, dont la connaissance permet la détermination de  $\Delta G_0(T)$  sont connues uniquement si la forme de durcissement est précisée, c'est à dire si la dépendance de  $f$  avec  $\rho$  est précisée.

Nous avons d'abord choisi une dépendance classique de la contrainte interne avec la racine carrée de la densité de dislocations mobiles comme l'a proposé Haasen [11] mais ce choix de la fonction de durcissement ne permet pas de justifier théoriquement l'existence d'un maximum sur la courbe donnant le volume apparent  $V$  en fonction du taux de déformation - c'est à dire en fonction de la densité de dislocations -.

Le choix que nous avons fait d'écrire la contrainte appliquée comme la somme de la contrainte d'écoulement  $\tau$  agissant sur la dislocation et d'une contrainte interne  $\tau_i$  dépendant de la densité de dislocations mobiles comme  $\rho^{1/2}$ , implique, dès que la limite élastique est atteinte, l'existence d'un durcissement ; celui-ci résultant des interactions des dislocations mobiles avec les arbres de la forêt, il est déraisonnable de l'invoquer tant que la densité de dislocations mobiles est très faible, c'est par exemple le cas de InSb au tout début de la déformation. Aussi, nous faisons l'hypothèse qu'il existe une densité critique de dislocations  $\rho_c$  en dessous de laquelle le durcissement est négligeable et au delà de laquelle la fonction  $f(\rho)$  s'écrit  $B(\rho - \rho_c)^{1/2}$ .

Une analyse voisine, bien que formulée de façon différente a été proposée par Coulon, Lecocq, Escaig [12]. Avec cette forme de la fonction  $f(\rho)$ , le volume apparent  $\tilde{V}$  passe par un maximum pour  $\rho = 2\rho_c$  ; cette hypothèse d'une densité de coupure dans la fonction de durcissement conduit à une bonne description des résultats expérimentaux dans InSb. Si la densité initiale de dislocations mobiles est supérieure à  $2\rho_c$ , la courbe  $\tilde{V}$  ne présente pas de maximum : ce type de comportement est observé dans l'arséniure de gallium contenant une densité de dislocations de croissance de  $10^4$  cm/cm<sup>3</sup>.

### III-2.2.3. Limite élastique.

La relation particulière, au minimum du crochet, entre la dérivée de la fonction  $f(\rho)$  et la valeur du volume d'activation conduit à l'expression suivante

$$f(\rho)_{LYP} = \frac{2KT}{V} \left( \frac{\rho - \rho_c}{\rho} \right)_{LYP}$$

et détermine ainsi la limite élastique  $\sigma$  à partir de la contrainte appliquée au minimum du crochet et de la valeur de  $V$  au même point soit :

$$\tau = (\tau_a)_{LYP} - \frac{2 KT}{V} \left( \frac{\rho - \rho_c}{\rho} \right)_{LYP}$$

La quantité  $\left( \frac{\rho - \rho_c}{\rho} \right)$  est inconnue mais si la courbe  $\tilde{V}$  présente un maximum, sa valeur est comprise entre 0 et 0,5 puisque  $\rho$  est compris entre  $\rho_c$  et  $2\rho_c$ . Le terme  $\frac{KT}{V}$  étant toujours un correctif faible par rapport à la valeur  $(\tau_a)_{LYP}$ , nous choisissons de prendre arbitrairement  $\left( \frac{\rho - \rho_c}{\rho} \right)_{LYP}$  égal à la valeur intermédiaire 0,25.

La quantité  $\tau \simeq (\tau_a)_{LYP} - \frac{KT}{2 V_{LYP}}$  représente alors une bonne approximation de la limite élastique.

### III-2.3. Méthode d'intégration partielle et détermination de $\Delta G_0$ .

L'enthalpie d'activation est reliée à l'énergie libre de Gibbs par les lois classiques de la thermodynamique

$$\Delta H = \Delta G + T \Delta S$$

où l'entropie  $\Delta S$  est définie par

$$\Delta S = - \left( \frac{\partial \Delta G(T, \tau)}{\partial T} \right)_{\tau}$$

Elle ne diffère donc de l'énergie libre de Gibbs que lorsque cette dernière varie avec la température. Cagnon a discuté les origines physiques possibles du terme d'entropie et montré que, dans la plupart des cas, il est essentiellement dû à la variation du module de cisaillement avec la température [13]. Cette dépendance s'exprime sous la forme

$$\Delta G_0(T) = \Delta G_0(T=0) \frac{\mu(T)}{\mu_0} \quad \text{avec} \quad \mu_0 = \mu(T=0K)$$

La barrière  $\Delta G_0$  est, de ce fait, une barrière non rigide et il faut tenir compte, pour déterminer sa valeur, d'un terme d'entropie ; en effet  $\Delta G(T, \tau)$  étant une fonction de deux variables, on ne peut l'obtenir par simple intégration de sa dérivée partielle  $V = - \frac{\partial \Delta G(T, \tau)}{\partial \tau}$

Une méthode correcte pour déduire  $\Delta G$  de la variation du volume d'activation avec la contrainte a été proposée par Cagnon [13] ; elle consiste à faire le changement de variable

$$\Lambda = \frac{\mu_0}{\mu(T)} \tau$$

et

$$\Delta \Gamma(\Lambda) = \frac{\mu_0}{\mu(T)} \Delta G(T, \tau)$$

La dérivée par rapport à  $T$  de cette nouvelle variable  $\Delta \Gamma$ , qui n'est pas une enthalpie libre, est égale à zéro et la dérivée par rapport à  $\Lambda$  est égale au volume d'activation  $V = - \left( \frac{\partial \Delta G(T, \tau)}{\partial \tau} \right)_T$

de sorte qu'il suffit d'intégrer par rapport à  $\Lambda$  pour obtenir  $\Delta \Gamma(\Lambda)$

La quantité  $\Delta G(T, \tau)$ , donc également  $\Delta \Gamma(\Lambda)$ , représente la contribution thermique au franchissement de la barrière ; celle-ci est égale à zéro à  $T = 0$  et elle est maximum à partir de la température athermique, définie comme la température à partir de laquelle l'énergie thermique seule est suffisante pour que la dislocation franchisse l'obstacle.

On a

$$\Delta \Gamma(\Lambda) = - \int_{\Lambda(T=0)}^{\Lambda(T)} V d \Lambda$$

$\Delta G(T, \tau)$  peut alors être déterminée comme

$$\Delta G(T, \tau) = - \frac{\mu(T)}{\mu_0} \int_{\Lambda(T=0)}^{\Lambda(T)} V d \Lambda$$

Le caractère fragile du matériau à des températures relativement élevées ( $T \simeq 0,5 T_f$ ) empêche généralement de mesurer le volume d'activation et la limite élastique  $\tau$  dans une large gamme de température. Le plus souvent  $V$  et  $\tau$  sont déterminés entre une température inférieure limite  $T_0$  et la température athermique  $T_a$ .

Une méthode d'intégration partielle entre  $T_0$  et  $T_a$  a été proposée par Farvacque pour déterminer les paramètres d'activation du selenium [14]. Nous montrerons comment son principe permet d'accéder à la valeur de  $\Delta G$  même lorsqu'il est impossible d'effectuer des essais à très basse température.

La contribution thermique  $\Delta G(T_0, \tau)$  à la température  $T_0$  est donnée par la relation

$$\Delta G(T_0, \tau) = \frac{\mu(T_0)}{\mu_0} \left\{ \int_{\Lambda(T_0)}^{\Lambda(T)} V d\Lambda + \int_{\Lambda(T)}^{\Lambda(T=0)} V d\Lambda \right\}$$

Le deuxième terme de cette expression est encore égal à  $\frac{\mu_0}{\mu(T)} \Delta G(T, \tau)$

Si nous rappelons que la vitesse de déformation macroscopique s'exprime sous la forme

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp - \frac{\Delta G(T, \tau)}{KT}$$

alors en inversant la formule

$$\Delta G(T, \tau) = KT \text{ Log } \frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}} \simeq a KT$$

La dépendance linéaire de  $\Delta G(T, \tau)$  avec la température permet d'écrire

$$\frac{\Delta G(T_0, \tau)}{T_0} = \frac{\Delta G(T, \tau)}{T}$$

ce qui conduit à l'expression suivante de  $\Delta G(T, \tau)$

$$\Delta G(T, \tau) = \frac{\mu_0}{\frac{\mu(T)}{T} - \frac{\mu_0}{\mu(T_0)} \frac{T_0}{T}} \int_{\Lambda(T)}^{\Lambda(T_0)} V d\Lambda$$

Si l'intégrale est calculée pour  $T = T_a$ , alors  $\Delta G(T_a, \tau)$  est égal à  $\Delta G_0(T_a)$  et la hauteur de la barrière à  $T = 0K$  est donnée par

$$\begin{aligned} \Delta G_0(0) &= \frac{\mu_0}{\mu(T_a)} \Delta G_0(T_a) \\ &= \frac{T_a}{T_a - \frac{\mu(T_a)}{\mu(T_0)} T_0} \int_{\Lambda(T_a)}^{\Lambda(T_0)} V d\Lambda \end{aligned}$$

Il est important de noter ici que cette détermination de la barrière d'énergie  $\Delta G_0(0)$  n'inclut aucun paramètre ajustable.

### III-3. CONCLUSION

La détermination des paramètres d'activation du glissement consiste à analyser la déformation plastique à partir d'une loi de la forme :

$$\dot{\gamma}_p = \dot{\gamma}_0 \exp - \frac{\Delta G}{KT}$$

Dans les différentes approches proposées, la dépendance en contrainte de la déformation plastique s'exprime, soit dans le terme préexponentiel soit dans le terme exponentiel.



Le formalisme de Haasen, développé à l'origine pour décrire le début de la courbe contrainte - déformation des semiconducteurs élémentaires, suppose que le terme  $\dot{\gamma}_0$  dépend de la contrainte mais que  $\Delta G$  n'en dépend pas [15] ; la relation précédente s'écrit sous la forme

$$\dot{\gamma}_p = A \tau^n \exp - \frac{U}{kT}$$

Au contraire, dans le formalisme proposé par Schoeck, [6], le terme  $\dot{\gamma}_0$  dépend de la structure de l'échantillon mais pas (ou peu) de la contrainte et de la température. Nous avons montré que, malgré l'existence du crochet de compression dans les courbes contrainte - déformation, il est possible en adaptant le formalisme de Schoeck, d'atteindre les paramètres d'activation thermique du glissement. Nous avons ainsi déterminé une énergie d'activation  $\Delta G_0(0)$  de l'ordre de 1,1 eV pour InSb et de 2,25 eV pour GaAs.

Dans le cas d'un matériau à très faible densité initiale de dislocations nous avons également justifié l'existence d'un maximum dans l'évolution du volume de relaxation avec le taux de déformation.

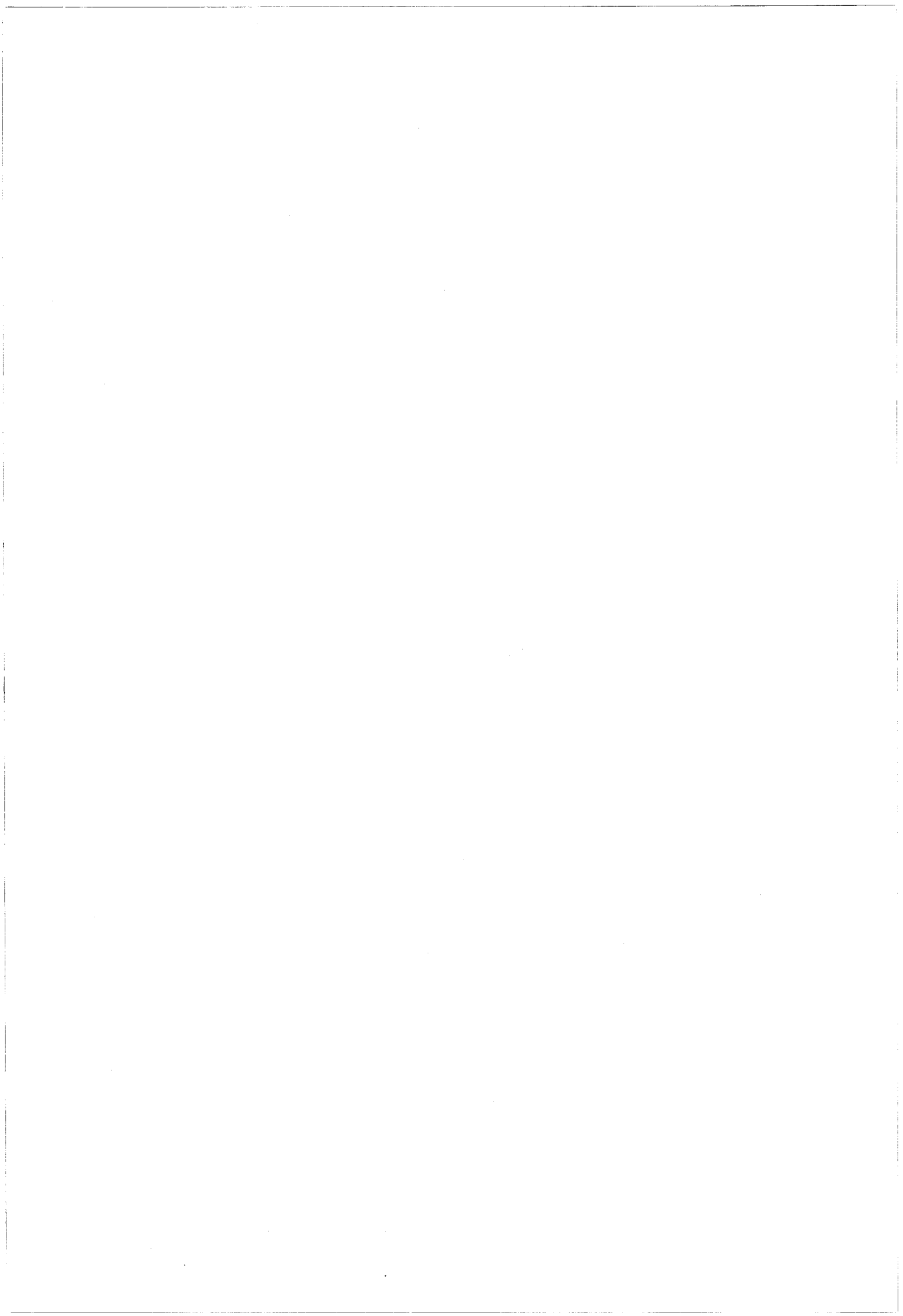
Les études de plasticité macroscopique, peu nombreuses, qui ont permis la détermination des paramètres d'activation du glissement, ont été faites dans le cadre du formalisme de Haasen et la comparaison avec nos propres résultats s'avère difficile. L'étude complémentaire à la nôtre menée par Karmouda à la fois sur InSb et GaAs montre que dans le domaine de température exploré, les énergies d'activation déduites des formalismes de Schoeck et de Haasen sont très voisines [3]. Astié arrivé à la même conclusion à propos d'un travail identique portant sur GaAs non dopé [5].



BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE III

- [1] GUIU F., PRATT P.L.  
Phys. Stat. Sol. 6 (1964) 111.
  
- [2] OMRI M.  
Thèse Nancy (1981)
  
- [3] KARMOUDA M.  
Thèse Lille (1984).
  
- [4] GEORGE A.  
Communication privée.
  
- [5] ASTIE P., COUDERC J.J., CHOMEL P., QUELARD D., DUSEAUX M.  
Phys. Stat. Sol. (a) 96 (1986) 225.
  
- [6] SCHOECK G.  
Phys. Stat. Sol. 8 (1965) 499.
  
- [7] HIRTH J.P., NIX W.D.  
Phys. Stat. Sol. 35 (1969) 117.
  
- [8] EVANS A.G., RAWLINGS R.D.  
Phys. Stat. Sol. 34 (1969) 9.
  
- [9] CAGNON M.  
Dislocations et déformation plastique Ecole d'été Yrivals  
(1979) 53.
  
- [10] ESCAIG B., FERRE D., FARVACQUE J.L.  
Phys. Stat. Sol. (a) 71 (1982) 329.
  
- [11] HAASEN P.  
Z. Phys. 167 (1962) 461.

- [12] COULON G., LECOCQ J., ESCAIG B.  
J. de Physique 35 (1974) 557.
- [13] CAGNON M.  
Phil. Mag. 24 (1971) 1465.
- [14] FARVACQUE J.L., DOUKHAN J.C., ESCAIG B., TUOMI T.  
Phys. Stat. Sol. (a) 36 (1976) 461.
- [15] HAASEN P.  
Festkörperprobleme 3 (1964) 67.



DEUXIEME PARTIE :

PROPRIÉTÉS GALVANOMAGNÉTIQUES

DES COMPOSÉS III-V DÉFORMÉS

- Introduction : Présentation bibliographique
- Chapitre IV : Fondements du modèle théorique
- Chapitre V : Comportement général du modèle théorique
- Chapitre VI : Propriétés galvanomagnétiques des échantillons déformés

## PRESENTATION BIBLIOGRAPHIQUE

\*\*\*\*\*

Le problème des propriétés électriques des dislocations, lié au développement des études de plasticité, a été traité d'abord dans les semiconducteurs covalents, tant du point de vue théorique que du point de vue expérimental. Le cas des composés III-V n'a été abordé que plus tardivement lorsque les techniques de croissance cristalline ont permis de fabriquer des monocristaux.

Dans ce paragraphe d'introduction, nous rappelons en premier lieu les idées de base utilisées dans les modèles théoriques proposés, nous résumons ensuite les résultats des mesures d'effet Hall et de conductivité effectuées dans InSb et GaAs indépendamment du présent travail, ces rappels nous permettent de préciser le cadre de notre étude et d'en définir les objectifs.

Dès 1954, Pearson Read et Morin | 1 | montrent que, dans le germanium les dislocations réduisent non seulement la mobilité des porteurs libres mais également leur densité. La même année, Read | 2 | présente une théorie des dislocations dans les semiconducteurs covalents permettant d'interpréter ces résultats expérimentaux. Le fondement de cette théorie, qui reprend une idée originale due à Shockley | 3 | est le suivant : les orbitales pendantes le long d'une dislocation coin se comportent comme des accepteurs régulièrement espacés dont l'ionisation n'est possible que si la ligne s'entoure d'un cylindre de charge positive. Selon Read, l'existence de ces cylindres de charge d'espace a deux conséquences majeures :

- la statistique d'occupation des accepteurs est fortement dépendante des termes d'interaction électrostatique dans le système constitué par la ligne chargée et son cylindre d'écran.
- la mobilité est réduite pour des porteurs libres se déplaçant perpendiculairement à la direction de la dislocation chargée ; elle n'est

pas modifiée parallèlement à la direction de la ligne. Ceci correspond à l'hypothèse d'une réflexion des électrons sur les cylindres d'écran qui se comportent alors, pour les phénomènes galvanomagnétiques, comme des régions vides.

Read [4], Logan [5], Juretschke [6] ont, de cette manière, calculé la conductivité et l'effet Hall d'un matériau contenant des cylindres vides et ceci pour différentes orientations de l'axe des cylindres par rapport aux directions des champs électriques et magnétiques. Des modifications ultérieures ont été apportées au modèle de Read par Broudy [7] pour tenir compte d'une réflexion diffuse à la limite des cylindres d'écran.

Les années 60 voient le développement d'un grand nombre d'études théoriques portant sur les mécanismes de diffusion associés aux dislocations. Pöddör [8, 9], Kuznetsova [10], Bonch Bruevich [11] calculent la mobilité des porteurs libres diffusés par la charge de cœur de la dislocation. Bon Bruevich reprend le formalisme du potentiel de déformation de Bardeen et Shockley [12], déjà utilisé par Dexter et Seitz [13] pour interpréter l'incrément de résistivité des matériaux écrouis, et le complète pour que le modèle puisse également décrire un effet de diffusion des porteurs libres par les dislocations vis. Dans le formalisme de Bardeen et Shockley, le potentiel de diffusion  $V(r)$  associé aux déformations hétérogènes est simplement proportionnel à la déformation au point  $r$ . Farvacque contestera cette forme locale de  $V(r)$  et proposera une expression différente résultant de l'état de déformation en tous points du cristal [14]. En 1966, Merten [15] et Levinson [16] font l'hypothèse d'une diffusion par effet piézoélectrique et déterminent la mobilité des porteurs par un calcul simple négligeant la correction apportée au champ de déformation des dislocations par le couplage piézoélectrique. Les travaux ultérieurs de Faivre et Saada [17] justifieront à posteriori les hypothèses simplificatrices proposées par Merten.

La diffusion reliée au potentiel de déformation de Bardeen et Shockley étant généralement faible devant la diffusion par la charge piégée le long de la ligne, de nombreuses mesures de mobilité ont été interprétées



de façon satisfaisante, dans les semiconducteurs covalents, en tenant compte des seuls effets de coeur [18]. Les effets de diffusion liés au potentiel de déformation deviennent par contre prépondérants lorsque la dislocation est électriquement neutre, ce que les travaux expérimentaux de Schröter, Labusch, Weber, Alexander et Haasen ont clairement établi [18] à [22].

Les calculs de mobilité s'effectuent généralement en résolvant l'équation de diffusion de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation. En 1974, Gerlach [23, 24] propose une approche différente : il étend au cas des semiconducteurs, la méthode de l'énergie perdue appliquée en 1967 par Calkin et Nicholson [25] au cas des impuretés dans les métaux normaux. Cette méthode, fondée sur l'équivalence de l'énergie joule et de l'énergie perdue par un centre diffuseur en mouvement dans le milieu diélectrique qui constitue les porteurs libres est une alternative intéressante aux calculs classiques de diffusion. Nous la rappelons au chapitre IV avant de l'appliquer systématiquement au calcul de la diffusion associée aux dislocations. La généralisation de la méthode de l'énergie perdue au calcul de la conductivité alternative dans un matériau contenant des porteurs de charge de différents types a été faite récemment par Farvacque [26].

La statistique d'occupation des états électroniques dans le semiconducteur déformé dépend à la fois du spectre de niveaux d'énergie associé à la dislocation et des possibilités d'écrantage du matériau. Dans le travail de Read auquel nous avons fait référence au début de ce rappel bibliographique, la dislocation présente un caractère accepteur et la charge piégée est écran-tée par une extra ionisation des impuretés à l'intérieur d'un cylindre de rayon  $R$ .

Teichler propose au contraire d'associer à la dislocation  $60^\circ$  une bande unidimensionnelle à demi occupée dans l'état neutre. Les résultats expérimentaux (Schröter 1967) montrent que les dislocations agissent effectivement soit comme des accepteurs soit comme des donneurs suivant les conditions de dopage et de température [27, 28]. L'inversion du signe de la charge portée par les dislocations, observée dans le germanium et le silicium de type p permet d'associer à la déformation un défaut de type amphotère mais elle est

incompatible avec l'idée du seul écrantage par les impuretés proposé par Read. Labusch et Schröter ont reformulé la statistique d'occupation des états électroniques en considérant un écrantage de la ligne chargée par une redistribution des porteurs libres du cristal au voisinage du défaut [29].

L'interprétation des mesures de Hall fait intervenir des niveaux associés aux dislocations dont le nombre et la position varient d'un auteur à l'autre [30 à 32]. Labusch et Schröter trouvent une bande à moitié remplie à  $E_V + 0,09$  eV pour le germanium, à  $E_V + 0,3$  eV pour le silicium. Pour le silicium encore, Grazhulis associe deux niveaux à la dislocation, l'un à  $E_V + 0,42$  eV, l'autre à  $E_C - 0,43$  eV. L'identification de ces niveaux à une structure de coeur particulière conduit à une multitude de description dont aucune ne semble, à l'heure actuelle, faire l'unanimité.

L'intérêt spécifique des composés III-V pour étudier les propriétés électroniques des dislocations a été souligné dès 1957 par Haasen [33] ; se référant aux idées de Read, il suggère que les structures de coeur différentes de deux dislocations  $60^\circ$  de vecteurs de Burgers opposés doivent correspondre à des effets de piégeage différents des électrons de conduction. Cette hypothèse est à l'origine de toutes les études ultérieures faites sur des échantillons déformés en flexion, technique permettant, en principe, de développer majoritairement suivant le sens de la flexion, des dislocations  $60^\circ$  de l'un ou l'autre signe.

Les premiers résultats d'effet Hall obtenus dans l'antimoniure d'indium déformé en flexion ont été publiés par Gatos, Finn et Lévine en 1960 ; bien que leur étude soit limitée à des mesures faites à  $T = 77$  K, les auteurs concluent à un effet accepteur de la dislocation In et à un effet donneur de la dislocation Sb. [34].

Les différents travaux publiés ensuite par Duga [35], Broudy [7], Bell [36, 37], Baitinger [38] montrent une réduction importante du nombre des électrons libres dans les échantillons déformés en flexion et ceci quel que soit le sens de la courbure. Ce fait a été interprété comme une preuve

du caractère accepteur des dislocations In et des dislocations Sb dans le matériau de type n.\*

Dans l'antimoniure d'indium de type p, l'effet des dislocations est peu marqué (leur densité est faible relativement au taux de dopage) et les résultats expérimentaux sont moins significatifs que dans le type n. Seules les mesures faites par Baitinger, Arndt et Schnepf [39] sur un matériau de type p exceptionnellement peu dopé ( $N_A - N_D = 4.10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) font apparaître clairement un caractère accepteur des dislocations Sb et un caractère amphotère des dislocations In.

La position des niveaux d'énergie associés aux dislocations a été déterminée en appliquant à l'antimoniure d'indium les modèles établis pour rendre compte des propriétés électriques des dislocations dans le germanium. Les résultats obtenus diffèrent suivant le modèle utilisé : alors que le modèle de Read associe aux dislocations In un niveau situé au milieu de la bande interdite et aux dislocations Sb un niveau très proche de la bande de valence, l'analyse des mêmes résultats expérimentaux à partir du modèle de Broudy place les deux niveaux près de la bande de conduction [37].

Dans une revue critique des effets de la flexion sur les propriétés électriques de l'antimoniure d'indium, Bell et Willoughly soulignent que, pour interpréter les variations du coefficient de Hall, il faut considérer dans les échantillons déformés, une densité de dislocations très largement supérieure à celle que l'on peut raisonnablement atteindre par flexion. Cependant, il ne retiennent pas l'idée que le piégeage des porteurs puisse être dû, au moins partiellement, à des défauts ponctuels isolés, créés au cours de la déformation [36]. Pour Osip'yan et Krasnov, les effets électriques associés à la déformation ont, au contraire, pour origine des défauts ponctuels [36, 43]. Dans le matériau de type n comme dans le matériau de type p, et quel que soit le sens de la flexion, les auteurs observent un effet accepteur très fort,

---

\* Notons que ce comportement expérimental s'explique tout aussi bien si, comme nous le pensons, les dislocations qui se développent majoritairement sont les mêmes dans les deux sens de la flexion.

incompatible avec la densité de dislocations évaluée à partir du rayon de courbure, ils attribuent le piégeage, non pas à un effet accepteur direct des dislocations mais à des mécanismes indirects résultant de l'interaction entre des défauts ponctuels induits par la déformation et le champ de distorsion autour de la dislocation. Le niveau d'énergie associé aux centres accepteurs est situé à 0,001 eV du sommet de la bande de valence mais ni les mécanismes de piégeage ni la nature des défauts ponctuels ne sont discutés.

Osip'yan et Krasnov ont également montré que les effets électriques observés dépendent fortement des conditions de déformation [43]. Alors que la flexion a un effet accepteur à vitesse de déformation faible, le comportement inverse est observé quand la vitesse de déformation augmente. Pour interpréter ces résultats, Osip'yan suppose qu'en augmentant la vitesse de déformation, les défauts ponctuels créés n'ont plus le temps de diffuser au coeur des dislocations, il en conclue que l'effet donneur observé est une propriété intrinsèque des dislocations.

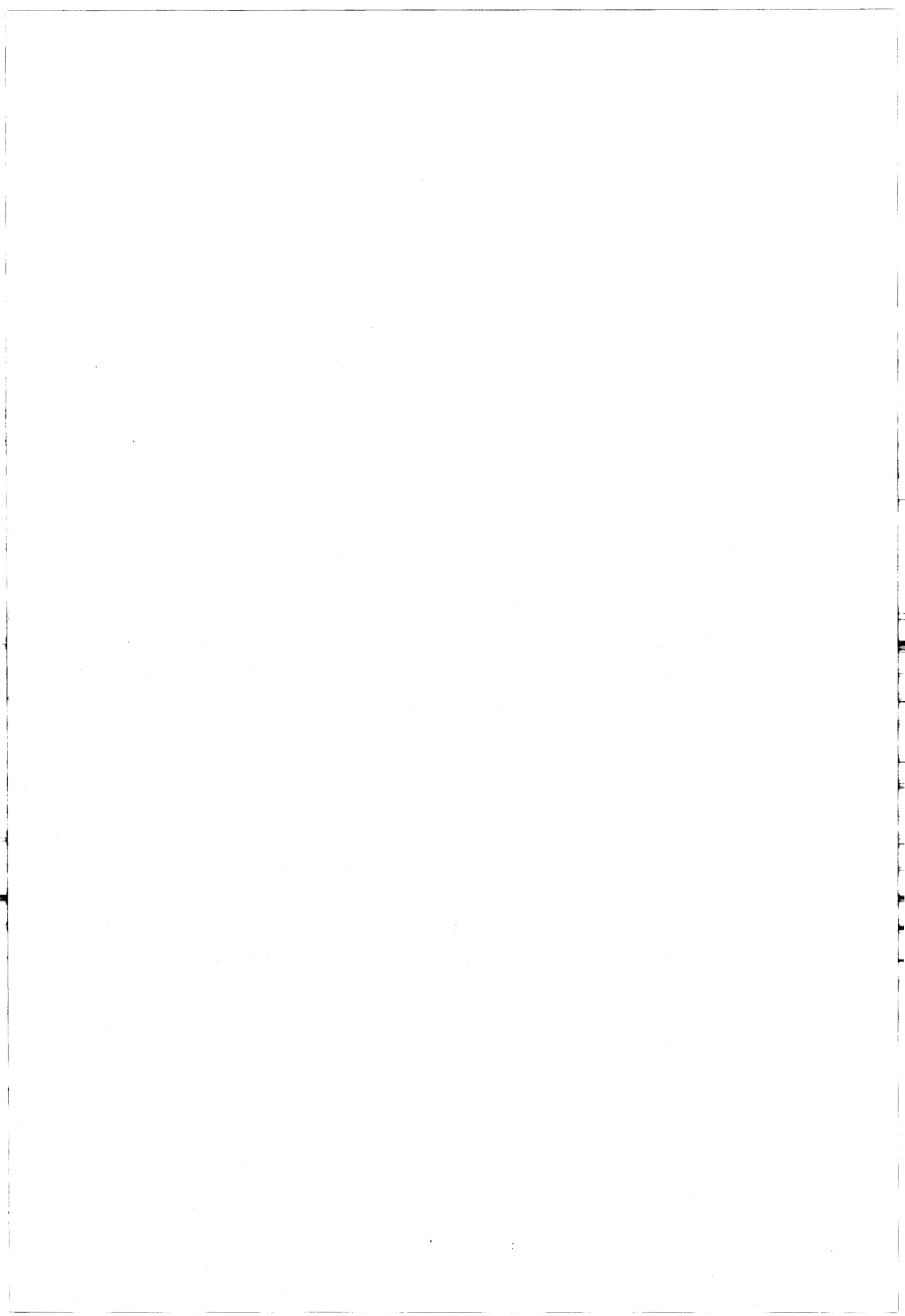
Dans GaAs, les taux de dopage élevés, rarement inférieurs à  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  dans le matériau massif, rendent difficile l'observation d'un effet de piégeage des porteurs libres par les dislocations. Kravchenko, Palkin et Rubeva observent que, pour des échantillons ayant tous subi le même traitement thermique, les variations de la densité des électrons libres et de leur mobilité sont plus grande pour les échantillons non déformés que pour les échantillons déformés [44]. Esquivel, Sen et Lin mesurent une diminution du nombre de porteurs libres et de leur mobilité après déformation mais notent que les densités de dislocations introduites dans les échantillons fléchis ne permettent pas de justifier l'ordre de grandeur des effets observés [45]. Le travail de Lin et Bube, qui porte sur l'arséniure de gallium semi-isolant n'apporte pas plus d'évidence que les précédents sur le rôle direct joué par les dislocations pour modifier les propriétés électroniques du matériau déformé. Faute de pouvoir déformer des échantillons sans rupture dans le cas d'une flexion  $\beta$ , Lin et Bube ont limité leur étude au cas d'une flexion  $\alpha$ . Cette asymétrie de comportement plastique, signalée pour justifier un manque de mesures galvanomagnétiques n'a pas autrement retenu l'attention des auteurs ; elle ne semble pas non plus avoir induit d'études ultérieures de plasticité macroplastique avant celle que nous avons développé [46].

Pour disposer de densités de dislocations élevées, Gwinner et Labusch fléchissent des échantillons jusqu'à des rayons de courbure de  $2 \cdot 10^{-3}$  m. [47]. Les variations de la densité de porteurs et de leur mobilité sont grandes par rapport à tout ce qui a été observé dans des études comparables mais le manque d'observations directes des sous-structures obtenues dans ces conditions de déformation extrêmes limite l'interprétation à une discussion qualitative.

Nakata et Ninomya préfèrent utiliser la compression uniaxiale pour introduire des dislocations en densité élevée [48]. L'augmentation de la résistivité mesurée sur GaAs de type n peu dopé ( $N_D \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) est très importante même pour des taux de déformation faibles. L'interprétation de leurs résultats expérimentaux repose sur la notion de cylindres de charge d'espace isolants dont l'existence transforme le cristal en un ensemble de régions semiconductrices séparées les unes des autres par des régions isolantes. La théorie des percolations est appliquée au calcul de la conductivité ; le niveau d'énergie associé aux dislocations est, dans ce modèle, situé au milieu de la bande interdite.



Des techniques expérimentales classiques dans l'étude des défauts ponctuels ont parfois été appliquée à l'étude des dislocations dans les semiconducteurs III-V : c'est le cas de la D.L.T.S. (Deep level transient spectroscopy) ou de la mesure du temps de vie des positrons [49, 50]. La complexité du défaut que constitue la dislocation rend cependant difficile l'interprétation des résultats obtenus et ces méthodes ne se sont pas généralisées.



- [1] PEARSON G.L., READ W.T., MORIN F.J.  
Phys. Rev. 93 (1954) 666.
  
- [2] READ W.T.  
Phil. Mag. 45 (1954) 775 et 1119.
  
- [3] SHOCKLEY W.  
Phys. Rev. 91 (1953) 228.
  
- [4] READ W.T.  
Phil. mag. 46 (1955) 111.
  
- [5] LOGAN R.A., PEARSON G.L., KLEINMAN D.A.  
J. Appl. Phys. 30 (1959) 885.
  
- [6] JURETSCHKE H.J., LANDAUER R., SWANSON J.A.  
J. Appl. Phys. 27 (1956) 838.
  
- [7] BROUDY R.M.  
Advances in physics 12 (1963) 135.
  
- [8] PÖDÖR B.  
Phys. Stat. Sol. 16 (1966) K 167.
  
- [9] PÖDÖR B.  
Acta Physica Hungarica 23 (1967) 393.
  
- [10] KUZNETSOVA E.M.  
Soviet Phys. Solid State 3 (1962) 1446.
  
- [11] BONCH BRUEVICH V.L.  
Soviet Phys. Solid State 3 (1961)
  
- [12] BARDEEN J., SHOCKLEY W.  
Phys. Rev. 80 (1950) 72.

- [13] DEXTER D.L., SEITZ F.  
Phys. Rev. 86 (1952) 964
  
- [14] FARVACQUE J.L., LENGART P.  
Phys. Stat. Sol. (b) 80 (1977) 361 et 433.
  
- [15] MERTEN L.  
Phys. Kondens. Materie 2 (1964) 53.
  
- [16] LEVINSON I.B.  
Soviet Phys. Solid State 7 (1965) 2336.
  
- [17] FAIVRE ET SAADA  
Phys. Stat. Sol. b 52 (1962) 127.
  
- [18] HAASEN P., SCHRÖTER W.  
in "Fundamental Aspects of dislocations theory"  
Ed. J.A. Simmons, R. de Wit, R. Bullough NBS Spec. Publ. (197
  
- [19] SCHRÖTER W.  
Phys. Stat. Sol. 31 (1969) 117.
  
- [20] WEBER H., SCHRÖTER W., HAASEN P.  
Helv. Phys. Acta 41 (1968) 1255.
  
- [21] HAASEN P., ALEXANDER H.  
Solid State Physics 22 (1968) 33.
  
- [22] DUSTER F., LABUSCH R.  
Phys. Stat. Sol. (b) 60 (1973) 161.
  
- [23] GERLACH E.,  
Phys. Stat. Sol. (b) 61 (1974) K 97.
  
- [24] GERLACH E.  
Phys. Stat. Sol. (b) 62 (1974) K 43.



- [25] CALKIN M.G., NICHOLSON P.J.  
Rev. of Mod. Phys. 39 (1967) 361.
- [26] FARVACQUE J.L., VIGNAUD D.  
Phys. Rev. B 31, 2 (1985) 1041.
- [27] TEICHLER H.  
Lattice defects in semiconductors.  
Inst. of Phys. Conf. Series 23 (1974) 374.
- [28] SCHRÖTER W.  
Phys. Stat. Sol. 21 (1967) 211.
- [29] LABUSCH R., SCHRÖTER W.  
Collective treatise on dislocations Ed. by F.N.R. Nabarro  
Vol. 5 (1980) 127.
- [30] LABUSCH R., SCHRÖTER W.  
Lattice Defects in semiconductors.  
Inst. of Phys. Conf. Series 23 (1974) 56.
- [31] GRAZHULIS V.A., KVEDER V.V., MUKHINA V. Yu  
Phys. Stat. Sol. (a) 43 (1977) 407.
- [32] GRAZHULIS V.A., KVEDER V.V., MUKHINA V. Yu.  
Phys. Stat. Sol. (a) 44 (1977) 107.
- [33] HAASEN P.  
Acta Met. 5 (1957) 598.
- [34] GATOS H.C., FINN M.C., LEVINE M.C.  
J. Appl. Phys. 32 (1961) 1174.
- [35] DUGA J.J.  
J. Appl. Phys. 33 (1962) 169.

- [36] BELL R.L., LATOWSKI R., WILLOUGHBY A.F.  
J. Mat. Science 1 (1966) 66.
- [37] BELL R.L., WILLOUGHBY A.F.  
J. Mat. Science 5 (1970) 198.
- [38] BAITINGER U., ARNDT J., SCHNEPF D.  
J. de Physique 30 (1969) 87.
- [39] BAITINGER U., ARNDT J., SCHNEPF D.  
J. of Mat. Science 4 (1969) 396.
- [40] KRASNOV A.P., OSIP'YAN Yu. A.  
Soviet Phys. Solid State 20 (1978) 1025.
- [41] KRASNOV A.P., OSIP'YAN Yu. A.  
Soviet Phys. Solid State 21 (1979) 430.
- [42] KRASNOV A.P., OSIP'YAN Yu. A.  
Sovied Phys. Solid State 22 (1980) 282.
- [43] KRASNOV A.P., OSIP'YAN Yu. A.  
Soviet Phys. J.E.T.P. 54 (1981) 723.
- [44] KRAVCHENKO A.F., PALKIN A.M., RUBEVA V.P.  
Soviet Phys. Semiconductors 1 (1968) 922.
- [45] ESQUIVEL A.L., SEN S., LIN W.N.  
J. Appl. Phys. 47 (1976) 2588.
- [46] LIN A.N. BUBE R.H.  
J. Appl. Phys. 46 (1975) 5302.
- [47] GWINNER D., LABUSCH R.  
J. de Physique Colloque C6, sup. au n° 6 40 (1979) 75.

- [48] NAKATA H., NINOMYA T.  
J. of the Phys. Soc. of Japan 42 (1977) 552.
- [49] ISHIDA T., MAEDA K., TAKEUCHI S.  
Appl. Phys. 21 (1980) 257.
- [50] KURAMOTO E., TAKEUCHI S., NOGUCHI M., CHIBA T., TSUDA N.  
J. of the Phys. Soc. of Japan 34 (1973) 103.

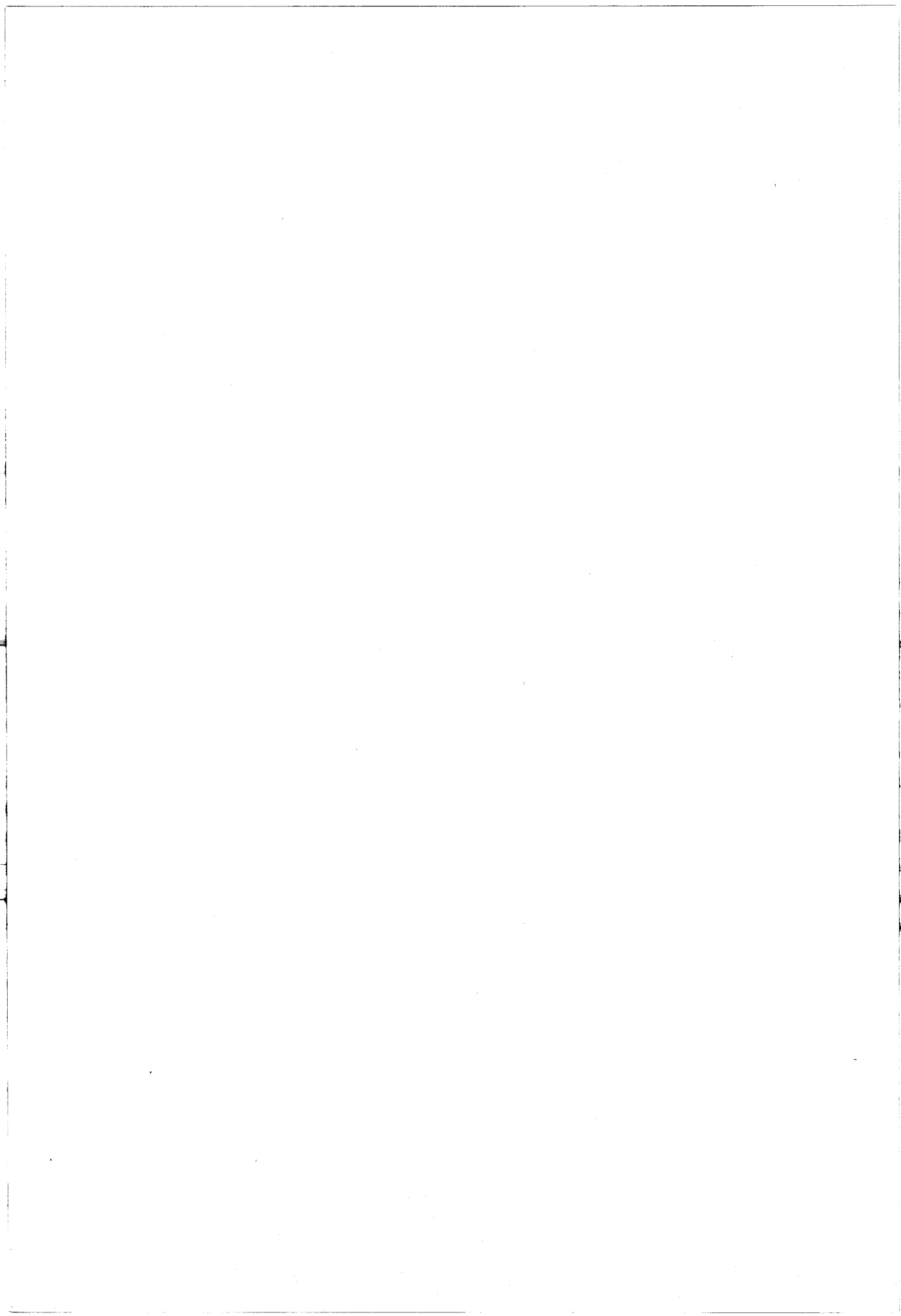
[13] KARATA H., NINOMYA T.,  
J. of the Phys. Soc. of Japan 32 (1977) 252.

[14] ISHIDA T., MAEDA K., TAKUCHI S.,  
Appl. Phys. 21 (1980) 251.

[15] KURAMOTO E., TAKUCHI S., WAGUCHI M., CHIBA T., ISHIDA H.,  
J. of the Phys. Soc. of Japan 32 (1977) 503.

## CHAPITRE IV

### FONDEMENTS DU MODÈLE THÉORIQUE



## CHAPITRE IV

\*\*\*

### FONDEMENTS DU MODELE THEORIQUE

#### IV-1. NIVEAUX PROFONDS ASSOCIES AUX DISLOCATIONS

IV-1.1. Désordre local dans le coeur d'une dislocation

IV-1.1.1. Défaut de coordinance

IV-1.1.2. Distorsion des liaisons

IV-1.2. Influence de la structure de coeur

#### IV-2. STATISTIQUE D'OCCUPATION DES NIVEAUX

IV-2.1. Fondements du modèle théorique

IV-2.2. Mécanismes d'écrantage de la dislocation

IV-2.3. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations

#### IV-3. CRITIQUES DU MODELE PROPOSE

IV-3.1. Validité de l'approximation de Debye-Hückel

IV-3.2. Déplacement non rigide des bandes d'énergie

IV-3.3. Délocalisation des états électroniques

#### IV-4. MOBILITE INDUITE PAR LES DISLOCATIONS

IV-4.1. Origines de la réduction de mobilité

IV-4.2. Méthode de l'énergie perdue

IV-4.3. Le potentiel de diffusion piézoélectrique

IV-4.4. Le potentiel de diffusion par effet de ligne chargée

IV-4.5. Le potentiel de déformation

IV-4.6. Mobilité induite par les dislocations.





#### IV-1. NIVEAUX PROFONDS ASSOCIES AUX DISLOCATIONS.

Une description élémentaire de la structure électronique des composés  $A_{III} - B_V$  peut être faite, dans l'approximation des liaisons fortes, en utilisant un modèle moléculaire. Malgré l'extrême simplicité du modèle, son application au cristal parfait ainsi qu'à différents défauts de structure (lacune, surface...) a montré qu'il permet d'obtenir des résultats qualitativement corrects [1]. Aussi nous l'utiliserons pour justifier l'existence possible de niveaux d'énergie extrinsèques associés aux dislocations.

Dans ce modèle, la structure de bandes est décrite en termes d'orbitales hybridées  $sp_3$  engagées dans des liaisons covalentes. Si les interactions sont limitées à la seule intégrale de résonance entre orbitales hybridées pointant l'une vers l'autre, elle se réduit à deux niveaux liant et antiliant dont les énergies sont données par :

$$E_{L,A.L.} = \frac{\alpha_A + \alpha_B}{2} \pm \left[ \left( \frac{\alpha_A - \alpha_B}{2} \right)^2 + \beta^2 \right]^{1/2}$$

$\alpha_A$  et  $\alpha_B$  correspondent respectivement aux valeurs propres associées aux orbitales hybridées  $sp_3$  centrées sur un atome A ou sur un atome B.  $\beta$  est l'intégrale de résonance entre deux orbitales hybridées A et B pointant l'une vers l'autre.

L'élargissement en bandes de ces niveaux moléculaires, dans un modèle moins simpliste prenant en compte un couplage intra-atomique des orbitales hybridées, correspond à la formation des bandes de valence et de conduction du semiconducteur. Des améliorations peuvent être apportées à la méthode ; elles permettent d'affiner la description de la structure de bandes sans modifier qualitativement les conclusions précédentes.

Une dislocation dans le cristal parfait correspond à un défaut de structure et les modèles géométriques développés pour le décrire illustrent le désordre local existant dans le coeur.

#### IV-1.1. Désordre local dans le coeur d'une dislocation.

##### IV-1.1.1. Défaut de coordinance.

La vue perspective d'une dislocation  $60^\circ$  shuffle non dissociée montre que, dans le coeur, la coordinance ne correspond pas à celle du cristal parfait ; chaque atome du coeur n'est entouré que par trois premiers voisins et possède, de ce fait, une orbitale pendante n'entrant en résonance avec aucune autre orbitale cristalline. Cette orbitale correspond à l'énergie propre  $\alpha_A$  (ou  $\alpha_B$ ) alors que pour les autres orbitales  $sp_3$  engagées dans des liaisons covalentes, les états électroniques ont une énergie  $E_L$  ou  $E_{A.L.}$

Dans les semiconducteurs covalents, l'état propre de l'orbitale pendante correspond, dans le modèle moléculaire, à un niveau extrinsèque profond situé au milieu de la bande interdite.

Dans les composés III-V, les calculs théoriques des niveaux d'énergie associés aux dislocations découlent directement des modèles applicables aux semiconducteurs élémentaires. Les méthodes utilisées nécessitent le plus souvent de définir autour de la dislocation un cluster contenant un nombre fini d'atomes. Or, dans les composés III-V, à cause du caractère partiellement ionique de la liaison, les niveaux éventuellement associés aux dislocations dépendent nécessairement de la variation de la constante de Madelung due à la création du défaut. L'introduction d'une dislocation, analogue au retrait d'un demi-plan, supprime dans le cristal un ensemble infini de lignes parallèles à la dislocation et dont la charge est alternativement positive et négative. La variation de la constante de Madelung qui en résulte est difficilement évaluable dans un calcul des niveaux d'énergie utilisant un modèle de cluster de taille nécessairement très réduite.

Des calculs élémentaires, effectués dans l'approximation des liaisons fortes en utilisant un modèle moléculaire, nous ont permis de montrer que, dans les composés III-V, les niveaux d'énergie associés aux orbitales pendantes sont situés dans la bande interdite [2, 3].

La symétrie de translation le long de la ligne de dislocation peut conférer à ces états le caractère de bande d'énergie s'il y a un recouvrement suffisant entre orbitales voisines. Ces résultats, s'ils ne font que manifester une tendance, accréditent cependant l'idée que des niveaux profonds sont associés à l'existence d'orbitales pendantes dans le coeur des dislocations.

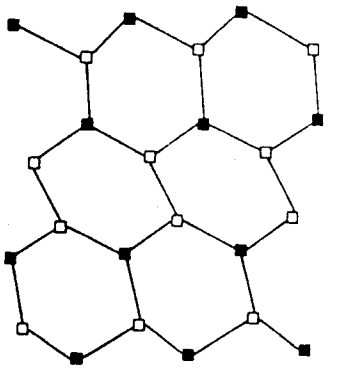
#### IV-1.1.2. Distorsion des liaisons.

Le modèle de coeur d'une dislocation vis constitue un second exemple de désordre. Le nombre d'atomes premier voisin est correct mais l'arrangement géométrique des atomes dans le coeur conduit à une distorsion importante des liaisons (angle, longueur).

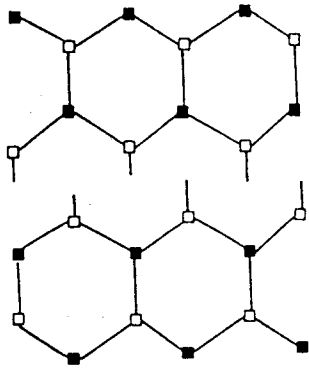
Dans le modèle moléculaire, ces distorsions se traduisent par des modifications de l'intégrale de résonance  $\beta$  et conduisent à des variations locales de la position des niveaux liant et antiliant. Si les distorsions sont très grandes, alors des états peuvent apparaître près des bords de bandes de valence et de conduction par un processus de décrochement des états du continuum : il s'agit dans ce cas d'états peu localisés contrairement aux états associés aux orbitales pendantes.

#### IV-1.2. Influence de la structure de coeur.

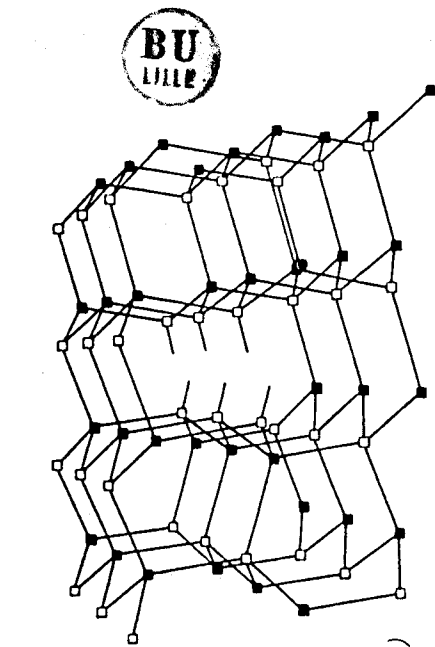
L'existence de niveaux d'énergie dans la bande interdite étant liée à la fois à la présence d'orbitales pendantes le long de la ligne et à la distorsion des liaisons, le spectre des niveaux d'énergie associés aux dislocations dépendra du détail de la structure de coeur, en particulier de sa dissociation, d'une reconstruction éventuelle des orbitales pendantes et d'une relaxation des positions atomiques dans le coeur. La transition de Peierls constitue l'exemple le plus connu de réarrangement d'un cristal unidimensionnel de manière à minimiser l'énergie totale du système. Toutefois, il ne semble pas que l'existence d'une telle transition ait été clairement établie pour les dislocations dans les semiconducteurs.



c)



b)

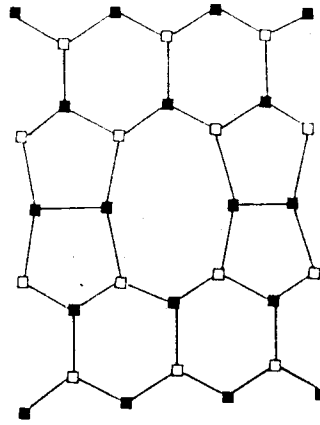


a)

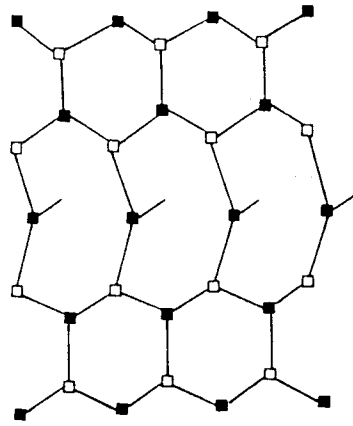


Figure IV-1 : Dislocation partielle à  $90^\circ$

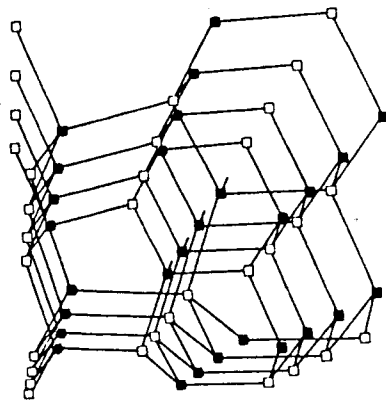
a) vue perspective de la partielle non reconstruite  
 b) partielle non reconstruite, vue perpendiculairement au plan de glissement  
 c) modèle de reconstruction de la partielle à  $90^\circ$ , vue perpendiculairement au plan de glissement.



c)



b)



a)

Figure IV-2 : Dislocation partielle à  $30^\circ$

a) vue perspective de la partielle non reconstruite  
 b) partielle non reconstruite, vue perpendiculairement au plan de glissement  
 c) modèle de reconstruction de la partielle à  $30^\circ$ , vue perpendiculairement au plan de glissement.

La dissociation des dislocations, dont nous avons déjà discuté au premier chapitre, peut être un autre facteur permettant de diminuer l'énergie totale du cristal. La largeur d'équilibre de la dissociation correspond à un compromis entre l'énergie élastique gagnée en éloignant les partielles l'une de l'autre et l'énergie de faute d'empilement perdue en élargissant le ruban de faute. Dans le bilan d'énergie déterminant la largeur de dissociation, il serait nécessaire en toute rigueur, de tenir compte des variations des énergies électroniques de coeur lorsqu'on passe de la configuration non dissociée à la configuration dissociée.

Une dislocation  $60^\circ$  se dissocie en une partielle à  $90^\circ$  et une partielle à  $30^\circ$ , une dislocation vis se dissocie en deux partielles à  $30^\circ$ . Dans les modèles géométriques établis, une partielle à  $90^\circ$  possède deux rangées de liaisons pendantes se faisant face, décalées l'une par rapport à l'autre de  $b/2$  (Figure IV-1 a et b) ; le coeur de la partielle à  $30^\circ$  ne contient qu'une orbitale pendante par distance  $b$  (Figure IV-2 a et b). Ces configurations ne sont pas les seules possibles et différents auteurs en ont imaginé d'autres dans lesquelles les liaisons pendantes ont disparu - partiellement ou totalement - par reconstruction (Figure IV-1 c et 2 c).

La reconstruction intervient par un déplacement approprié des atomes de coeur de manière que les orbitales pendantes proches puissent reformer des liaisons covalentes. Ces reconstructions seront possibles uniquement si l'énergie nécessaire pour déformer le coeur est compensé par un gain d'énergie électronique. En conséquence, le travail théorique de détermination des états localisés associés aux partielles nécessite de minimiser l'énergie totale du système. Si une telle reconstruction des états pendants du coeur est envisageable dans les covalents, elle semble moins probable dans les composés III-V où, à cause de l'ionicté, le couplage entre deux orbitales pendantes du coeur est peu favorable à la formation d'une liaison.

Il faut également noter que la dislocation n'est pas, comme nous l'avons supposé jusqu'à maintenant, une structure périodique idéale puisque la ligne n'est jamais parfaitement rectiligne et qu'elle présente, sur toute sa longueur, des décrochements, des crans, des constriction etc..., dont nous n'avons pas tenu compte. La dislocation correspond, dans la réalité, à un

défaut très complexe auquel est probablement associé tout un ensemble de niveaux dans la bande interdite. Cependant, nous établissons, dans ce qui suit, la statistique d'occupation des niveaux de dislocations en supposant l'existence :

- pour une dislocation  $60^\circ$  d'une seule bande, étroite partiellement remplie et localisée en  $E_D$ ,
- pour une dislocation vis, de deux bandes étroites, l'une pleine et l'autre vide.

Cette simplification n'a d'autre but que de donner une image du comportement électronique du défaut et, en particulier, de discuter de l'action intrinsèque des dislocations sur les propriétés de transport.

## IV-2. STATISTIQUE D'OCCUPATION DES NIVEAUX

### IV-2.1. Fondements du modèle théorique.

Le principe de calcul, désormais classique, du taux d'occupation des niveaux de dislocations repose sur les idées de base suivantes, déjà formulées par Read en 1954 [4] .

- le piégeage des porteurs libres par les niveaux profonds associés aux dislocations entraîne l'apparition d'un potentiel électrostatique  $V(r)$  qui modifie l'ensemble des états électroniques du cristal. Au premier ordre on admet que la valeur moyenne de la perturbation créée par le défaut est la même pour tous les états cristallins, provoquant ainsi, localement, un déplacement rigide du spectre d'énergie du cristal. Ce modèle est illustré sur la figure IV-3 dans le cas d'une dislocation neutre (a) et négativement chargée (b).

- les dislocations étant des défauts linéaires, la proximité et la périodicité des sites le long de la ligne implique que les porteurs piégés interagissent électrostatiquement, augmentant ainsi l'énergie libre de la

configuration d'un terme  $W(n_t)$  où  $n_t$  est le nombre de porteurs piégés. A cause de ce terme d'interaction, la statistique de Fermi définissant le taux d'occupation des états d'énergie associés aux dislocations n'est plus simplement fonction du niveau  $E_D^0$  de la dislocation neutre mais devient fonction d'un niveau effectif  $E_D^*$  dépendant explicitement de la charge excédentaire portée par la dislocation. La dépendance de  $E_D^*$  avec  $n_t$ , de la forme :

$$E_D^*(n_t) = E_D^0 + \frac{\partial W(n_t)}{\partial n_t}$$

défini le décalage rigide que subit localement, au coeur de la dislocation, le spectre d'énergie du cristal.

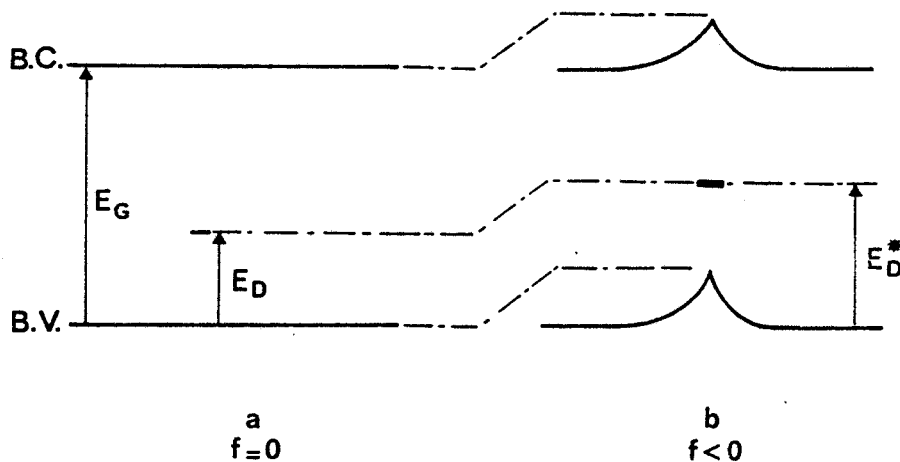


Figure IV-3 : *Modèle schématique de la structure de bandes d'énergie au voisinage d'une dislocation.*

*a) cas d'une dislocation neutre*

*b) cas d'une dislocation chargée négativement.*

#### IV-2.2. Mécanismes d'écrantage de la dislocation

L'écrantage de la ligne chargée, nécessaire pour rendre finie l'énergie d'interaction électrostatique, peut être réalisé, soit par une redistribution

des porteurs libres au voisinage de la dislocation chargée soit par une modification locale du taux d'ionisation des impuretés. Nous rappelons d'abord brièvement les différentes solutions qui ont été proposées puis nous montrons que le formalisme de la fonction diélectrique apporte une réponse simple au problème posé.

Dans l'analyse de Read, l'écrantage est assuré par des impuretés ionisées situées à l'intérieur d'un cylindre axé sur la dislocation [4]. Le rayon de ce cylindre est déterminé par la condition de neutralité :

$$\pi R^2 \cdot (N_D - N_A) = \frac{n_t}{D}$$

$N_A$  et  $N_D$  sont les concentrations d'impuretés de type donneur et accepteur dans le matériau.

$n_t/D$  est le nombre d'électrons piégés par unité de longueur de dislocation.

Pour Labusch et Schröter, la redistribution des porteurs libres qui permet d'écranter la dislocation chargée se fait dans un cylindre de rayon  $R = \lambda_D$  où  $\lambda_D$  est la longueur d'écrantage de Debye [5].

Les solutions analytiques pour le décalage rigide des bandes d'énergie au coeur de la dislocation sont très voisines dans les deux approches mais leurs conditions d'application ne le sont pas. L'écrantage de Debye-Hückel correspond à une forme linéarisée de la variation locale de la densité de porteurs libres au voisinage de la dislocation et impose que le potentiel électrostatique  $V(r)$  soit à la fois petit devant  $KT$  et lentement variable dans l'espace. Cette restriction, que nous retrouverons en appliquant le formalisme de la fonction diélectrique, constitue une difficulté d'application de la méthode puisqu'elle nécessite, en toute rigueur, de connaître la valeur de  $V(r)$  pour en entreprendre le calcul. Le modèle de Read s'applique, au contraire, au cas d'un potentiel  $V(r) > KT$  mais le choix d'un écrantage dû uniquement à une extra ionisation des impuretés au voisinage du défaut restreint son application au domaine des très basses températures pour lesquelles la densité de porteurs libres est négligeable.



Le formalisme de la fonction diélectrique, que nous présentons maintenant permet, en principe, de traiter correctement l'écrantage de toute distribution de charge.

Si on admet une réponse linéaire du cristal à une perturbation extérieure, le potentiel extérieur et le potentiel total sont, dans l'espace réciproque, reliés par :

$$V_T(\bar{q}, \omega) = \frac{V_{\text{ext.}}(\bar{q}, \omega)}{\epsilon_L \chi_T(\bar{q}, \omega)}$$

La constante diélectrique macroscopique  $\epsilon_L$  représente la contribution du réseau à la réponse diélectrique totale (transitions électroniques interbandes, phonons...),  $\chi_T(\bar{q}, \omega)$  est la fonction diélectrique réduite caractérisant le seul écrantage par les porteurs libres.

L'énergie électrostatique  $W$  d'une distribution de charge  $\rho_T(\bar{r}, t)$  est définie par :

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2} \int \rho_T(\bar{r}, t) V_T(\bar{r}, t) d^3r dt \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^4} \int \rho_T(\bar{q}, \omega) V_T(\bar{q}, \omega) d^3q d\omega \end{aligned}$$

soit encore, en utilisant la relation de Poisson entre la charge et le potentiel

$$W = \frac{1}{2(2\pi)^4 \epsilon_0 \epsilon_L} \int \frac{|\rho_{\text{ext.}}(\bar{q}, \omega)|^2}{q^2 |\chi_T(\bar{q}, \omega)|^2} d^3q d\omega$$

La possibilité d'évaluer correctement l'énergie  $W$  est liée à la détermination de la fonction diélectrique partielle  $\chi_T(\vec{q}, \omega)$ . La réponse diélectrique d'un gaz non dégénéré à une perturbation statique faiblement localisée ( $q$  petit) telle que  $V_T(r) \ll KT$  est donnée par l'expression simple suivante :

$$\begin{aligned}\chi_T(\vec{q}, 0) &= 1 + \frac{n e^2}{\epsilon_0 \epsilon_L KT q^2} \\ &= 1 + \frac{k_{DH}^2}{q^2}\end{aligned}$$

Cette expression établie en utilisant le formalisme général de la fonction diélectrique est, bien évidemment la même que celle obtenue par un raisonnement semi-classique dans l'approximation de Debye-Hückel puisqu'elle est soumise aux mêmes conditions restrictives sur le potentiel  $V(r)$ .

En utilisant le formalisme de la fonction diélectrique, Masut, Penchina et Farvacque ont évalué l'énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés le long de la ligne de dislocation [6]; celle-ci est égale à

$$W = \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left( \text{Log} \frac{\lambda_G}{b} - \frac{1}{2} \right)$$

$\lambda_G$  est une longueur d'écrantage généralisée prenant en compte à la fois l'écrantage par les porteurs libres et par les impuretés ionisées. Dans le cas où les impuretés sont, soit toutes neutres, soit toutes ionisées, la longueur d'écrantage  $\lambda_G$  se réduit à la longueur d'écrantage de Debye - Hückel.

IV-2.3. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations

- Cas d'une dislocation 60°.

Nous modélisons l'effet de piégeage des porteurs libres par une dislocation 60° en lui associant un niveau unique, partiellement rempli d'énergie  $E_D^0$ . Pour une longueur de dislocation  $D$ , le nombre d'états électroniques d'énergie  $E_D^0$  est égal à  $2D/b$  ; le taux d'occupation de ces états est égal à  $\zeta$  lorsque la dislocation est neutre\*. Lorsque la dislocation piège  $n_t$  électrons, l'énergie libre augmente de la quantité  $n_t (E_D^0 - E_F)$ , du terme d'interaction électrostatique  $W$  et d'un terme d'entropie de configuration puisque le nombre d'électrons à placer sur les  $2D/b$  états disponibles a augmenté de  $n_t$ . L'expression de  $W$  étant connue, la statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations est établie en minimisant la variation d'énergie libre du cristal par rapport au nombre de porteurs piégés [4,6]. On obtient :

$$n_t = \frac{2D}{b} \left[ \frac{1}{1 + \exp \frac{E_D^* - E_F}{kT}} - \zeta \right]$$

où le niveau  $E_D^*$  associé à la dislocation chargée est donné par :

$$E_D^* = E_D^0 + \frac{\partial W}{\partial n_t} = E_D^0 + \frac{n_t e^2}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left[ \text{Log} \frac{\lambda G}{b} - \frac{1}{2} \right]$$

\* Dans les semiconducteurs covalents, le taux d'occupation  $\zeta$  est égal à 0,5 ; dans les composés III-V, il est inférieur ou supérieur à 0,5 suivant la nature des orbitales pendantes dans le coeur de la dislocation.

Le niveau de Fermi et le niveau  $E_D^*$  sont obtenus numériquement en résolvant l'équation de neutralité du cristal.

- Cas d'une dislocation vis

Si on associe à la dislocation vis un ensemble de deux niveaux, l'un vide d'énergie  $E_1$ , l'autre plein d'énergie  $E_2$ , il correspond à chacun de ces niveaux un terme d'entropie de configuration. Par contre, les charges piégées par la dislocation étant toutes situées sur la même ligne, le terme d'interaction électrostatique  $W$  ne dépend que de la charge totale piégée, indépendamment de sa répartition suivant les niveaux  $E_1$  et  $E_2$ .

En minimisant, comme pour la dislocation  $60^\circ$ , l'énergie libre du cristal par rapport au nombre de porteurs piégés on trouve :

$$n_{1,2} = \frac{2D/b}{1 + \exp \frac{E_{1,2}^* - E_F}{KT}}$$

avec  $E_{1,2}^* = E_{1,2} + \frac{\partial W}{\partial n_t}$

$n_1$  et  $n_2$  sont les nombres d'électrons piégés sur les niveaux  $E_1$  et  $E_2$ .

Le modèle théorique que nous avons utilisé pour discuter nos résultats expérimentaux est, pour l'essentiel, celui qui vient d'être exposés. La démarche que nous avons suivie pour nous assurer de sa faisabilité, les modifications ou ajouts que nous lui avons apporté sont exposés dans le paragraphe suivant.

### IV-3. CRITIQUES DU MODELE PROPOSE

#### IV-3.1. Validité de l'approximation de Debye-Hückel

Des calculs effectués dans l'approximation de Debye-Hückel conduisent à des valeurs du décalage rigide des bandes au coeur de la dislocation dont l'ordre de grandeur ne satisfait pas à la condition  $V_T(r) \ll KT$ , remettant ainsi en cause la validité même du modèle.

La perturbation électrostatique due à la charge portée par la dislocation étant grande, nous avons repris l'idée de Read d'un cylindre de charge d'espace axé sur la dislocation mais en l'appliquant au cas d'un écrantage par les porteurs libres. Dans ce nouveau modèle, ou approximation de la zone déplétée, l'énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés le long de ligne de dislocation est donnée par (voir annexe A)

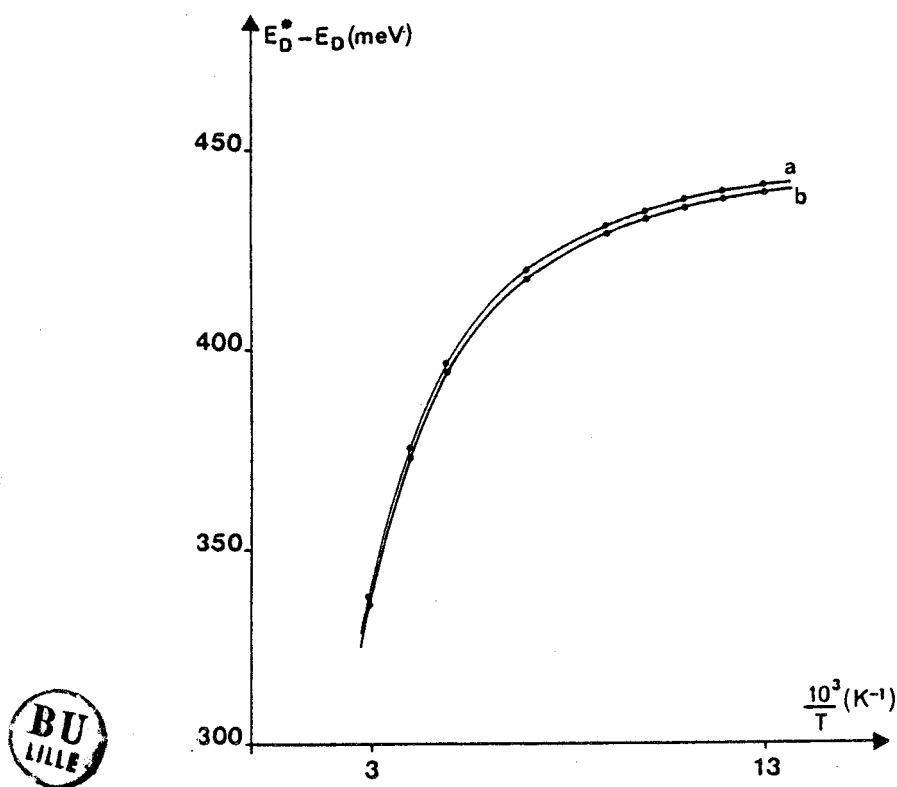
$$W = \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left( \text{Log } \frac{R}{b} - 0,866 \right)$$

où le rayon  $R$  du cylindre de charge d'espace est déterminé par la condition de neutralité

$$\pi R^2 n = \frac{n_t e}{D}$$

La figure IV-4 présente l'évolution, en fonction de la température, du décalage rigide des bandes calculées, pour GaAs, dans l'approximation de Debye-Hückel et dans l'approximation de la zone déplétée. Il est très surprenant de constater que les résultats obtenus dans les deux cas sont très proches alors que les deux modèles correspondent à deux situations limites opposées  $V_T(r) \ll KT$  et  $V_T(r) \gg KT$ . En fait, la seule information donnée par le calcul concerne le potentiel  $V_T(r=0)$  au coeur de la dislocation ; que localement la condition  $V_T(r) \ll KT$  n'y soit pas vérifiée, n'implique

pas qu'il en soit de même en tout autre point. Si le potentiel écranté n'est grand devant  $KT$  que dans une très petite région de l'espace entourant la dislocation, l'approximation de Debye-Hückel peut conduire à des résultats corrects même si ses conditions d'application ne sont pas vérifiées en tout point.



*Figure IV-4 : Décalage rigide des bandes d'énergie du cristal au voisinage de la dislocation. Cas de l'arséniure de gallium de type n.  
a) écrantage de type Debye-Hückel  
b) approximation de la zone déplétée.*

Un moyen de tester réellement la validité des modèles proposés consiste à appliquer le formalisme général de la fonction diélectrique en ne se limitant pas aux valeurs de  $q$  petites. L'approximation de Debye-Hückel permet

de décrire la réponse diélectrique d'un gaz de porteurs libres à une perturbation lentement variable dans l'espace ; elle correspond à un développement au premier ordre en  $q$  ne nécessitant pas d'évaluer, dans l'expression de la fonction diélectrique de Lindhart, le terme de structure de bandes [ 7 ]. En effet, celui-ci est, au premier ordre, égal à 1, ce qui revient à approximer les états électroniques cristallins à des ondes planes.

Pour calculer la réponse d'un gaz de porteurs libres à une perturbation quelconque (spectre de valeurs de  $q$  large), il est nécessaire d'évaluer ce terme de structure de bandes. Farvacque a montré que dans l'approximation de la masse effective, la correction à l'énergie d'interaction des porteurs piégés sur la dislocation est, jusqu'à 77 K, strictement négligeable dans GaAs, de l'ordre de quelques pour cent dans InSb [ 8 ].

L'approximation de Debye-Hückel constitue, de ce fait, un outil de calcul bien adapté au problème de l'écrantage d'une dislocation chargée et nous l'avons systématiquement utilisée pour discuter nos résultats expérimentaux.

#### IV-3.2. Déplacement non rigide des bandes d'énergie

Les états électroniques associés aux dislocations correspondent à des combinaisons linéaires d'orbitales pendantes dans le coeur dont l'énergie dépend de la charge portée par l'atome [ 3 ]. Si la dislocation piège des porteurs libres, la charge des atomes de coeur est modifiée, entraînant une variation de l'énergie propre de chacune des orbitales pendantes. Il en résulte un déplacement du niveau d'énergie associé à la dislocation, relativement aux bandes d'énergie du cristal. Ce déplacement n'est pas de même nature que le déplacement rigide de l'ensemble du spectre d'énergie proposé par Read et décrivant simplement l'effet de l'énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés ; il tire au contraire son origine d'une interaction intraatomique et correspond à un déplacement non rigide dont l'ordre de grandeur est donné par

$$\Delta E_D = \frac{\alpha n_t b}{\epsilon_L D}$$

où  $n_t b/D$  est la charge excédentaire par site atomique dans le coeur de la dislocation,  $\epsilon_L$  la constante diélectrique du matériau et  $\alpha$  un terme d'énergie d'interaction intraatomique.

Ces arguments, dûs à Veth et Lannoo [9] ont permis à Farvacque et Vignaud d'interpréter une variation du seuil d'absorption optique en fonction du taux de déformation dans des échantillons d'arséniure de gallium [10]

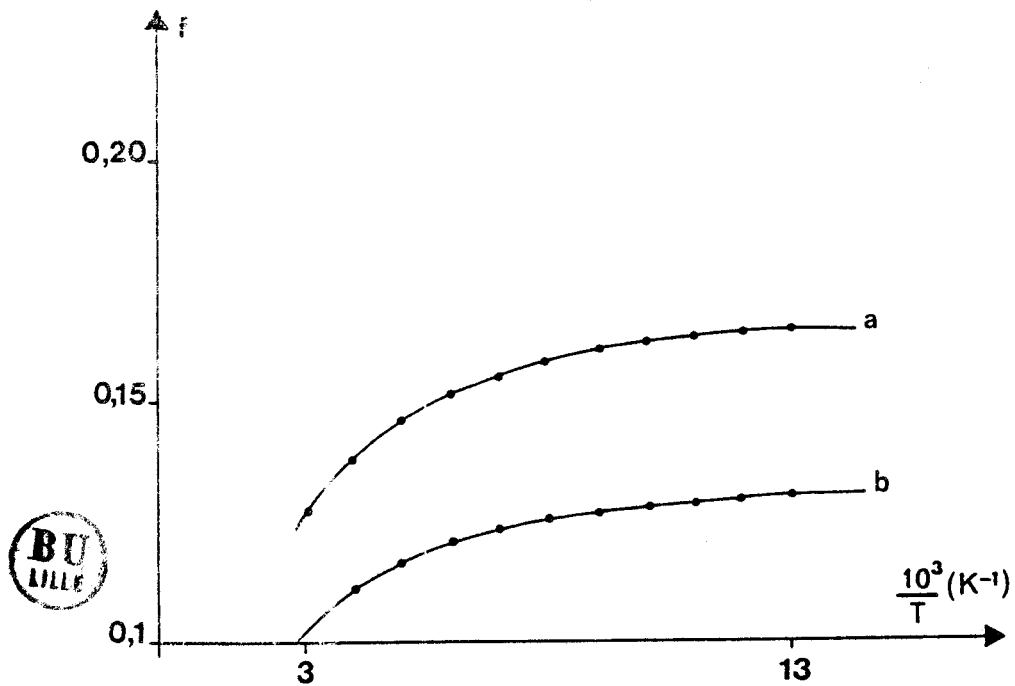


Figure IV-5 : Taux d'occupation de la dislocation  $60^\circ$  dans l'arséniure de gallium de type n.

a) cas d'un décalage rigide des bandes

b) cas d'un décalage non rigide des bandes.



Le niveau effectif associé à la dislocation s'écrit maintenant :

$$E_D^* = E_D^0 + \frac{\partial W(n_t)}{\partial n_t} + \frac{\alpha n_t b}{\epsilon_L D}$$

L'introduction d'un déplacement non rigide proportionnel au taux d'occupation de la dislocation dans l'expression de  $E_D^*$  a pour effet de rendre plus difficile le piégeage des porteurs libres. Un exemple en est donné sur la figure IV-5 où le taux d'occupation de la dislocation a été calculé en fonction de la température dans l'hypothèse du seul décalage rigide des bandes et dans celle d'un décalage rigide et non rigide.

#### IV-3.3. Délocalisation des états électroniques

La statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations, telle qu'elle a été établie précédemment, suppose que les états électroniques sont délocalisés le long de la ligne et strictement localisés perpendiculairement à la ligne. Permettre une délocalisation partielle revient à diminuer l'énergie d'interaction électrostatique et favorise le piégeage des porteurs libres par les dislocations. L'énergie d'interaction  $W(n_t)$  a été réévaluée pour une densité de charges  $\rho(r)$  par site le long de la ligne variant avec la distance  $r$  à la dislocation comme

$$\frac{\exp - r/r_0}{r}$$

Le paramètre  $r_0$  est la longueur de délocalisation.

Avec cette forme de  $\rho(r)$ ,  $W(n_t)$  est donnée par [11] :

$$W(n_t, r_0) = \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \frac{x^4}{(x^2 - 1)^2} \left\{ \frac{x^2 + 1}{x^2 - 1} \operatorname{Log} \left[ \frac{1 - \exp - k_G b x}{1 - \exp - k_G b} \right] \right.$$

$$- \frac{1}{2} \frac{k_G b \exp - k_G b}{1 - \exp - k_G b} - \frac{1}{2} \frac{k_G b x \exp - k_G b x}{1 - \exp - k_G b x}$$

$$\left. - \frac{k_G b}{4 x^2 (x^2 - 1)^2} (3 x^7 - 6 x^6 - 2 x^5 + 9 x^4 - x^3 - 4 x^2 + 1) \right\}$$

avec  $x = (k_G r_0)^{-1}$

Nous reviendrons au cours de la discussion des résultats expérimentaux sur la nécessité d'introduire une délocalisation pour rendre compte de l'inversion de l'effet Hall dans des échantillons d'antimoine d'indium de type n déformés en torsion. Dans tous les cas, le choix de la longueur de délocalisation des états électroniques doit rester cohérent avec leur position dans la bande interdite. Plus le niveau associé à la dislocation sera profond, moins la délocalisation pourra être évoquée pour justifier un résultat expérimental.

Pour relier les caractéristiques des dislocations à des quantités mesurables, nous disposons d'une statistique d'occupation des niveaux de dislocations qui, si on la compare au cas des défauts ponctuels, présente un caractère complexe. Nous avons tenté de tenir compte, dans le formalisme de la fonction diélectrique des différents paramètres pouvant influencer sur la valeur du niveau effectif associé à la dislocation (énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés, délocalisation perpendiculaire à la ligne, charge portée par les atomes de coeur) et nous nous sommes efforcés de bien définir les limites de validité du modèle. Dans le domaine de température abordé expérimentalement, nous disposons donc d'un moyen de calcul fiable pour simuler le piégeage des porteurs libres par les dislocations.

#### IV-4. MOBILITE INDUITE PAR LES DISLOCATIONS

La conductivité et l'effet Hall mesurés dans les échantillons déformés montrent que les dislocations ne jouent pas simplement le rôle de pièges pour les porteurs libres mais qu'elles agissent également comme des centres diffuseurs affectant la mobilité des porteurs.

##### IV-4.1. Origines de la réduction de mobilité

La mobilité réciproque  $\mu^{-1}$  induite par les dislocations est obtenue à partir des mesures faites sur un échantillon de référence et sur un échantillon déformé en appliquant la règle de Matthiesen

$$\Delta\mu^{-1} = \mu_{\text{Def.}}^{-1} - \mu_{\text{Ref.}}^{-1} = \mu_{\text{Dislo.}}^{-1}$$

Cette relation suppose que, dans les échantillons déformés, la contribution à la mobilité réciproque de tous les effets de diffusion qui pré-existaient dans le cristal parfait (phonons, impuretés...) n'a pas été modifiée par la déformation. En réalité, si les dislocations piègent des porteurs libres, cette contribution peut varier faiblement à cause d'une modification des possibilités d'écrantage. Expérimentalement, la mobilité réciproque dans les échantillons déformés est grande devant celle de la référence et la quantité  $\Delta\mu^{-1}$  représente bien une mesure de la mobilité induite par les dislocations. Le calcul théorique de la mobilité réciproque a donc été limité aux seuls mécanismes de diffusion associés aux dislocations.

Les différents mécanismes susceptibles de modifier la mobilité des porteurs libres se classent en deux catégories :

\* les effets de coeur

Ils correspondent à la diffusion des porteurs libres par le potentiel coulombien des charges éventuellement piégées sur les niveaux des dislocations.

\* les effets liés au champ de déformation à longue distance  
Ils se classent en deux catégories :

- le déplacement des atomes dans le champ de déformation des dislocations modifie le potentiel cristallin qui, devenu localement apériodique, joue le rôle d'un potentiel diffuseur,

- la déformation propre des ions provoque, dans les matériaux non centrosymétriques, l'apparition d'une polarisation induite que l'on peut décrire, de façon phénoménologique, à l'aide du tenseur piezoélectrique.

Avant d'établir l'expression des potentiels associés à chacun de ces mécanismes de diffusion, nous allons présenter brièvement la méthode de l'énergie perdue qui nous a servi de cadre pour le calcul des mobilités.

#### IV-4.2. Méthode de l'énergie perdue.

Cette méthode, initialement proposée par Calkin et Nicholson [ 12 ] dans le cas des métaux consiste à assimiler intuitivement l'énergie joule créée par le mouvement des porteurs libres à travers une distribution de centres diffuseurs fixes à l'énergie perdue par le mouvement réciproque des centres diffuseurs à travers un gaz fixe de porteurs libres.

Par unité de volume du cristal on obtient :

$$\frac{1}{\Omega} \frac{dW}{dt} = \frac{j^2}{\sigma} = \frac{ne v^2}{\mu}$$

A un potentiel diffuseur  $V_{diff.}(\vec{r}, t)$  est associé une distribution de charges  $\rho_{diff.}(\vec{r}, t)$  donnée par l'équation de Poisson

$$\Delta V_{diff.}(\vec{r}, t) = - \frac{\rho_{diff.}(\vec{r}, t)}{\epsilon_0 \epsilon_L}$$

La réponse diélectrique du gaz de porteurs libres au potentiel perturbateur crée un champ électrique induit dans lequel la distribution de charges en mouvement  $\rho_{diff.}(\vec{r}, t)$  travaille. L'énergie perdue est simplement égale au travail dépensé par les charges en mouvement dans le champ induit soit :

$$\frac{dW}{dt} = - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot E_{ind}(\vec{r}, t) \rho_{diff.}(\vec{r}, t) d^3 r$$

La fonction diélectrique permet le calcul du champ induit à partir de l'expression du potentiel diffuseur non écrané et la relation précédente s'écrit sous la forme :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{-i \epsilon_0 \epsilon_L}{(2\pi)^3} \int (\vec{q} \cdot \vec{v}) q^2 |V_{diff.}(\vec{q}, \omega)|^2 \left( \frac{1}{\chi_T(q, \omega)} - 1 \right) d^3 q$$

Si on se restreint au domaine de validité de la loi d'Ohm ( $\omega \rightarrow 0$ ) l'énergie perdue qui est en fait la partie réelle de l'expression précédente devient :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{-\epsilon_0 \epsilon_L}{(2\pi)^3} \int (\vec{q} \cdot \vec{v})^2 q^2 |V_{diff.}(\vec{q}, \omega)|^2 \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} (\text{Im} \cdot \chi_T^{-1}(q, \omega)) \right]_{\omega=0} d^3 q$$

Dans l'approximation de Debye-Hückel on a [13] :

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \omega} (\text{Im} \cdot \chi_T^{-1}(q, \omega)) \right]_{\omega=0} = \frac{-e^2 m^{1/2} \pi^{1/2} n \exp - \frac{\hbar^2 q^2}{8 m KT}}{2^{1/2} \epsilon_0 \epsilon_L q^3 (KT)^{3/2} \left( 1 + \frac{k_{DH}^2}{q^2} \right)^2}$$

Le formalisme de la fonction diélectrique permet ainsi d'évaluer la mobilité des porteurs libres sans introduire la notion de temps de relaxation. Notons que ce type de calcul tient compte de l'écrantage dynamique des centres diffuseurs par les porteurs libres, ce qui n'est jamais considéré dans les calculs effectués à partir de l'équation de Boltzmann. Un article récent, [14], généralise la méthode de l'énergie perdue au cas de systèmes multiporteurs. Ce travail montre entre autre que l'équivalence intuitive entre l'énergie joule et l'énergie perdue est en fait rigoureuse et découle des premiers principes.

La difficulté d'application de la méthode, et par conséquent la validité du calcul de mobilité, est liée, d'une part à la détermination du potentiel associé à un centre diffuseur, d'autre part, comme pour la statistique d'occupation des niveaux, à la description de la réponse diélectrique. Les arguments développés précédemment pour justifier l'approximation de Debye restent valables ici et ne seront donc pas repris.

#### IV-4.3. Le potentiel de diffusion piezoélectrique

Les semiconducteurs  $A_{III} - B_V$  présentent, par rapport aux semiconducteurs élémentaires - silicium, germanium - la particularité intéressante d'être des matériaux piezoélectriques. L'application d'une contrainte, entraînant une déformation propre des ions, fait apparaître une polarisation induite à laquelle est associée un potentiel  $V(r)$ . Ce potentiel piezoélectrique est à l'origine d'une diffusion possible des porteurs libres.

Dans l'approximation linéaire de Voigt, le couplage piezoélectrique est représenté par le système d'équations

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\sigma} = \bar{C} : \bar{\epsilon} + \bar{e} \cdot \bar{E} \quad (a) \\ \bar{D} = \bar{e} : \bar{\epsilon} + \bar{\chi} \cdot \bar{E} \quad (b) \end{array} \right.$$

qui relie les tenseurs  $\bar{\sigma}$  et  $\bar{\epsilon}$  des champs de contrainte et de déformation au champ électrique  $\bar{E}$  et à l'excitation électrique  $\bar{D}$ .  
 $\bar{C}$ ,  $\bar{e}$  et  $\bar{\chi}$  sont respectivement les tenseurs élastique, piezoélectrique et diélectrique du matériau.

Il est donc à priori impossible de résoudre le champ de déformation d'une dislocation sans tenir compte de l'effet piezoélectrique et par là des possibilités d'écrantage du matériau exprimée dans  $\bar{\chi}$ . En fait, Saada [15] puis Faivre et Saada [16] ont montré que le couplage piezoélectrique n'affecte pratiquement pas le champ de déformation qui est alors déterminé, en l'absence de tout champ électrique, à partir de relation

$$\bar{\sigma} = \bar{C} : \bar{\epsilon}$$

Connaissant le champ de déformation, il reste à calculer le potentiel piezoélectrique au moyen de la relation (b). Cette relation comporte un terme de polarisation induite par la contrainte  $\bar{P} = \bar{e} : \bar{\epsilon}$  et un terme représentant la réponse diélectrique du cristal. L'utilisation de la méthode de l'énergie perdue, qui tient compte de manière autocohérente de l'écrantage dynamique des potentiels diffuseurs par les porteurs libres nécessite de connaître l'expression des potentiels diffuseurs non écrantés. Il suffit alors de déterminer la polarisation en l'absence de la réponse diélectrique du cristal puisqu'il en sera tenu compte ensuite par l'intermédiaire de la fonction diélectrique.

La distribution de charge non écrantée  $\rho_{\text{piezo.}}(\vec{r})$  est donnée par :

$$\rho_{\text{piezo.}}(\vec{r}) = \text{Div. } \bar{P}(\vec{r})$$

On en déduit la transformée de Fourier du potentiel de diffusion piezoélectrique non écranté par l'intermédiaire de l'équation de Poisson. Ce calcul conduit à l'expression suivante :

$$V_{\text{piezo.}}(\vec{q}) = \frac{2 \pi b_c e_{14}}{\epsilon_0 \epsilon_L \sqrt{3}} F(\theta) \frac{\delta(q_z)}{q^2}$$

où  $b_c$  est la composante coin du vecteur de Burgers  
 $e_{14}$  est la constante piezoélectrique  
 $F(\theta)$  décrit la dépendance angulaire du potentiel dans un plan  
perpendiculaire à la ligne de dislocation.

Nous avons calculé le potentiel piezoélectrique dans l'approximation du cristal élastiquement isotrope et en tenant compte de l'anisotropie élastique |17| (voir annexe B). La similitude des résultats obtenus dans chaque cas permet de conclure à la validité de l'approximation du cristal élastiquement isotrope.

Dans cette approximation,  $F(\theta)$  a l'expression analytique suivante :

$$F_I(\theta) = \frac{\sin 4\theta}{4} + \frac{5}{4\sqrt{2}} \cos 4\theta - \frac{(1-2\nu)}{2} \sin 2\theta + \frac{(\nu+1)}{\sqrt{2}} \cos 2\theta$$

Il est important de remarquer que l'expression de  $V_{\text{piezo.}}(\vec{r})$  est fonction de la composante coin du vecteur de Burgers. Ceci implique que les dislocations à caractère vis pur n'introduisent pas de potentiel piezoélectrique. Les échantillons déformés en torsion et dont la sous-structure est essentiellement composée de dislocations vis, ne peuvent donc présenter un effet de diffusion piezoélectrique que par l'intermédiaire des segments de type coin qu'ils contiennent.

#### IV-4.4. Potentiel de diffusion par effet de ligne chargée

La détermination du potentiel de diffusion des porteurs libres par effet de ligne chargée est immédiate.

La distribution de charge associée aux  $n_t$  électrons piégés par unité de volume, sur des dislocations alignées suivant l'axe  $z$  est :

$$\rho(\vec{r}) = - \frac{n_t e}{D} \delta(x) \delta(y)$$

et l'expression du potentiel non écrané est, dans l'espace réciproque, donnée par :



$$V_{\text{charge}}(\bar{q}) = - \frac{2\pi \delta(q_z)}{\epsilon_0 \epsilon_L q^2} \frac{n_t e}{D}$$

#### IV-4.5. Potentiel de déformation

Le potentiel de déformation, qui tire son origine des variations locales que subissent les paramètres cristallins dans le matériau déformé, entraîne également une diffusion des porteurs libres. Son expression, établie initialement par Dexter et Seitz [18] est donnée par :

$$V_{\text{def.}}(\bar{q}) = \frac{i E_1 b \sin \theta}{2 \epsilon_L q}$$

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

Il s'agit d'un terme imaginaire pur et donc en opposition de phase avec les expressions, dans l'espace réciproque, des potentiels électrostatique et piezoélectrique. Les calculs numériques de la mobilité associée aux dislocations montrent que, dans les composés III-V, l'effet de ce potentiel de déformation est toujours extrêmement faible devant l'effet piezoélectrique et l'effet de ligne chargée.

Dans les semiconducteurs covalents pour lesquels il n'existe pas de diffusion par effet piezoélectrique, le seul potentiel diffuseur lorsque la dislocation est neutre est le potentiel de déformation [19]. La mobilité expérimentale dans ce cas devrait correspondre à la mobilité calculée à partir du potentiel de déformation de Dexter et Seitz. En fait, la valeur théorique de la mobilité est toujours très supérieure à la valeur expérimentale, remettant en cause la validité même de l'expression proposée. Dans une étude de la mobilité associée aux dislocations dans le tellure, Farvacque arrive également à la conclusion que le potentiel de déformation de Dexter et Seitz est strictement négligeable [20].

En montrant que le potentiel de déformation tire son origine des champs de déformation hétérogène dans le cristal, Farvacque a critiqué, non seule-

ment l'expression initiale de Dexter et Seitz mais également sa forme modifiée par Bonch Bruevich pour tenir compte de la partie antisymétrique du tenseur de déformation |21|. Dans cette nouvelle formulation, Farvacque établit une expression du potentiel de déformation qui est le produit de convolution du gradient du pseudo potentiel atomique et du champ de déplacement

$$V_{\text{def.}}(\vec{r}) = - \sum_j \bar{\nabla} V_{\text{ps.at.}}(\vec{r} - \vec{R}_j) u(\vec{R}_j)$$

Le potentiel de diffusion en  $r$  dépend, sous cette forme, de l'état de déformation en tous points du cristal et ne peut pas se réduire simplement à l'expression  $V(\vec{r}) = E_1 \text{tr. } \epsilon(r)$  initialement par Dexter et Seitz.

L'expression correspondante dans l'espace réciproque du potentiel non écranté peut être approximée à

$$V_{\text{def.}}(\vec{q}) = \frac{-N}{(2\pi)^3} V_{\text{ps.at.}}(\vec{q}) \text{tr. } \epsilon(\vec{q})$$

où  $N$  est le nombre total d'atomes du cristal.

En choisissant comme représentation locale des pseudopotentiels atomiques un modèle de coeur vide (de rayon de coeur  $R$ ) dont la transformée de Fourier est :

$$V_{\text{ps.at.}}(\vec{q}) = \frac{Z_e}{\epsilon_0} \frac{\cos q R}{q^2}$$

le potentiel diffuseur associé au champ de déformation d'une dislocation coin est donnée par :

$$V_{\text{def.}}(\vec{q}) = \frac{i Z_e N b (1-2\nu) \cos q R \sin \theta \delta(q_z)}{4\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_L (1-\nu) q^3}$$

Il n'y a pas de potentiel de déformation associé aux dislocations vis.

IV-4.6. Mobilite induite par les dislocations

Le potentiel diffuseur total associé à une dislocation coin est de la forme :

$$V_{\text{diff.}}(\bar{q}) = \frac{2\pi \delta(q_z)}{\epsilon_0 \epsilon_L} \left\{ \frac{G(\theta)}{q^2} + \frac{i \cos qR}{q^3} H(\theta) \right\}$$

où  $G(\theta)$  et  $H(\theta)$  sont des fonctions indépendantes de  $\bar{q}$ .

Le premier terme, réel, représente la contribution des potentiels électrostatique et piezoélectrique, le second terme, imaginaire pur, celle du potentiel de déformation.

La présence de la fonction  $\delta(q_z)$  implique qu'il n'existe pas d'effet de diffusion lorsque le vecteur densité de courant est parallèle à la dislocation.

L'inverse de la mobilité électronique, calculée en utilisant la méthode de l'énergie perdue est donnée par :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{\pi^{1/2} m e^{1/2} D A(\xi) f_2(p)}{(2\pi)^2 2^{1/2} (\epsilon_0 \epsilon_L)^2 (KT)^{3/2} k_G} + \frac{Z^2 b^2 N^2 (1-2\nu)^2 m^{1/2} e^3 D (1+2 \sin^2 \xi) f_0(p,R)}{2^{9/2} \pi^{1/2} (2\pi)^6 (1-\nu)^2 (\epsilon_0 \epsilon_L)^2 (KT)^{3/2} k_G^3}$$

avec  $f_2(p) = \int_0^\infty \frac{x^2 \exp - p x^2}{(1+x^2)^2} dx$  et  $p = \frac{\hbar^2 k_G^2}{8 m KT}$

et

$$f_0(p) = \int_0^{\infty} \frac{\cos^2(k_G R_x) \exp - p x^2}{(1 + x^2)^2} dx$$

Les termes en  $\xi$  où  $\xi$  est l'angle entre la direction du courant et la composante coin du vecteur de Burgers, expriment l'anisotropie de la mobilité dans un plan perpendiculaire à la direction de la dislocation.

Le terme  $A(\xi)$  tient compte, par l'intermédiaire de  $|G(\theta)|^2$ , non seulement du potentiel piezoélectrique et du potentiel électrostatique mais également de leur couplage. Il est donc essentiel de traiter le problème de la diffusion globalement puisque l'effet de diffusion total ne se réduit pas à la somme des effets de diffusion individuels.

La valeur de  $\mu^{-1}$  peut être calculée numériquement si la statistique d'occupation des niveaux (donc  $k_G$  par l'intermédiaire de  $n$ ) est connue. De façon complémentaire, la détermination des mobilités des porteurs libres permet le calcul de la constante de Hall.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE IV

- [1] ALLAN G., LANNOO M., PECHEUR P.  
Electronic structure of crystal defects and disordered systems. Ed. de Physique (1980) 3 et 45 et 93.
  
- [2] FARVACQUE J.L., FERRE D.  
Rev. Phys. Appl. 15 (1980) 33.
  
- [3] FARVACQUE J.L., FERRE D., LENGART P.  
Inst. of physics. Conf. series 59 (1980) 389.
  
- [4] READ W.T.  
Phil. Mag. 45 (1954) 775.
  
- [5] LABUSCH R., SCHRÖTER W.  
Collective treatise on dislocations. Ed by FNR Nabarro  
Vol. 5 (1980) 127.
  
- [6] MASUT R., PENCHINA C.M., FARVACQUE J.L.  
J. Appl. Phys. 53, 7 (1982) 4864.
  
- [7] CHATTOPADHYAY D., QUEISSER H.J.  
Rev. Mod. Phys. 53 (1981) 745.
  
- [8] FARVACQUE J.L.  
Phys. Stat. Sol. (b) 134 (1986) 343.
  
- [9] VETH H., LANNO M.  
Phil. Mag. B 50 (1984) 93.
  
- [10] FARVACQUE J.L., VIGNAUD D.  
Thirteen Int. Conf. on defects in semiconductors. Kimerling  
L.C., Parsey J.M. (eds) 1985 (373).

- [11] FARVACQUE J.L., FERRE D., VIGNAUD D.  
Journal de Physique Colloque C<sub>4</sub> sup. au n° 9 44 (1983) 115
- [12] CALKIN M.G., NICHOLSON P.J.  
Rev. of Mod. Phys. 39 (1967) 361.
- [13] GERLACH E.  
Phys. Stat. Sol. (b) 61 (1974) K 97.
- [14] FARVACQUE J.L., VIGNAUD D.  
Phys. Rev. B 31, 2 (1985) 1041.
- [15] SAADA G.  
Phys. Stat. Sol. (b) 44 (1971) 717.
- [16] FAIVRE G., SAADA G.  
Phys. Stat. Sol. (b) 52 (1972) 127.
- [17] VIGNAUD D., FARVACQUE J.L., FERRE D.  
Phys. Stat. Sol. (b) 110 (1982) 601.
- [18] DEXTER D.L., SEITZ F.  
Phys. Rev. 86 (1952) 964.
- [19] SCHRÖTER W., LABUSCH R.  
Cours donné à l'école d'été d'Erice (Sicile) (1974).
- [20] FARVACQUE J.L., LENGART P.  
Phys. Stat. Sol. (b) 80 (1977) 361 et 433.
- [21] BONCH BRUEVICH V.L.  
Soviet Phys. Sol. State 3, 1 (1961) 34.



## CHAPITRE V

### COMPORTEMENT GÉNÉRAL DU MODÈLE THÉORIQUE



## CHAPITRE V

\*\*\*

### COMPORTEMENT GENERAL DU MODELE THEORIQUE

#### V-1. CONDITIONS D'EXPLOITATION DU MODELE - CHOIX DES PARAMETRES.

V-1.1. Caractéristiques du matériau de référence.

V-1.2. Taux d'occupation de la dislocation neutre.

#### V-2. APPLICATION DU MODELE AU MATERIAU DE TYPE n.

V-2.1. Evolution du taux d'occupation de la dislocation chargée.

V-2.2. Conditions de neutralité électrique de la dislocation.

V-2.3. Réduction de la mobilité des porteurs libres.

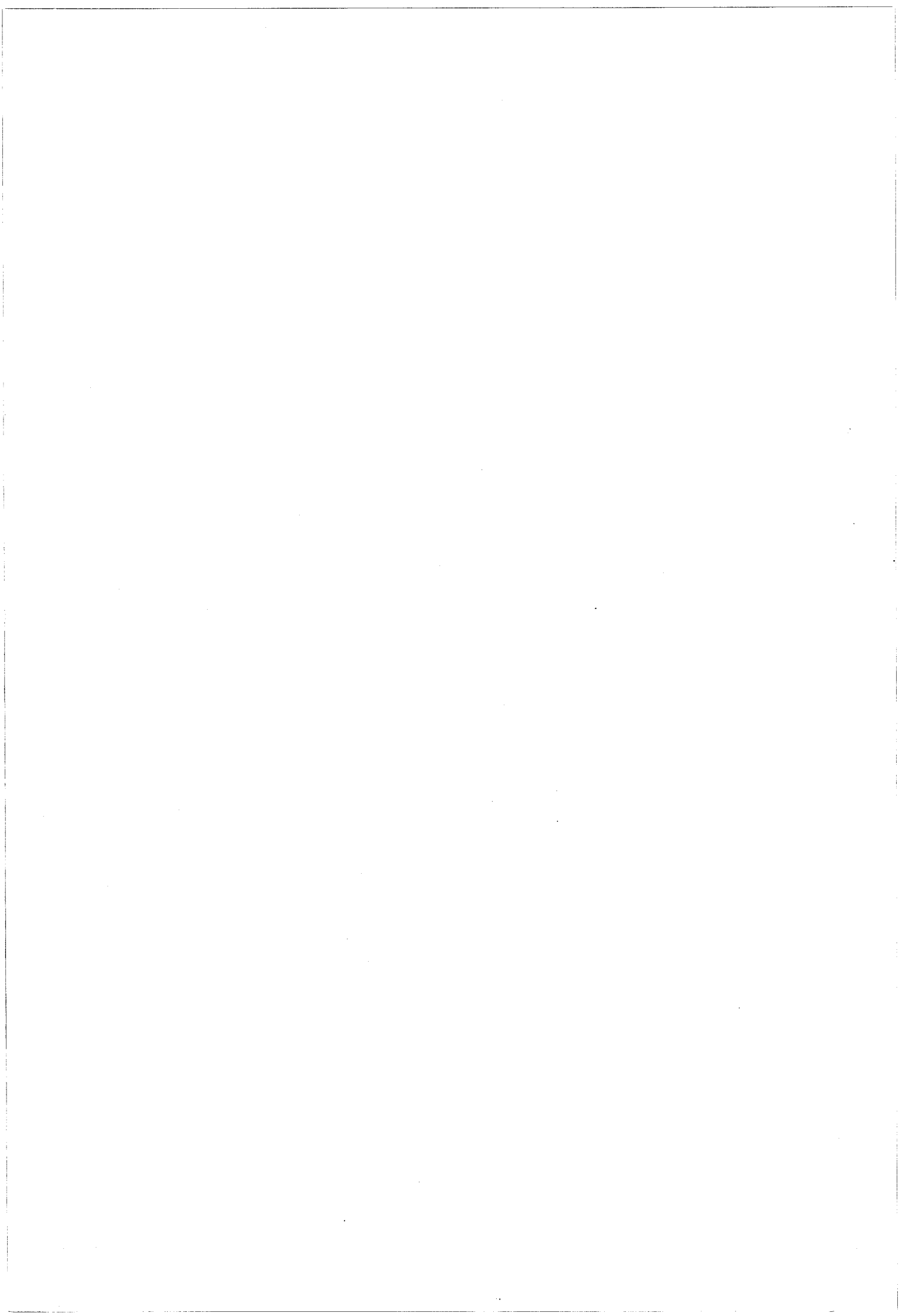
V-2.4. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations vis.

#### V-3. APPLICATION DU MODELE A D'AUTRES SITUATIONS PHYSIQUES.

V-3.1. Cas d'un matériau de type p.

V-3.2. Dissociation et reconstruction des dislocations

V-3.3. Délocalisation de la charge piégée par la dislocation.



## V-1. CONDITIONS D'EXPLOITATION DU MODELE - CHOIX DES PARAMETRES

### V-1.1. Caractéristiques du matériau de référence

La validité du modèle théorique élaboré pour rendre compte des propriétés galvanomagnétiques du semiconducteur déformé dépend d'abord de notre capacité à décrire convenablement le matériau de référence. L'antimoniure d'indium et l'arséniure de gallium sont des semiconducteurs ayant fait l'objet d'études très nombreuses. L'intérêt du premier est lié à la très faible largeur de sa bande interdite, le second, constitue un matériau de base de la technologie des composants. On trouvera dans la revue de Blakemore | 1 | une description complète de la structure de bandes de GaAs et des différentes propriétés qui lui sont attachées. Pour les paramètres physiques de InSb, on consultera par exemple les ouvrages de Ilsum et Rose - Innes ou de Neuberger | 2,3 |.

Dans les composés III-V, les masses effectives étant faibles et les constantes diélectriques élevées, l'énergie d'ionisation  $E_I$  des impuretés hydrogénéoïdes est petite et le rayon de Bohr est très grand devant les paramètres du réseau. Pour des densités d'impuretés suffisamment grandes, les énergies de résonance entre sites voisins ne sont plus négligeables ; les états électroniques ne correspondent plus à des niveaux d'énergie discrets localisés à l'énergie  $E_I$  mais forment au contraire une bande de largeur non nulle.

A haute température, toutes les impuretés sont ionisées et la conductivité reflète un comportement d'électrons libres dans la bande de conduction (ou de trous libres dans la bande de valence). A très basse température, si l'énergie thermique  $KT$  devient inférieure à la largeur de la bande d'impuretés, la conductivité est déterminée par des processus internes à la bande d'impuretés et qui dépendent de la structure même de cette bande. Aux températures intermédiaires, la conduction se fait, pour un matériau de type  $n$ , par excitation des électrons de la bande d'impuretés dans la bande de conduction avec une énergie d'activation  $E_D$ . Au fur et à mesure que la concentration d'impuretés  $N_D$  augmente, l'énergie d'activation thermique diminue jusqu'à s'annuler complètement au-delà d'une densité critique dépen-

tant à la fois du semiconducteur et de la nature de l'impureté [4]. Ce comportement est généralement interprété en supposant que les états excités de l'atome hydrogénéoïde formant, sous la bande de conduction, un quasi continuum d'états de largeur  $E$ , l'énergie d'activation  $E_D$  est, dans ce modèle, liée à l'énergie d'ionisation  $E_I$  et à  $\Delta E$  par la relation  $E_D = E_I - \Delta E$ . La figure V-1, due à Stillman et Wolfe, illustre cette hypothèse.

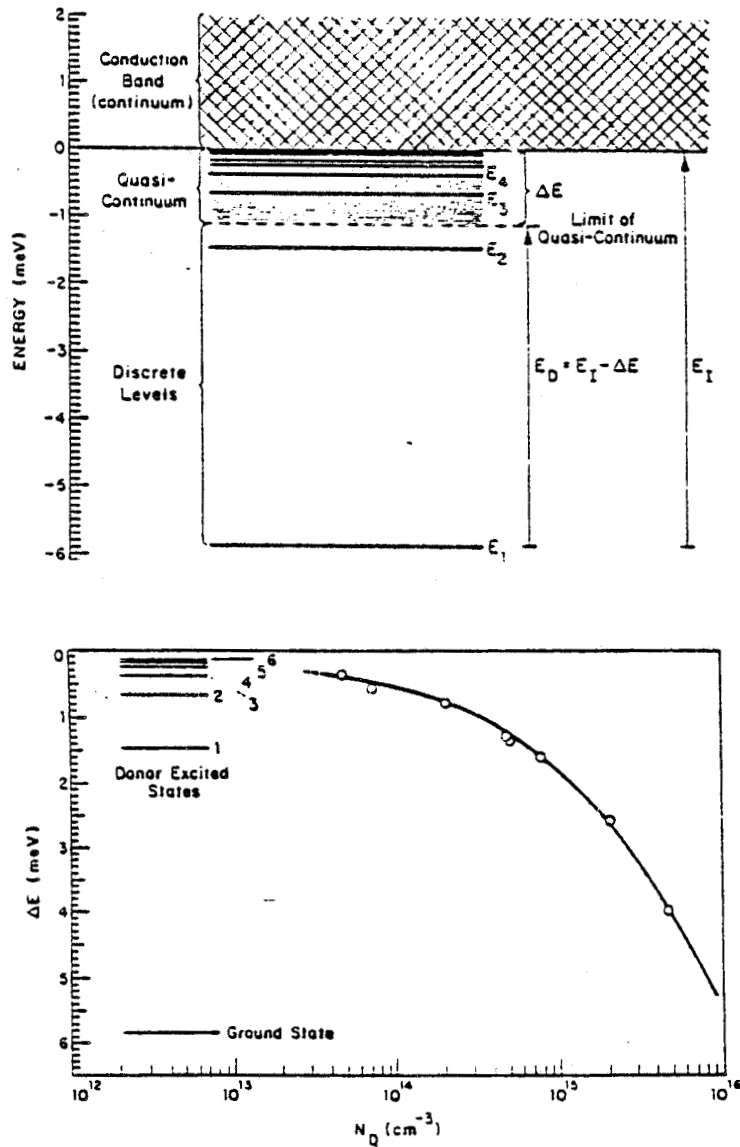


Figure V-1 : a) Niveaux d'énergie des donneurs dans GaAs.  $E_I$  est l'énergie d'ionisation d'une impureté isolée.  
 b) Variation de la largeur  $\Delta E$  du quasi continuum des états excités des donneurs dans GaAs.  
 D'après Stillman et Wolfe [4].

Tant que la densité d'impuretés n'est pas trop grande, la densité d'états dans la bande de conduction est peu affectée par la présence des impuretés qui forment, au voisinage immédiat de l'énergie  $E_C$ , une bande de  $2 N_D$  états délocalisés.

Nous avons effectivement réalisé une simulation correcte de l'effet Hall pour les échantillons de référence de type n en situant le niveau donneur à l'énergie  $E_C$  au bas de la bande de conduction. Ce choix est cohérent avec l'ordre de grandeur de la densité des porteurs libres mesurée à la température ambiante pour GaAs et à la température de l'azote liquide pour InSb. Dans les échantillons de type p, la simulation numérique de l'effet Hall conduit à une énergie d'activation thermique des accepteurs inférieure à l'énergie d'ionisation de l'impureté hydrogéné.

En fait, la détermination des densités d'impuretés  $N_D$  et  $N_A$  et des énergies d'activation correspondantes doit se faire en analysant l'évolution de la densité des porteurs libres sur un large domaine de température. Cette méthode n'est cependant bien adaptée que pour des concentrations très faibles pour lesquelles il n'y a pas de conduction dans la bande d'impuretés, ce qui n'est pas le cas des matériaux que nous avons utilisés. Une autre méthode classique est fondée sur l'analyse de la mobilité expérimentale ; elle consiste à identifier la valeur mesurée à la mobilité due aux impuretés ionisées et doit pour cela être faite dans un domaine de température pour lequel ce mécanisme de conduction est largement prédominant. Plus récemment, la nécessité de caractériser rapidement les couches épitaxiées de GaAs a entraîné le développement de méthodes empiriques : elles permettent de déterminer les caractéristiques du matériau à partir de la seule mesure de la densité des porteurs libres et de leur mobilité à la température de l'azote liquide [5]. Leur application au matériau massif dont nous disposons, semble toutefois surestimer notablement la densité totale d'impuretés ; cette anomalie est probablement due à des hétérogénéités - ou des défauts - conduisant à une mobilité anormalement faible [4, 6].

Les valeurs des paramètres utilisés dans les calculs numériques de densité de porteurs libres et de mobilité sont regroupés pour GaAs et InSb dans le tableau I.

### V-1.2. Taux d'occupation de la dislocation neutre

La statistique d'occupation des niveaux associés à la dislocation fait intervenir le taux d'occupation de la dislocation neutre. Cette neutralité correspond à un état de charge de la ligne de dislocation tel que, au voisinage du coeur, le potentiel vu par un électron soit identique au potentiel cristallin dans le cristal parfait. Ainsi, localement, les bandes d'énergie du cristal ne sont pas déformées. Dans les matériaux partiellement ioniques, cet état de charge est celui qui permet de compenser la variation infinie de la constante de Madelung due à la création du défaut [7].

Aux distorsions près, faire une dislocation  $60^\circ$  revient à retirer un demi-plan dans le cristal - un exemple en est donné sur la figure V-2 - Il en résulte que la variation de la constante de Madelung  $\gamma$  pour un atome de coeur de la dislocation provient uniquement de la région du cristal à l'intérieur du contour en pointillé (figure V-2). Dans le cristal parfait, la contribution à  $\gamma$  de cette partie du cristal peut s'écrire comme la somme de trois termes :

$$\gamma' = \gamma_\ell + \gamma_{p1} + \gamma_{p2}$$

$\gamma_\ell$  est la contribution à  $\gamma'$  d'une ligne d'atomes tous identiques dans la direction  $[110]$ ,  $\gamma_{p1}$  et  $\gamma_{p2}$  les contributions, égales dans ce cas particulier, des demi-plans 1 et 2 de part et d'autre de la ligne. La quantité  $\gamma'$  est finie alors que  $\gamma_\ell$  est donc  $\gamma_p = \gamma_{p1} = \gamma_{p2}$  sont infinies.

Dans le cristal contenant la dislocation, la contribution à  $\gamma$  de la région à l'intérieur du contour est

$$\gamma'' = \gamma_\ell + \gamma_p$$

Elle est donc infinie si  $\gamma_\ell + 2\gamma_p$  est finie. Pour compenser cette infinité, due au retrait du demi-plan, il est nécessaire de mettre une charge sur la dislocation.

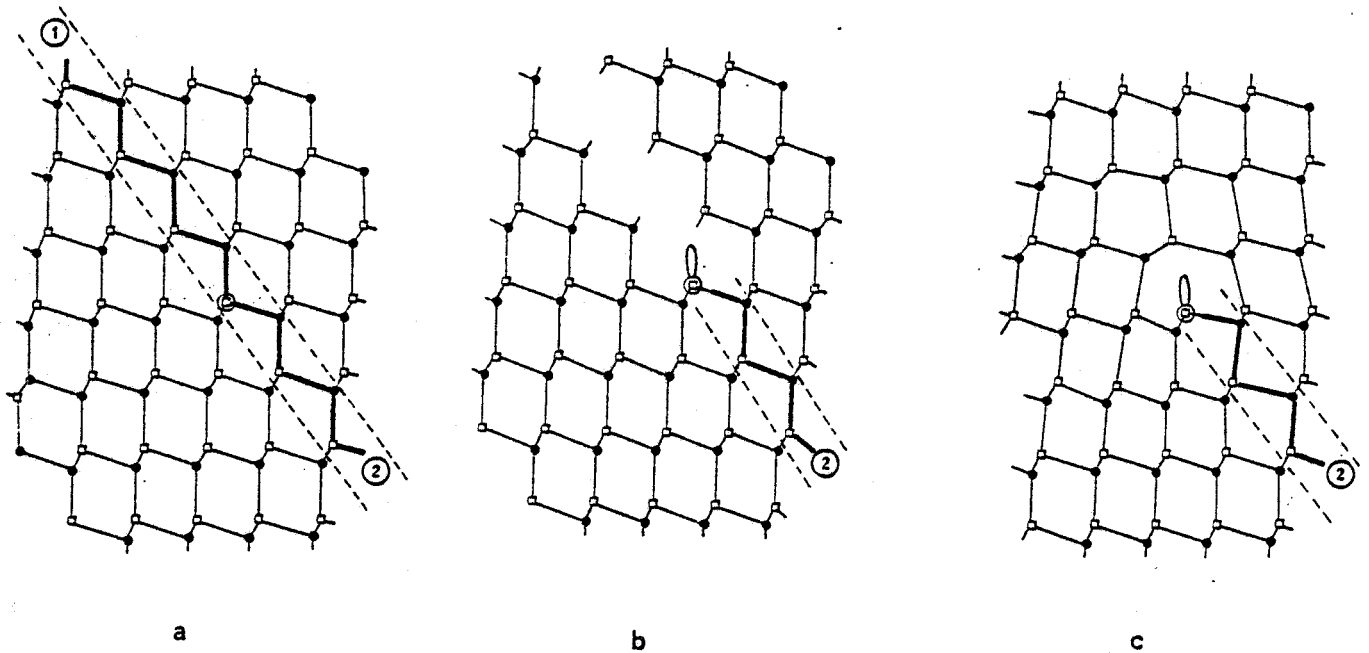


Figure V-2 : Création d'une dislocation  $60^\circ$  de type "shuffle".

- a) Identification d'un plan rugueux.
- b) Retrait d'un demi-plan
- c) Distorsion introduite après recombinaison des orbitales.

La valeur de cette charge, calculée pour des structures non distordues, varie cependant avec le type de demi-plan retiré alors que le choix de ce dernier devrait être indifférent. Cette incohérence ne doit pas surprendre car le calcul exact ne peut pas négliger les distorsions du réseau nécessaires pour reformer les liaisons covalentes en dehors du coeur de la dislocation.

Par analogie avec les résultats connus pour les surfaces, il est possible d'évaluer ce transfert de charge dans le coeur de la dislocation en s'appuyant sur des arguments de neutralité électrique. La stabilité électrostatique d'un cristal  $A_{III} - B_V$ , formé par un empilement de couches dipolaires A - B (figure 2 - chapitre I), est réalisée grâce à une modification de la charge des orbitales pendantes des atomes de surface | 8 |. Ce transfert de charge vaut  $1/4$  de la charge totale  $\pm Q_A$  portée par un atome dans le cristal parfait. La charge par orbitale liante des atomes dans le cristal parfait étant, suivant la nature de l'atome, égale à  $(5e - Q_A)/4$  ou à  $(3e + Q_A)/4$ , le nombre d'électrons par orbitale pendante sur les surfaces polaires vaut soit  $3/4$  soit  $5/4$ .

Des arguments géométriques élémentaires - retrait d'un demi-plan, cisaillement d'un cristal par glissement des dislocation... - permettent de faire l'analogie entre les atomes de coeur de la dislocation et les atomes des surfaces polaires (figure V-3). Nous avons alors, dans ce schéma, un taux d'occupation de la dislocation neutre dans les composés III-V égal à  $3/8$  ou à  $5/8$  suivant la nature des atomes de coeur.

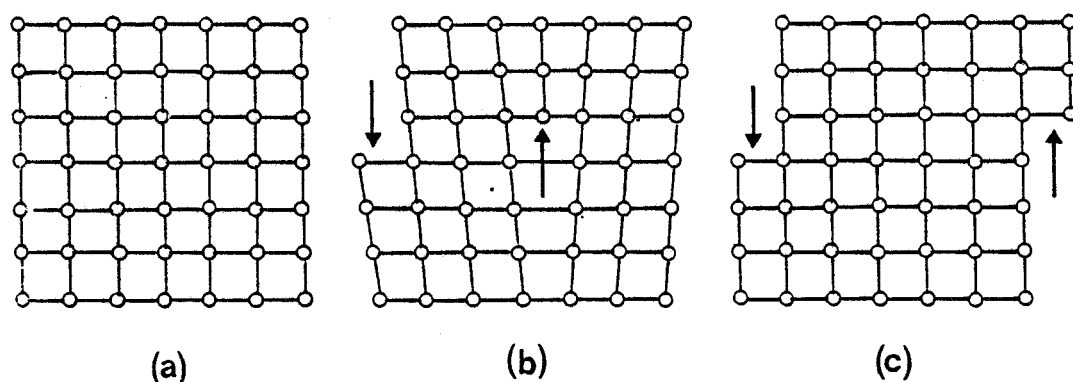


Figure V-3 : Analogie géométrique entre les atomes de coeur de la dislocation et les atomes de surface.

*Le glissement de la dislocation provoque le cisaillement du cristal, faisant apparaître deux nouvelles "surfaces".*

## V-2. APPLICATION DU MODELE AU MATERIAU DE TYPE n

### V-2.1. Evolution du taux d'occupation de la dislocation chargée

Le cas d'un matériau pur, non compensé, de type n est choisi tout d'abord comme illustration de l'évolution de la densité de porteurs libres avec la densité de dislocations. Nous avons, dans cet exemple, positionné arbitrairement le niveau associé à la dislocation à  $1/3$  de  $E_G$  au dessus de la bande de valence. La figure V-4 a et b représente, pour GaAs et pour InSb, les variations de l'effet Hall en fonction de l'inverse de la température pour différentes densités de dislocations. Ces résultats correspondent à la statistique d'occupation d'un niveau amphotère dont la position dépend



Figure V-4-a) : Cas de GaAs de type n

Variation de la constante de Hall en fonction de la température pour différentes valeurs de la densité de dislocations.

- (1) référence
- (2)  $D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- (3)  $D = 2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- (4)  $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- (5)  $D = 10^9 \text{ cm}^{-2}$
- (6)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$
- (7)  $D = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$

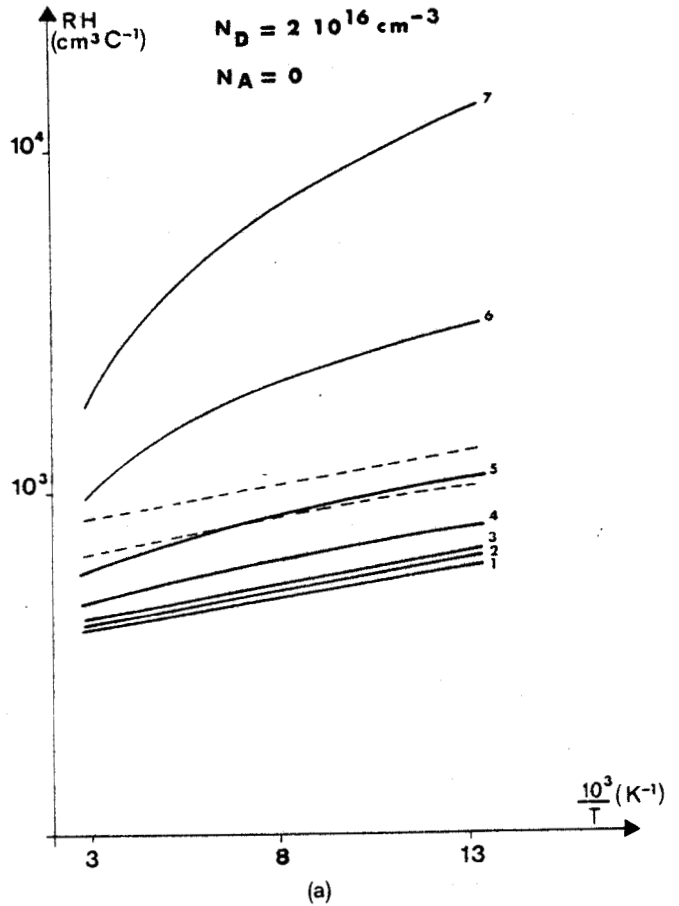
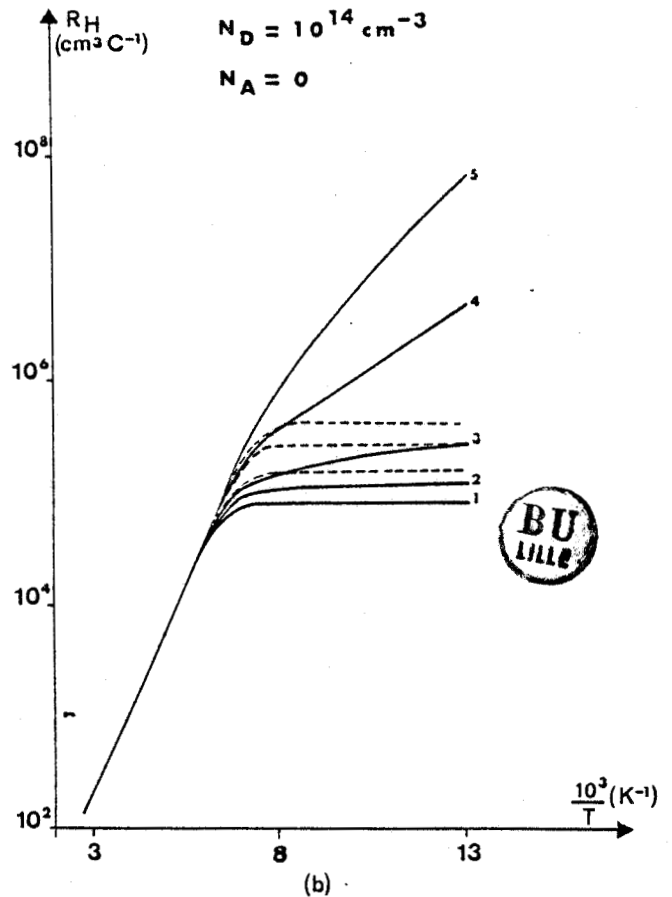


Figure V-4-b) : Cas de InSb de type n

Variation de la constante de Hall en fonction de la température pour différentes valeurs de la densité de dislocations.

- (1) référence
- (2)  $D = 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$
- (3)  $D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- (4)  $D = 2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- (5)  $D = 3 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$



d'un terme d'interaction électrostatique entre porteurs piégés. Afin d'en établir clairement les particularités, nous avons calculé, par comparaison, le piégeage des porteurs libres par des centres profonds électrostatiquement indépendants. Les deux situations se différencient, dans le domaine d'exhaustion des impuretés, essentiellement par leur évolution en fonction de la température : alors que pour les centres indépendants, la variation de la densité des porteurs libres avec  $T$  est faible, elle est au contraire très marquée pour les dislocations. On pourra donc tenter d'utiliser cette variation comme critère pour associer à un comportement expérimental donné, un type particulier de pièges.

\* variation du taux d'occupation avec la densité de dislocations.

Pour illustrer l'influence de la densité de dislocations sur le piégeage des porteurs libres, nous avons tracé sur la figure V-5 la variation relative  $\Delta n/n$  du nombre de porteurs libres en fonction du rapport  $D/b N_D$  du nombre de sites accepteurs le long des lignes de dislocations au nombre d'impuretés. Les courbes, tracées pour trois valeurs différentes de la densité  $N_D$  montrent que, pour un matériau donné, le piégeage est peu sensible à la valeur absolue de  $N_D$  mais qu'il dépend essentiellement du rapport  $D/N_D$ .

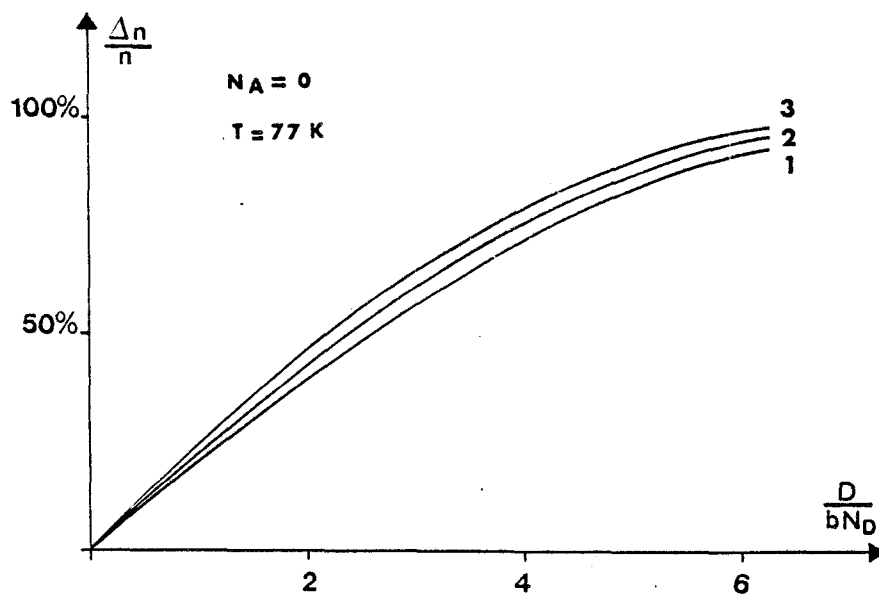


Figure V-5 : Variation relative de la densité des porteurs libres en fonction de la variable réduite  $\frac{D}{bN_D}$  (cas du GaAs).

(1)  $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$       (2)  $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$       (3)  $N_D = 4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

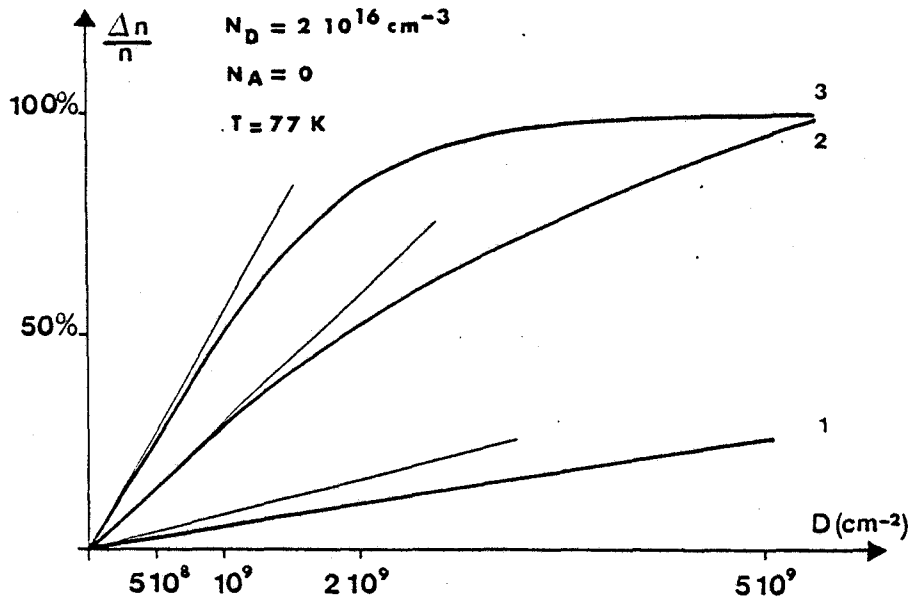


Figure V-6 : Influence de la position du niveau  $E_D$  associé à la dislocation neutre sur la variation relative de la densité des porteurs libres (cas de n-GaAs).

(1)  $E_D = 1040 \text{ meV}$  (2)  $E_D = 650 \text{ meV}$  (3)  $E_D = 130 \text{ meV}$ .

A densité d'impuretés  $N_D$  donnée, la pente de  $\Delta n/n$  en fonction de  $D$  est d'autant moins grande que la densité de dislocations est plus élevée (figure V-6). Qualitativement, cet affaiblissement de l'effet de piégeage s'explique de la façon suivante : plus le nombre de porteurs piégés est grand, moins l'écrantage par les porteurs libres restant est efficace ; il en résulte que la charge excédentaire par site de la dislocation diminue quand la densité de dislocations augmente. La forte augmentation de la longueur d'écrantage avec la densité de dislocations confirme cette interprétation (figure V-7). Est également reportée sur cette dernière figure la demi-distance moyenne  $\lambda$  entre deux dislocations voisines. Cette donnée détermine les limites de validité du modèle que nous exploitons. Ce modèle, fondé sur l'hypothèse de dislocations indépendantes, ne s'applique en effet que si la longueur d'écrantage est inférieure à la demi-distance entre dislocations ; cette condition est d'autant moins remplie que la densité de dislocations et (ou) la distance énergétique entre le niveau associé à la dislocation neutre et le niveau des impuretés sont grandes.

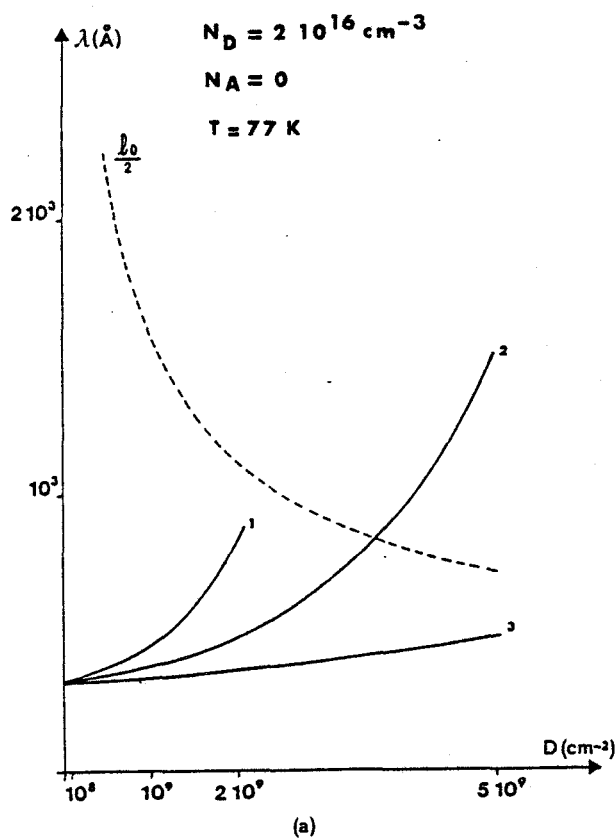


Figure V-7-a): Cas de GaAs de type n

Longueur d'écrantage en fonction de la densité de dislocations.  
 La courbe notée  $\frac{\lambda_0}{2}$  représente la demi-distance moyenne entre deux dislocations.

(1)  $E_D = 130 \text{ meV}$ , (2)  $E_D = 650 \text{ meV}$ , (3)  $E_D = 1040 \text{ meV}$ .



\* variation du taux d'occupation avec la position du niveau associé à la dislocation neutre.

Le piégeage des porteurs libres par les dislocations résulte d'un compromis entre le gain d'énergie réalisé en plaçant un électron (ou un trou) du niveau de Fermi sur le niveau associé à la dislocation et la perte d'énergie due à l'interaction électrostatique entre porteurs piégés : il est donc d'autant plus efficace que la distance énergétique entre le niveau de Fermi et le niveau de la dislocation est plus grande. La figure V-8, qui donne la valeur de la charge excédentaire par site en fonction de la position du niveau associé à la dislocation illustre ce point.

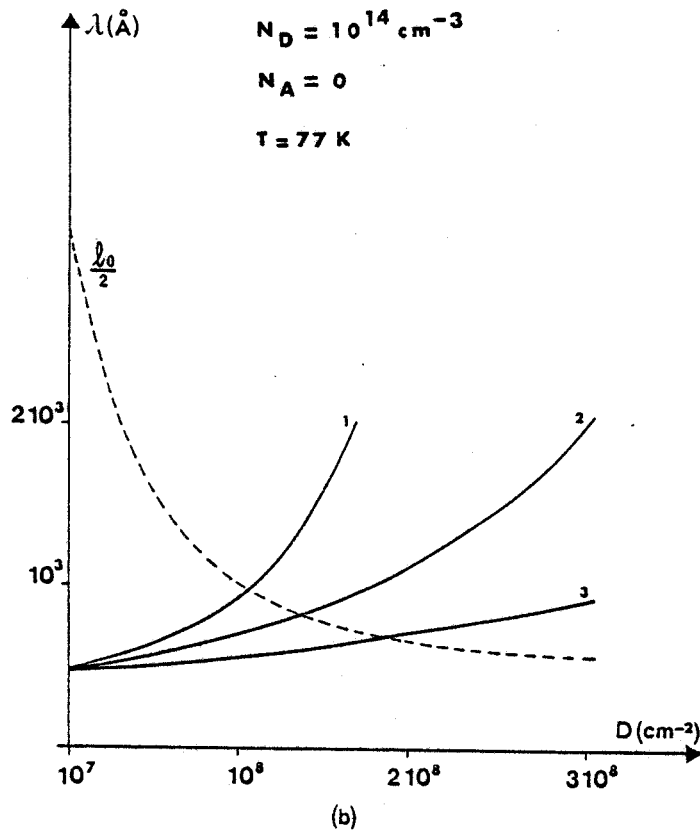


Figure V-7- b): Cas de InSb de type n

Longueur d'écrantage en fonction de la densité de dislocations.  
 La courbe notée  $\frac{\lambda_0}{2}$  représente la demi-distance moyenne entre deux dislocations.

(1)  $E_D = 70 \text{ meV}$ , (2)  $E_D = 100 \text{ meV}$ , (3)  $E_D = 120 \text{ meV}$ .



Le comportement général est le même pour InSb et pour GaAs mais l'ordre de grandeur du taux d'occupation de la dislocation est très différent dans les deux matériaux. Dans GaAs, la charge excédentaire par site peut atteindre 0,5 e pour des densités de dislocations faibles et un niveau d'énergie situé dans la partie inférieure de la bande interdite. Dans InSb, à cause 1) de la faible valeur de la bande interdite qui limite le gain énergétique réalisé en chargeant la dislocation, 2) de la faible valeur de  $N_D$  qui réduit les possibilités d'écrantage par les porteurs libres, la charge excédentaire par site n'excède par 0,06 e.

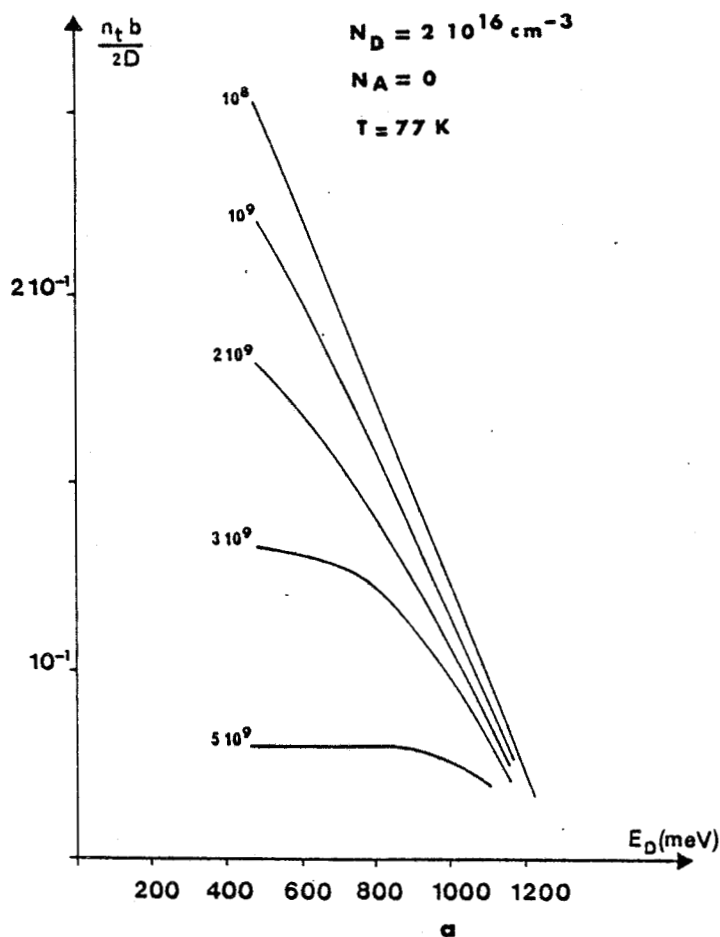


Figure V-8-a) : Cas de GaAs de type n.

Taux d'occupation de la dislocation en fonction de la position du niveau associé à la dislocation pour différentes densités de dislocations.



Il est intéressant de remarquer que le taux d'occupation de la dislocation chargée ne dépend que faiblement du taux d'occupation de la dislocation neutre. La valeur  $\xi = 3/8$  (ou  $\xi = 5/8$ ) constitue dès lors un choix acceptable malgré le caractère extrêmement simpliste des arguments avancés pour la déterminer.

La valeur du taux d'occupation détermine les décalages rigide et non rigide du niveau associé à la dislocation et donc la position du niveau

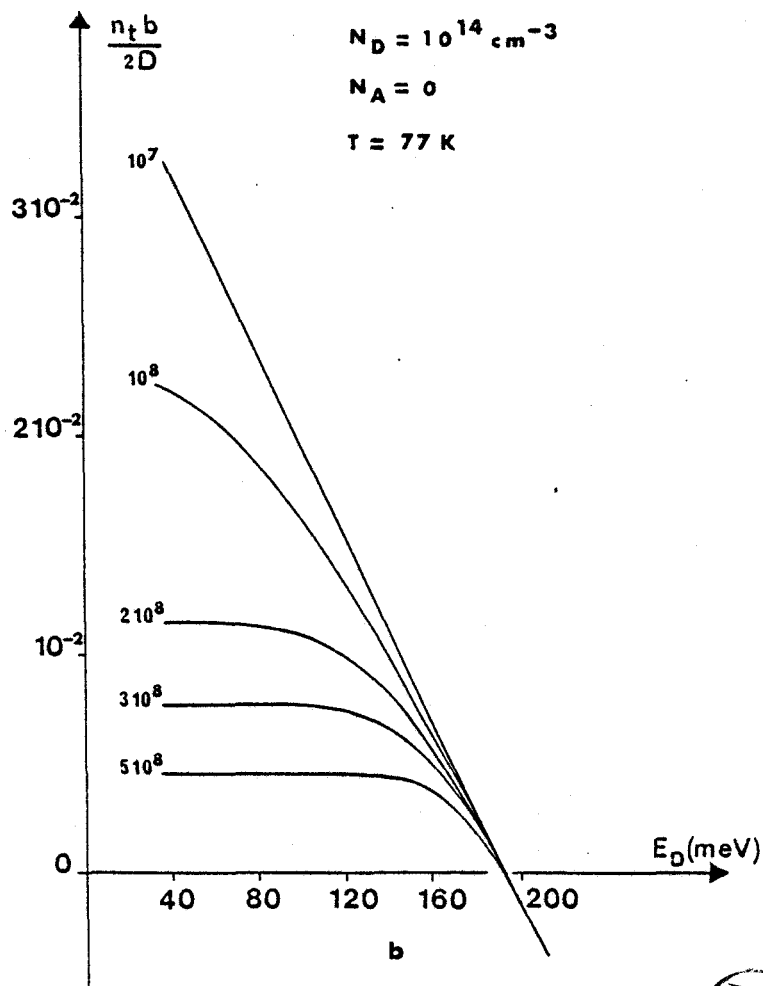


Figure V-8-b) : Cas de InSb de type n.

Taux d'occupation de la dislocation en fonction de la position du niveau associé à la dislocation pour différentes densités de dislocations.

effectif  $E_D^*$ . Le décalage non rigide  $\Delta E_D = Jf/\epsilon_L$  définit, localement, la position du niveau d'énergie par rapport aux bandes du cristal. C'est une quantité qui décroît quand la densité de dislocation augmente, d'autant plus rapidement que le niveau de la dislocation neutre est plus bas dans la bande interdite. En prenant comme ordre de grandeur de  $J$  l'énergie de seconde ionisation de l'atome,  $\Delta E_D$  varie, pour GaAs entre 50 et 300 meV environ ; pour InSb, la faible valeur du taux d'occupation de la dislocation chargée limite le décalage non rigide à moins de 30 meV.

Sur la figure V-9, nous avons reporté, en fonction de la densité de dislocations, la distance énergétique  $\delta_E$  entre le niveau associé à la dislocation et le sommet de la bande de valence au point où se trouve le défaut. Il s'agit donc de la quantité  $E_D^0 + \Delta E_D$ . Ces courbes illustrent le caractère particulier du niveau associé à la dislocation dont la position varie de façon continue relativement aux bandes du cristal parfait. Si le déplacement vers les basses énergies du seuil d'absorption optique de GaAs quand le taux de déformation augmente ne s'explique qu'en considérant un niveau de position variable par rapport aux bandes du cristal, il semble toutefois que la faible amplitude de variation de  $\delta_E$  avec  $D$ , ne puisse pas justifier les déplacements observés par Farvacque et Vignaud [9] et reportés sur la figure V-10. Le trop petit nombre de spectres d'absorption optique disponibles actuellement ne permet cependant pas de conclure.

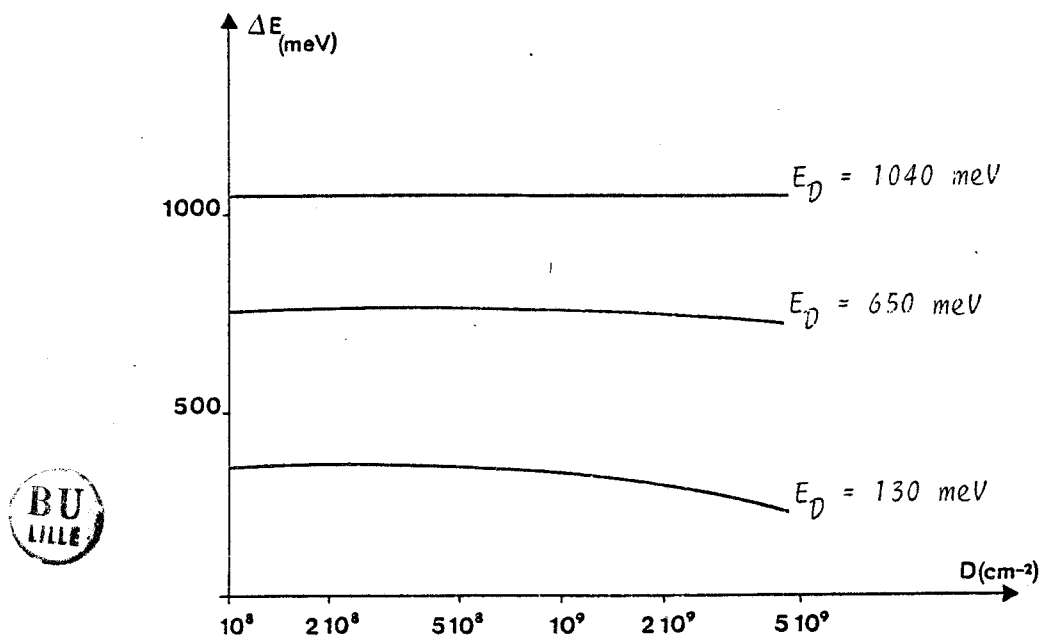


Figure V-9 : Distance énergétique entre le niveau associé à la dislocation et le sommet de la bande de valence au point où se trouve le défaut.

Le décalage rigide de l'ensemble des bandes d'énergie du cristal mesure l'amplitude de la perturbation créée par le défaut. Les valeurs obtenues sont généralement très élevées - jusqu'à 1 eV dans GaAs - et justifient a posteriori les précautions que nous avons prises pour utiliser un modèle d'écrantage fondé sur l'approximation de Debye-Hückel.



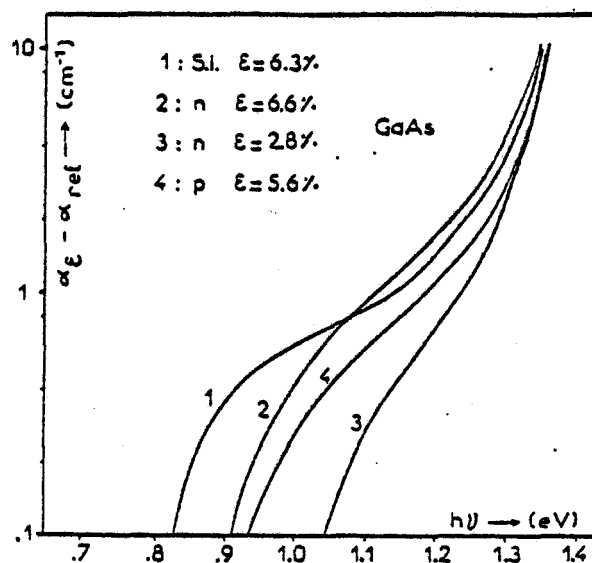


Figure V-10 : Différence d'absorption optique entre un échantillon déformé et un échantillon de référence.

#### V-2.2. Conditions de neutralité électrique de la dislocation

Dans le domaine de température que nous avons exploré, l'antimoniure d'indium est d'abord intrinsèque à haute température avant de devenir extrinsèque en dessous de 160 kelvins environ. Il en résulte une variation particulière du taux d'occupation de la dislocation chargée qui passe par un minimum en fonction de la température. Si le niveau d'énergie  $E_D^0$  associé à la dislocation neutre se situe dans la partie supérieure de la bande interdite, ce minimum correspond à une valeur négative du nombre d'électrons excédentaires par site et il existe alors une température  $T_N$ , située dans le domaine extrinsèque, pour laquelle la charge excédentaire par site vaut zéro : à cette température la dislocation est neutre. Expérimentalement, une telle situation se traduirait par un point de croisement de la courbe d'effet Hall de l'échantillon déformé avec la courbe d'effet Hall de l'échantillon de référence.

La valeur de la température  $T_N$  pour laquelle la dislocation est dans son état neutre, se déplace vers les basses températures quand le niveau  $E_D^0$  se rapproche de la bande de conduction ; elle est indépendante de la densité de dislocations présente dans le cristal. Ces différents comportements sont schématisés sur la figure V-11. L'existence ou la non existence de ce point de croisement sur les courbes expérimentales sera une indication de la position du niveau  $E_D^0$  associé à la dislocation.

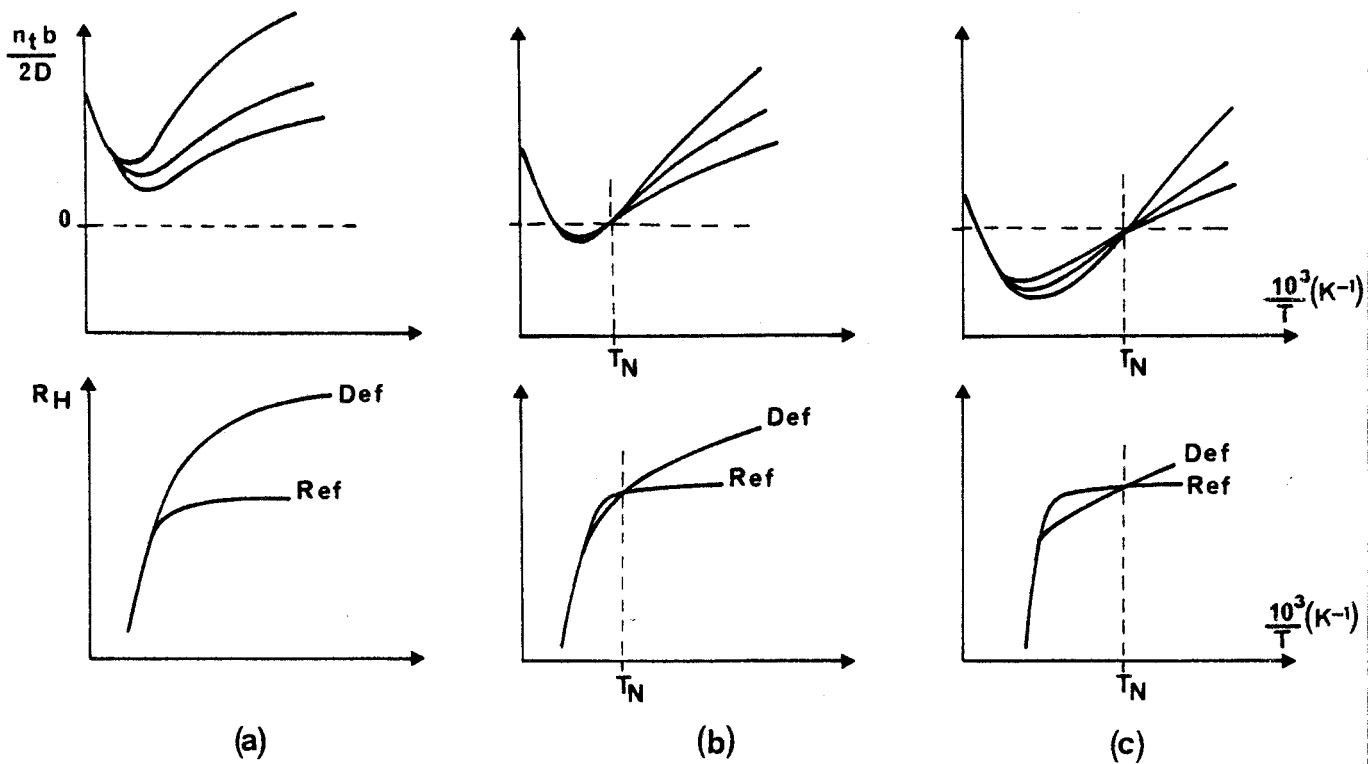


Figure V-11 : Evolution schématique du taux d'occupation et de la constante de Hall dans  $\text{InSb}$  de type n.

a)  $E_D = 120 \text{ meV}$ , b)  $E_D = 160 \text{ meV}$ , c)  $E_D = 180 \text{ meV}$ .



La même évolution existe, à priori, dans l'arséniure de gallium mais compte-tenu de la largeur de la bande interdite, la température de neutralité électrique de la dislocation est fortement décalée vers les hautes températures et donc impossible à observer dans les conditions de notre étude.

### V-2.3. Réduction de la mobilité des porteurs libres

Nous avons présenté dans le chapitre précédent les différents mécanismes de diffusion des porteurs libres associés aux dislocations. Le calcul numérique permet non seulement d'accéder à la valeur de la mobilité induite mais également de tester l'importance relative des effets de coeur et des effets du champ de contrainte

\* le potentiel de déformation.

Le potentiel de déformation n'est pas couplé au potentiel piezoélectrique et au potentiel de ligne chargée ; sa contribution à la mobilité résultante peut donc être calculée indépendamment des autres termes.

Nous avons d'abord repris l'expression du potentiel de déformation de Dexter et Seitz pour calculer la contribution  $\mu_{\text{Pot. def.}}^{-1}$  à la mobilité réciproque des porteurs libres. Les valeurs obtenues pour différentes densités de dislocations et différentes positions du niveau d'énergie de la dislocation neutre sont données sur la figure V-12 dans le cas de GaAs : elles sont toujours très faibles et ne représentent qu'une fraction négligeable de la mobilité réciproque totale. ( $\mu_{\text{pot. def.}} / \mu_{\text{total}}$  est de l'ordre de  $10^{-4}$ ). Le même calcul fait dans le cas de InSb conduit aux mêmes conclusions. Ces résultats confirment l'incapacité du potentiel de déformation de Dexter et Seitz à rendre compte, ne serait-ce que partiellement, de la réduction de mobilité des porteurs libres par les dislocations.

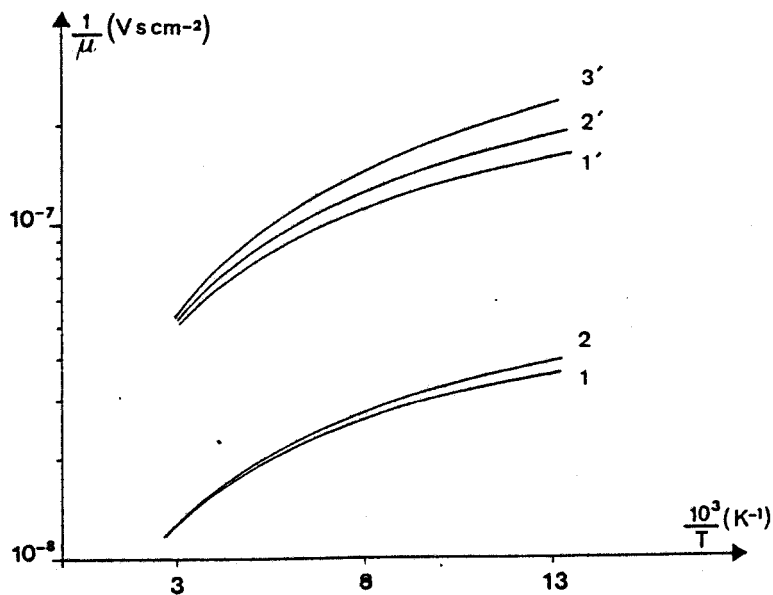


Figure V-12 : Contribution à la mobilité du potentiel de déformation de Bardeen et Shockley dans GaAs de type n.

- (1)  $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$   $E_D = 1040 \text{ meV}$
- (2)  $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$   $E_D = 130 \text{ meV}$
- (1')  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$   $E_D = 1040 \text{ meV}$
- (2')  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$   $E_D = 650 \text{ meV}$
- (3')  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$   $E_D = 130 \text{ meV}$

La mobilité réciproque calculée en utilisant l'expression du potentiel de déformation établie par Farvacque est donnée sur la figure V-13 dans le cas de GaAs. Contrairement au potentiel de déformation de Dexter et Seitz, il s'agit ici d'un mécanisme de diffusion extrêmement efficace puisque les valeurs de  $\mu^{-1}$  - de l'ordre de  $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ V s cm}^{-2}$  dans le matériau de référence, s'échelonnent de  $7 \cdot 10^{-4} \text{ V s cm}^{-2}$  à quelques  $10^{-2} \text{ V s cm}^{-2}$  lorsque la densité de dislocations varie de  $10^8$  à  $10^9 \text{ cm/cm}^3$ . La mobilité réciproque est, par contre, une fonction assez peu sensible à la position du niveau associé à la dislocation puisqu'elle n'en dépend que par l'intermédiaire de l'écrantage. Dans InSb, les densités de porteurs libres étant faibles, les valeurs de  $\mu^{-1}$ , qui varient comme  $n^{-3/2}$ , sont très élevées. ( $\mu^{-1} \sim 3 \cdot 10^{-2} \text{ V s cm}^{-2}$  pour  $D \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ).

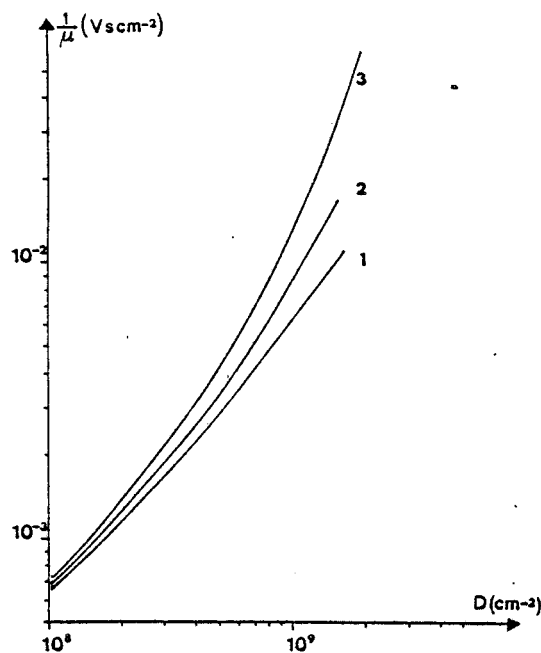


Figure V-13 : Contribution à la mobilité du potentiel de déformation de Farvacque - Cas de n - GaAs.

(1)  $E_D = 130 \text{ meV}$  (2)  $E_D = 650 \text{ meV}$  (3)  $E_D = 1040 \text{ meV}$ .

\* les potentiels électrostatique et piezoélectrique.

La réduction importante de la mobilité par les potentiels de diffusion électrostatique et piezoélectrique est illustrée par la figure V-14 où nous avons noté, à titre de comparaison, l'ordre de grandeur de la mobilité électronique dans le matériau de référence.

Cette contribution à la mobilité réciproque dépend de la position du niveau de la dislocation neutre mais de façon différentes pour les deux semi-conducteurs étudiés : dans GaAs  $\mu^{-1}$  est très sensible à la valeur de  $E_D^0$  alors que dans InSb, elle en dépend relativement moins. Cette différence de comportement suggère que les mécanismes de diffusion efficaces ne sont pas les mêmes dans les deux cas. L'effet piezoélectrique, qui ne dépend du piégeage des porteurs libres donc de  $E_D^0$ , qu'à travers les possibilités d'écrantage du potentiel diffuseur est l'effet de diffusion prépondérant dans InSb ; dans GaAs, la diffusion par effet de ligne chargée représente la contribution majeure à la réduction globale de la mobilité.

Pour tester la validité de ces hypothèses, raisonnables à priori compte tenu des valeurs respectives du taux d'occupation et du coefficient piezoélectrique  $e_{14}$  dans les deux matériaux, nous avons évalué la mobilité réciproque due au seul effet de ligne chargée ; les résultats sont également portés sur la figure V-14. Il ressort de cette étude que la diffusion par effet de ligne chargée est toujours faible devant la diffusion piezoélectrique dans InSb. Dans GaAs, la situation est moins tranchée mais la diffusion par le seul effet de ligne chargé représente néanmoins 70 % environ de l'effet global ; ce rapport évolue de 60 % à 80 % suivant que le niveau  $E_D^0$  de la dislocation neutre se situe très haut ou très bas dans la bande interdite.

De ce point de vue, seul l'antimoniure d'indium présente un comportement spécifique à son caractère de composé III-V, l'arséniure de gallium se différenciant en fait assez peu des semi-conducteurs élémentaires [10,11] .

#### \* Réduction globale de la mobilité

Les ordres de grandeur de  $\mu^{-1}$  obtenus pour chacun des mécanismes de diffusion susceptibles de réduire la mobilité des porteurs libres permettent de tirer les conclusions suivantes :

- Dans GaAs, le potentiel de déformation est le seul mécanisme de diffusion efficace dans le cas où les dislocations ne sont pas chargées (ou le seraient très peu). Dans le cas inverse, le potentiel de déformation et le potentiel par effet de ligne chargée peuvent devenir compétitifs. Le potentiel piezoélectrique contribue toujours faiblement à la réduction de mobilité.

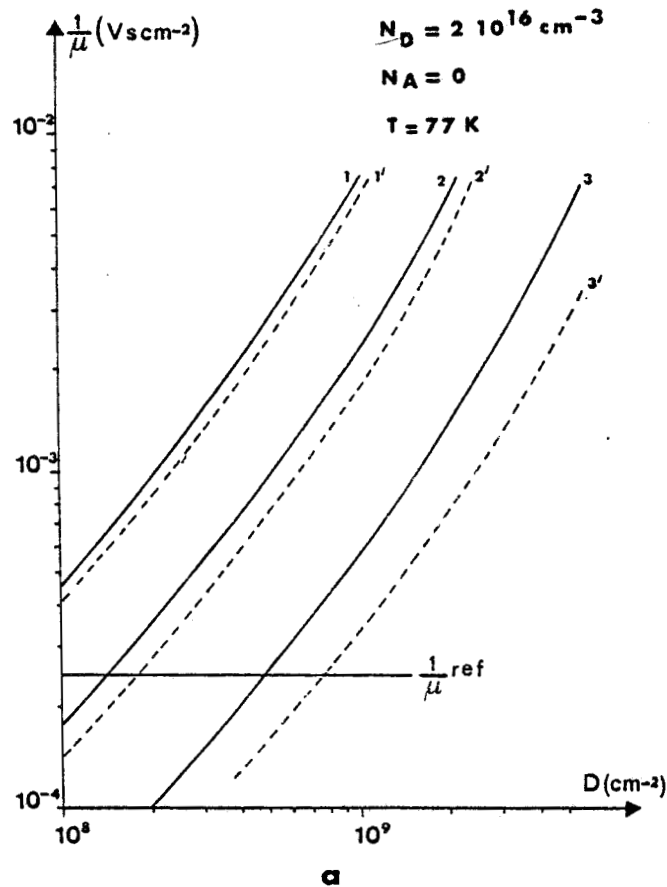


Figure V-14 - a): Cas de GaAs de type n

Contribution à la mobilité du potentiel piézoélectrique et du potentiel par effet de ligne chargée.



Les courbes en trait plein correspondent à la mobilité due aux potentiels piézoélectrique et de ligne chargée.  
Les courbes en pointillé donnent la seule contribution du potentiel de ligne chargée.

(1) (1')  $E_D = 130$  meV, (2) (2')  $E_D = 650$  meV, (3) (3')  $E_D = 1040$  meV.

• Dans InSb, la réduction de mobilité tire son origine de champs de déformation et non pas de la charge piégée par les dislocations. L'effet du potentiel de déformation est très largement supérieur à l'effet piezoélectrique.

#### V-2.4. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations vis

La structure de coeur des dislocations vis - absence d'orbitales pendantes mais distorsion très grande des liaisons - favorise un spectre de niveaux constitué d'un niveau vide proche de la bande de conduction et d'un niveau

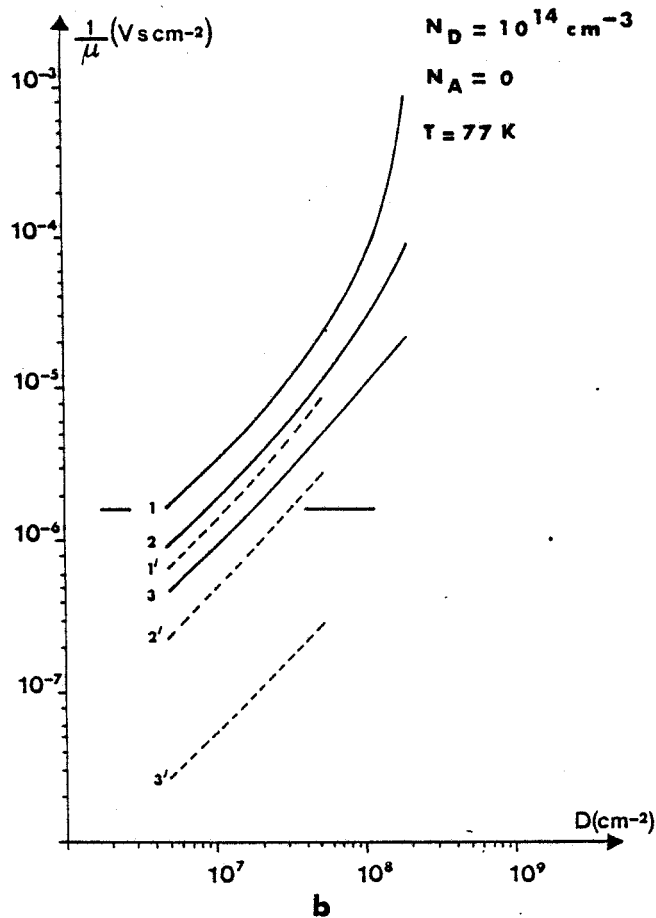


Figure V-14 - b): Cas de InSb de type n.



Contribution à la mobilité du potentiel piézoélectrique et du potentiel par effet de ligne chargée.

Les courbes en trait plein correspondent à la mobilité due aux potentiels piézoélectrique et de ligne chargée. Les courbes en pointillé donnent la seule contribution du potentiel de ligne chargée.

$$(1)(1')E_D = 50 \text{ meV}, \quad (2)(2')E_D = 90 \text{ meV}, \quad (3)(3')E_D = 130 \text{ meV}.$$

plein près de la bande de valence |12|. La statistique d'occupation de ces niveaux, contrôlée par un terme d'énergie d'interaction électrostatique proportionnel à la charge excédentaire totale portée par la dislocation a été présentée au chapitre IV |13|.

Seul le niveau vide est susceptible de se charger dans un matériau de type n et l'efficacité du piégeage est limitée par la proximité de la bande de conduction. Le comportement général est le même que pour le cas des dislocations 60° et les résultats sont voisins de ceux obtenus pour un niveau unique, partiellement rempli dans l'état neutre, et situé à la même énergie.

Un exemple de variation de l'effet Hall avec la température pour différentes densités de dislocations vis est donnée sur la figure V-15.

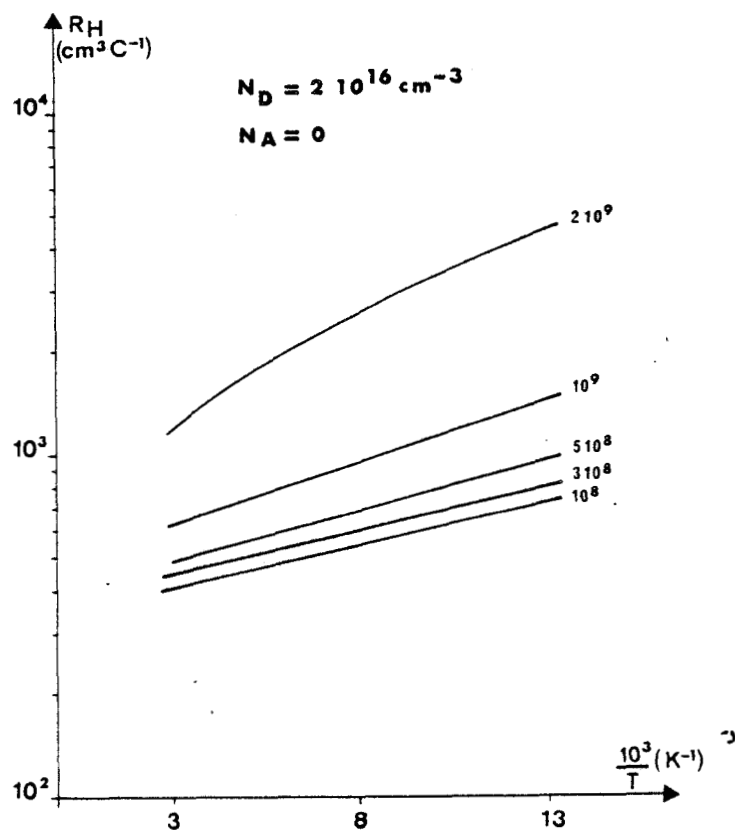


Figure V-15 : Variation de la constante de Hall en fonction de l'inverse de la température lorsqu'on associe à la dislocation un niveau vide et un niveau plein.  
Cas de n-GaAs :  $E_{D1} = 100 \text{ meV}$   $E_{D2} = 600 \text{ meV}$



La diminution de la mobilité, due à la diffusion des porteurs libres par les dislocations vis ne peut être attribuée qu'à un effet de ligne chargée puisque l'effet piezoélectrique et l'effet du potentiel de déformation ne dépendent que de la composante coin du vecteur de Burgers. Cette diminution est, dans GaAs, du même ordre de grandeur que celle due à des dislocations coin uniquement si le niveau vide est très proche de la bande de valence. Dans InSb, la mobilité des porteurs libres diffusés par le champ électrostatique des dislocations vis est généralement supérieure à la mobilité des porteurs libres dans le matériau de référence : aucune densité courante de dislocations vis introduite dans les échantillons ne devrait, dans ce modèle, conduire à une réduction notable de la mobilité.



Nous reviendrons, au cours de la discussion de nos résultats expérimentaux, sur le problème des dislocations vis car le modèle développé ici ne prévoit pas la transformation en un matériau de type p, d'un matériau initialement de type n alors que ce comportement a été observé sur des éprouvettes d'antimoniure d'indium déformées en torsion.

### V-3. APPLICATION DU MODELE A D'AUTRES SITUATIONS PHYSIQUES

#### V-3.1. Cas d'un matériau de type p

Une étude identique à celle développée dans le matériau de type n a été faite pour un matériau de type p. La statistique d'occupation du niveau amphotère  $E_D^0$  de la dislocation est, cette fois, déterminée par le caractère accepteur des impuretés. La variation relative  $\Delta p/p$  du nombre de trous libres dans la bande de valence est d'autant plus élevée que le niveau associé à la dislocation est plus haut dans la bande interdite (figure V-16).

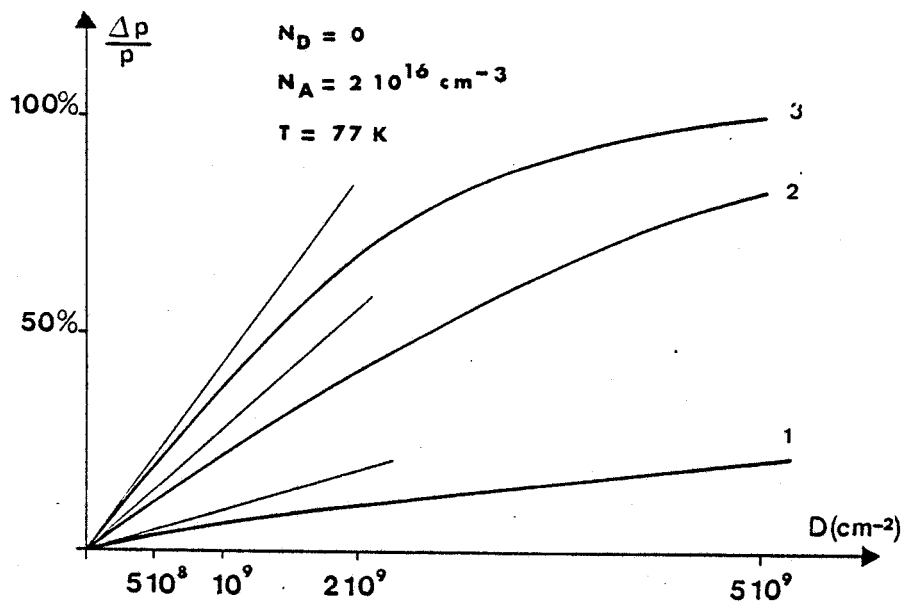


Figure V-16 : Influence de la position du niveau  $E_D$  associé à la dislocation neutre sur la variation relative de la densité des porteurs libres (cas de p-GaAs).

(1)  $E_D = 260 \text{ meV}$  (2)  $E_D = 650 \text{ meV}$  (3)  $E_D = 1040 \text{ meV}$

La comparaison des taux de piégeage des porteurs libres dans les matériaux n et p de même dopage devrait ainsi permettre, dans des conditions de déformation identiques, d'estimer la position  $E_D^0$  du niveau amphotère

associé à la dislocation. Si les taux de piégeage sont du même ordre de grandeur dans les deux cas, le niveau  $E_D^0$  se situe plutôt dans la partie médiane de la bande interdite. Si le taux de piégeage est faible dans le type n, important dans le type p, le niveau  $E_D^0$  est plus vraisemblablement dans la partie supérieure de la bande interdite et inversement. Il faut cependant rester très prudent quant au bien fondé d'une telle estimation car elle repose sur l'hypothèse que les deux échantillons déformés dans les mêmes conditions contiennent la même sous-structure de dislocations, ce qui est difficile à vérifier.

La variation de l'effet Hall en fonction de la température, tracée figure V-17 dans le cas de GaAs pour différentes valeurs de la densité de dislocations, est peu différente de celle qui serait obtenue dans le cas d'un piégeage par des défauts ponctuels électrostatiquement indépendants.

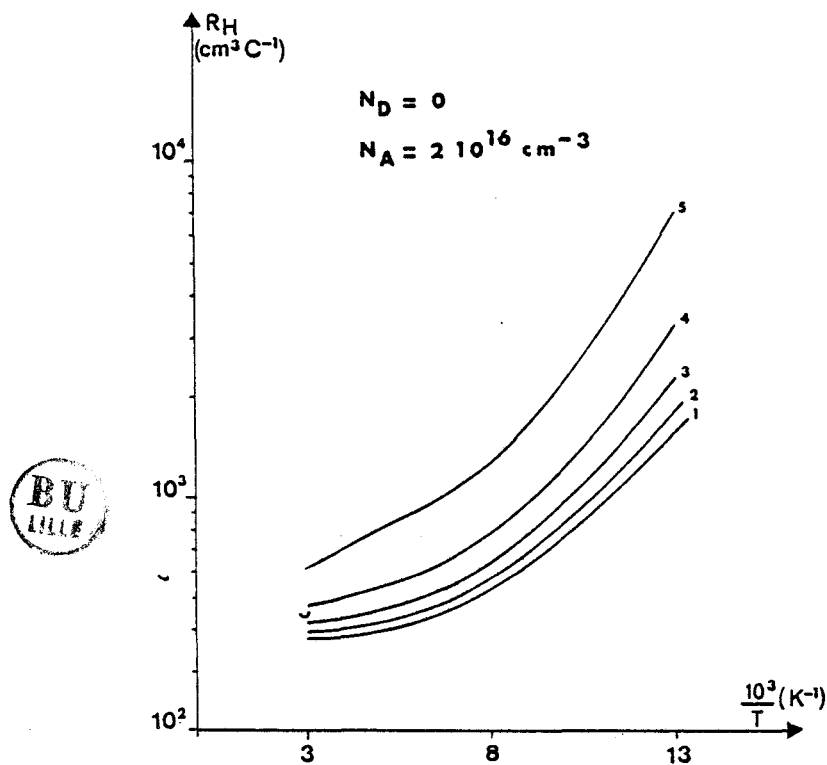


Figure V-17 : Variation de la constante de Hall en fonction de l'inverse de la température pour différentes valeurs de la densité de dislocations. Cas de p-GaAs :  $E_D = 650 \text{ meV}$ .

- (1) référence, (2)  $D = 2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ , (3)  $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ,  
(4)  $D = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ , (5)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ .

Dans l'antimoniure d'indium de type p, le piégeage des porteurs libres sur un niveau profond associé aux dislocations est toujours très faible, à cause de la valeur relativement élevée de la concentration des accepteurs légers ( $N_A \simeq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) et de la faible valeur du taux d'occupation. Pour un jeu de paramètres favorables à un piégeage important ( $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^3$ ;  $E_D^0 = 150 \text{ meV}$ ) la variation relative  $\Delta p/p$  ne dépasse pas 10 % (figure V-18). La mobilité est par contre, comme dans le type n, fortement réduite par les dislocations car l'effet de diffusion important est l'effet piezoélectrique. L'influence des dislocations sur les propriétés galvanomagnétiques de l'antimoniure d'indium devrait correspondre, expérimentalement, à une augmentation très sensible de la résistivité du matériau sans variation notable de l'effet Hall.

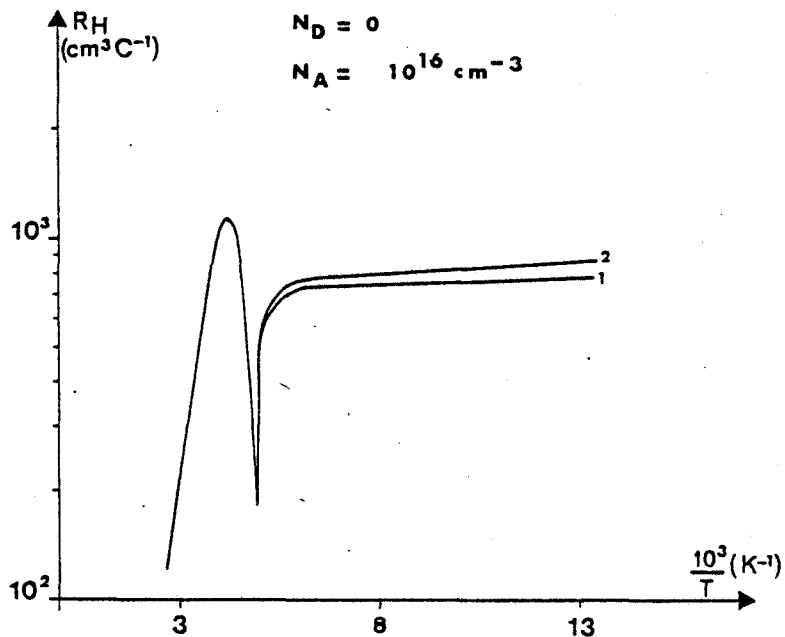


Figure V-18 : Variation de la constante de Hall en fonction de l'inverse de la température pour p-InSb.

(1) référence, (2)  $D = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ,  $E_D = 150 \text{ meV}$ .

### V-3.2. Dissociation et reconstruction des dislocations

Le modèle développé est applicable, sans modifications majeures, au cas d'une dislocation dissociée. A chacune des partielles correspond un niveau d'énergie dont la position varie en fonction du taux d'occupation du niveau considéré. La proximité des deux partielles nous a amené à introduire dans le

calcul un terme d'interaction électrostatique entre les deux lignes chargées. Si les deux partielles sont à la distance  $a$  l'une de l'autre et portent respectivement  $n_{t1}$  et  $n_{t2}$  électron excédentaire par site le long de la ligne, l'interaction électrostatique a pour valeur approchée (annexe C)

$$W = \frac{n_{t1} \cdot n_{t2} e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left\{ \text{Log} \frac{2}{k_G a} - C - \frac{1}{2} \right\}$$

$C$  est la constante d'Euler ( $C = 0,577$ ).

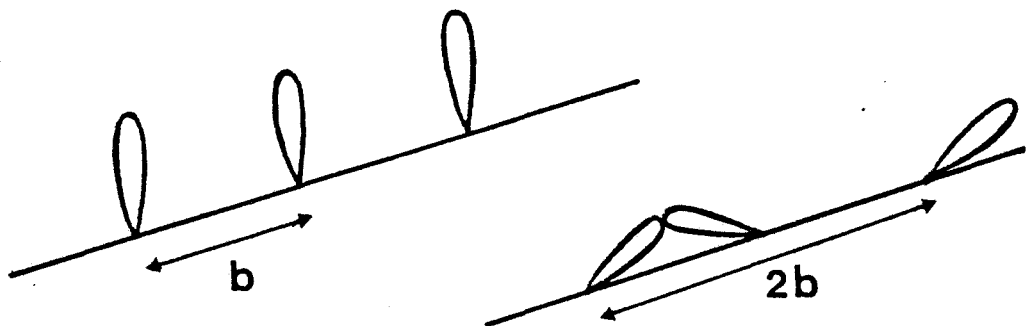
Cette quantité est à ajouter au terme d'interaction électrostatique entre porteurs piégés le long de la ligne pour la détermination du décalage rigide de chacun des niveaux.

La résistivité et la constante de Hall évaluées dans ce modèle présentent qualitativement la même évolution en fonction de la température que celle obtenue précédemment dans le cas d'un niveau unique.

La reconstruction éventuelle le long de la ligne de dislocation peut également être traitée dans un modèle à deux niveaux. Si nous caractérisons la reconstruction par une intégrale de résonance  $\beta'$  entre deux orbitales pendantes voisines (voir schéma ci-dessous) les niveaux d'énergie correspondant à la nouvelle configuration sont données par

$$E = E_D^* \pm \beta'$$

où  $E_D^*$  dépend de la charge portée par la dislocation



Le pas du réseau unidimensionnel le long de la ligne étant, après reconstruction, égal à  $2b$ , la charge excédentaire par site vaut  $2b (n_1+n_2) e/D$  où  $n_1$  et  $n_2$  représentent le nombre d'électrons excédentaires sur les niveaux liant et antiliant. Les décalages rigide et non rigide sont identiques pour les deux niveaux ; ils sont déterminés par la charge excédentaire totale  $b(n_1+n_2) e/D$  par atome de coeur de la dislocation.

Les situations physiques simples que nous venons de décrire nous ont permis de vérifier que la dépendance en température du piégeage des porteurs libres dépend peu du nombre de niveaux d'énergie associés à la dislocation et du détail de l'interaction électrostatique définissant leurs décalages rigide et non rigide.

### V-3.3. Délocalisation de la charge piégée par la dislocation

La délocalisation de la charge portée par la dislocation, perpendiculairement à la direction de la ligne, conduit à une augmentation non négligeable du piégeage des porteurs libres même pour des délocalisations faibles. Un exemple en est donné sur la figure V-19 où nous avons reporté la variation de la constante de Hall en fonction de la température pour trois valeurs de la longueur de délocalisation. Pour le choix de paramètres correspondant à la figure, la variation relative  $\Delta n/n$  du nombre des électrons de conduction vaut 75 % si on ne tient pas compte de la délocalisation, elle vaut 87 % pour une longueur de délocalisation égale à  $2b$ . Les courbes  $R_H = f(1/T)$  tracées sur la même figure pour  $2,5 \cdot 10^9$  et  $3 \cdot 10^9$  cm/cm<sup>3</sup> de dislocations montrent cependant qu'une délocalisation faible est tout à fait équivalente à une augmentation de la densité de dislocations. Expérimentalement, les deux effets seront donc indiscernables. Le même comportement est obtenu dans InSb et dans GaAs, que le matériau soit de type n ou de type p.

Si au lieu d'associer à la dislocation un niveau profond dans la bande interdite, nous lui associons un niveau proche des bords de bande du cristal, il importe de délocaliser fortement la charge piégée le long de la ligne puisque les états électroniques sont alors assimilables à des états électroniques d'impuretés superficielles. Seul un niveau vide près de la bande de

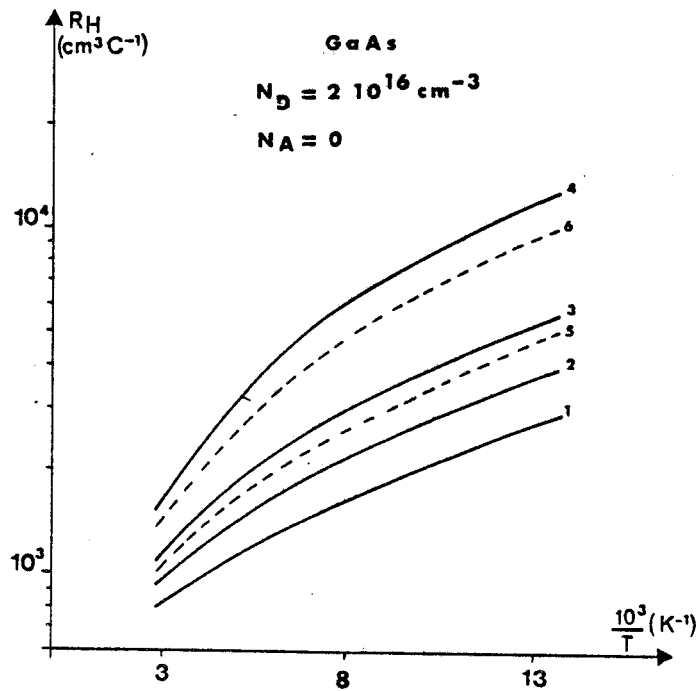


Figure V-19 : Influence de la délocalisation sur l'évolution de la constante de Hall en fonction de l'inverse de la température

- (1)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 0$       (2)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 4 \text{ \AA}$   
 (3)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 8 \text{ \AA}$       (4)  $D = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 20 \text{ \AA}$   
 (5)  $D = 2,5 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 0$       (6)  $D = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 0$



valence est susceptible de piéger un nombre important de porteurs libres dans le matériau de type n ; aussi nous avons choisi d'étudier, dans ce cas de figure, l'influence d'une forte délocalisation sur la statistique d'occupation du niveau de la dislocation.

Les résultats portés sur la figure 20 a, correspondent au cas d'une charge piégée sur la dislocation strictement localisée le long de la ligne ; Cette hypothèse de travail n'est pas physiquement raisonnable pour un niveau très proche des bords de bandes du cristal mais son intérêt est de permettre la comparaison avec le cas d'une charge délocalisée radialement.

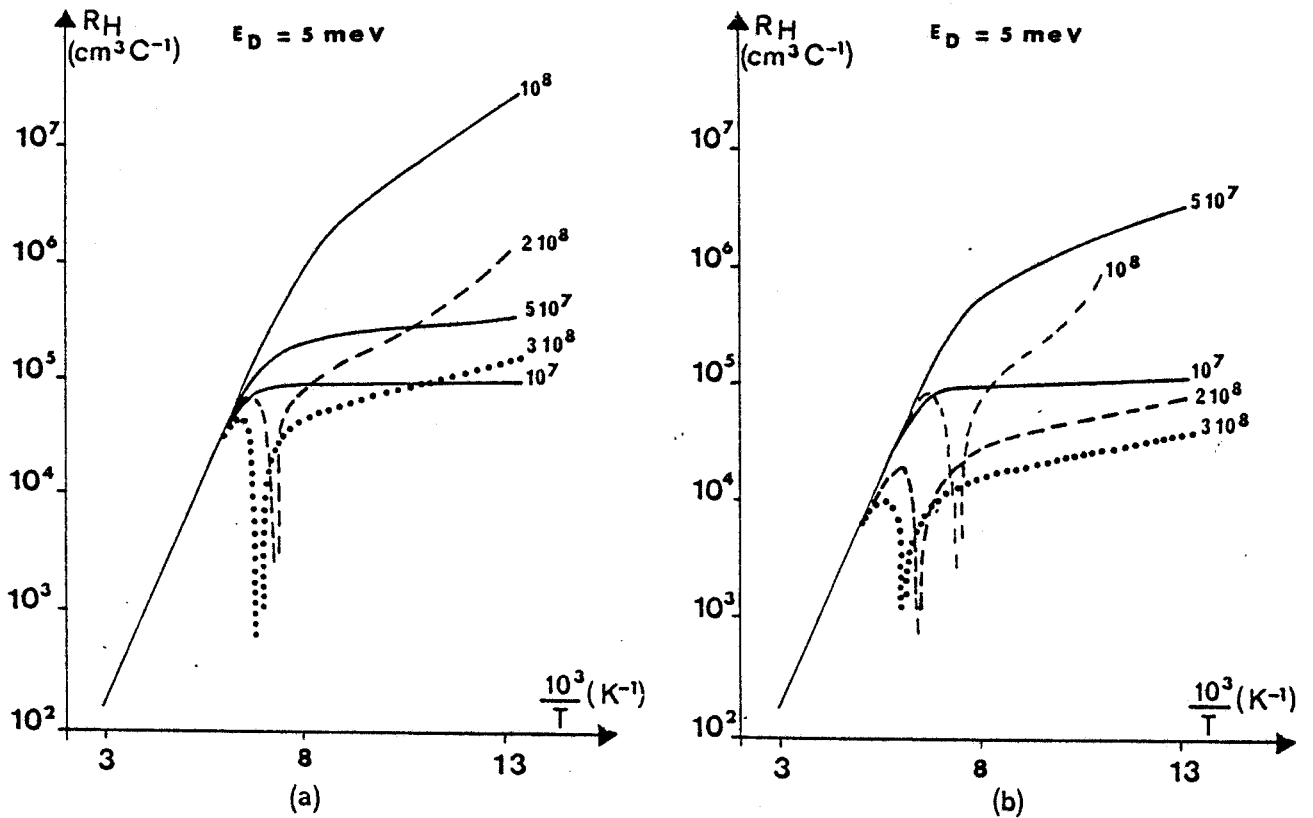
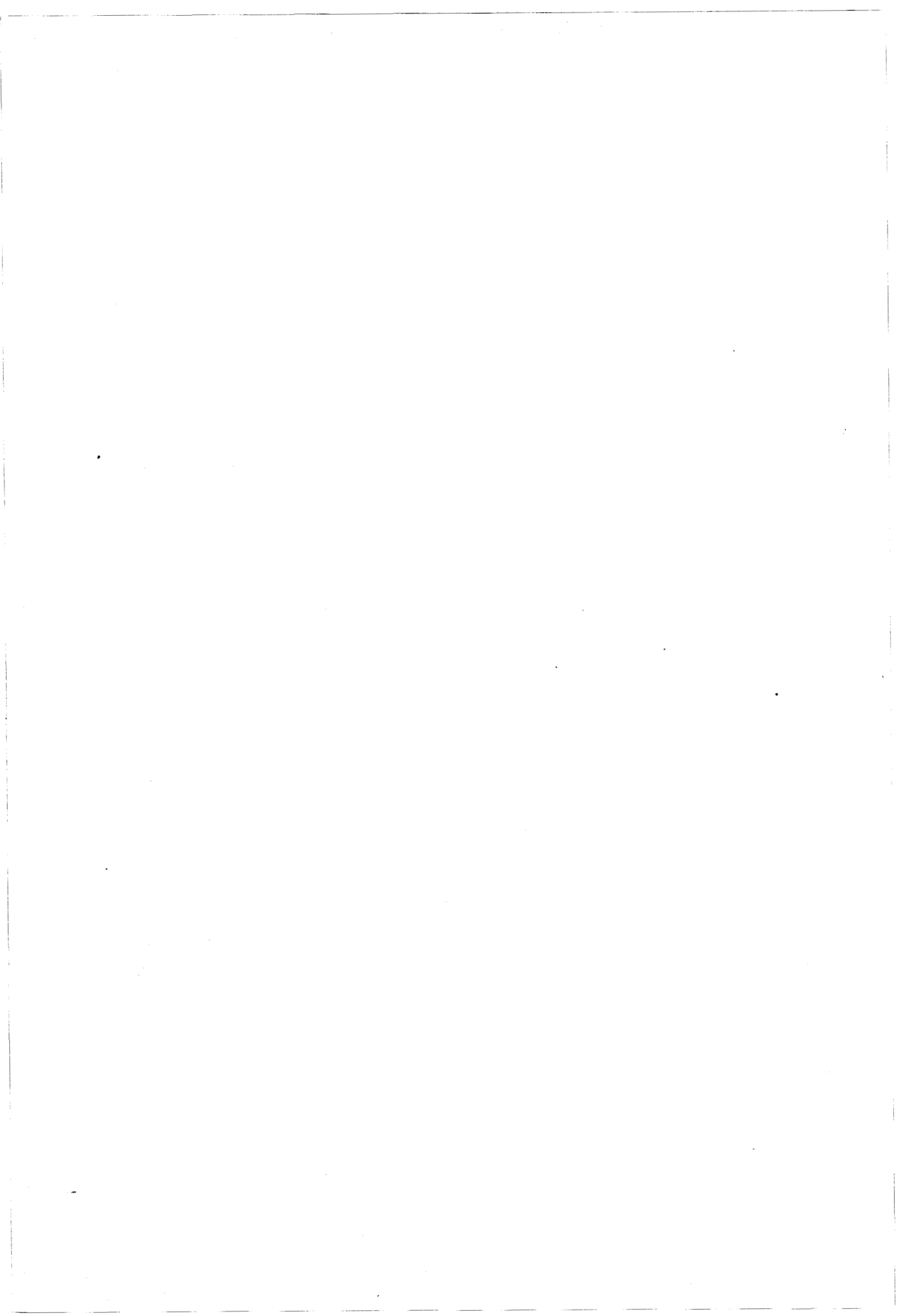


Figure V-20 : Transformation n-p de InSb induite par les dislocations

- a) pas de délocalisation
- b) influence d'une délocalisation  $L = 50 \text{ \AA}$ .



Il existe une densité de dislocations critique au delà de laquelle le matériau, initialement de type n présente un effet Hall caractéristique d'un matériau de type p. La délocalisation de la charge piégée déplace cette densité critique vers des valeurs d'autant plus petites que la longueur de délocalisation est plus grande (figure 20 b). Là encore, cet effet est expérimentalement indiscernable d'une augmentation de la densité de dislocations, c'est pourquoi nous discuterons nos résultats expérimentaux sans tenir compte de la délocalisation mais nous garderons présent à l'esprit que les densités de dislocations estimées à partir de l'effet Hall sont de ce fait surestimées et ceci d'autant plus que le niveau associé à la dislocation est plus proche des bords de bandes du cristal.

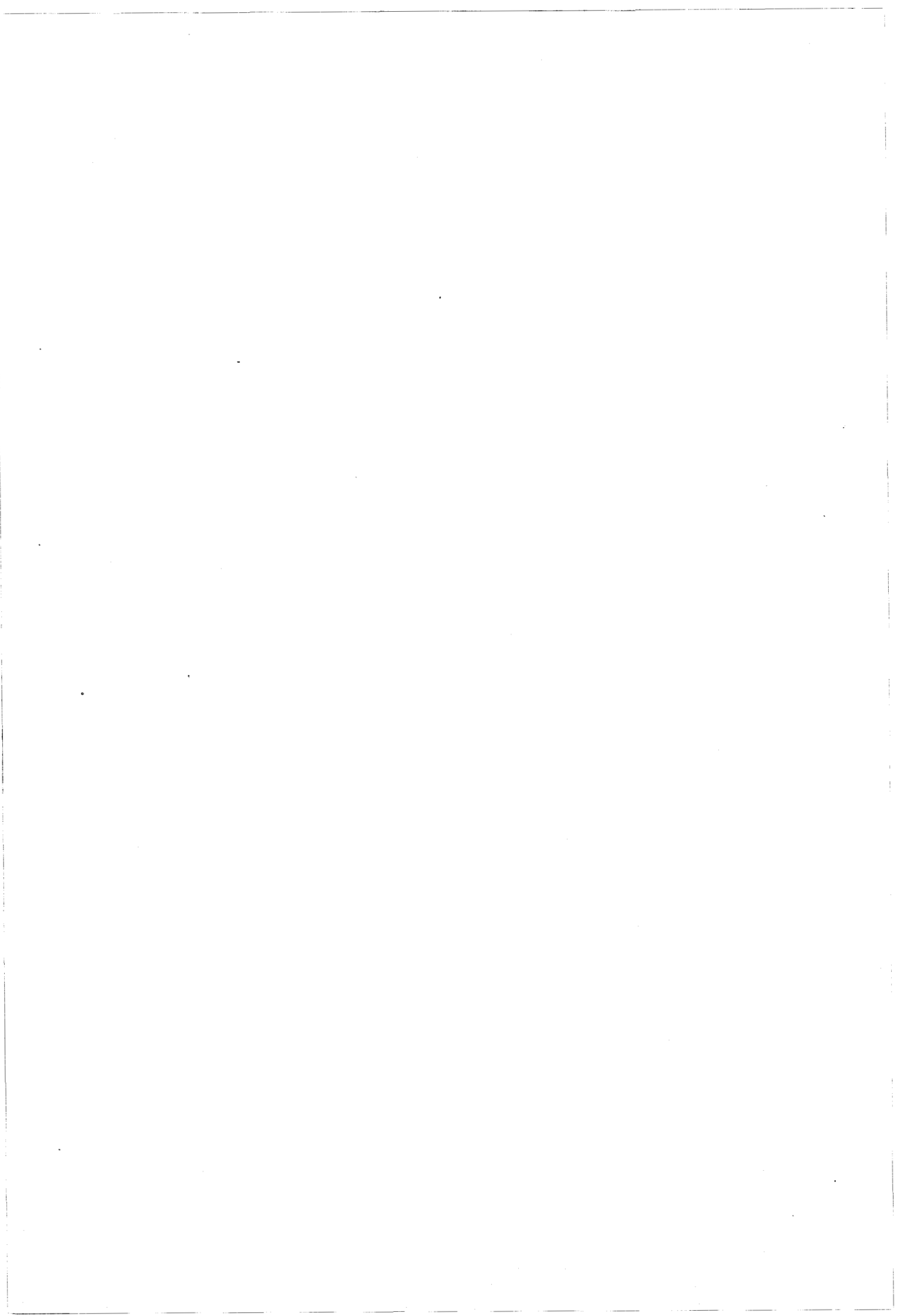




	InSb	GaAs
Paramètre du réseau	6,47877 Å	5,65325 Å
Température de fusion	798 K	1518 K
Largeur de bande interdite	0,230 eV à 77 K	1,508 eV à 77 K
Constante diélectrique	16	12,85
Masse effective		
- des électrons	0,013 $m_0$	0,063 $m_0$
- des trous lourds	0,43 $m_0$	0,50 $m_0$
- des trous légers	0,016 $m_0$	0,076 $m_0$
Constante piezoélectrique $e_{14}$	0,071 C m <sup>-2</sup>	0,157 C m <sup>-2</sup>
Modules élastiques à 300 K		
- $C_{11}$	66,7 10 <sup>10</sup> dyn cm <sup>-2</sup>	119 10 <sup>10</sup> dyn cm <sup>-2</sup>
- $C_{12}$	36,4 — —	53,8 — —
- $C_{44}$	30,2 — —	59,5 — —
Vecteur de Burgers	4,58 Å	4 Å

*Tableau I : Valeurs des paramètres utilisés dans les simulations numériques d'effet Hall et de mobilité [1, 2, 3].*





BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE V

- [1] BLAKEMORE J.S.  
J. Appl. Phys. 53, 10 (1982) 124.
  
- [2] NEUBERGER M.  
Handbook of electronic materials Vol. 2 IFI/Plenum  
New York (1971).
  
- [3] HILSUM C., ROSE-INNES A.C.  
Semiconducting III-V compounds. Pergamon Press New York  
(1961).
  
- [4] STILMAN G.E., WOLFE M.  
Thin Solid Films 31 (1976) 69.
  
- [5] BLOOD P., ORTON J.W.  
Acta electronica 25, 2 (1983) 103.
  
- [6] BATE R.T.  
Semiconductors and semimetals Vol. 4. Academic Press  
New York (1975).
  
- [7] FARVACQUE J.L., FERRE D., LENGART P.  
Inst. Phys. Conf. Ser. 59 (1981) 389.
  
- [8] LANNOO M.  
The handbook of surfaces and interfaces Vol. 1.  
Dobrzynski (ed.) Garland STPM New York (1978) 11.
  
- [9] VIGNAUD D., FARVACQUE J.L.  
Thirteenth int. conf. on defects in semiconductors.  
Kimerling L.C., Parsey J.M. (eds.) (1985) 373.
  
- [10] " " PÖDOR  
Cours de l'Ecole d'Ete de Erice (1974).

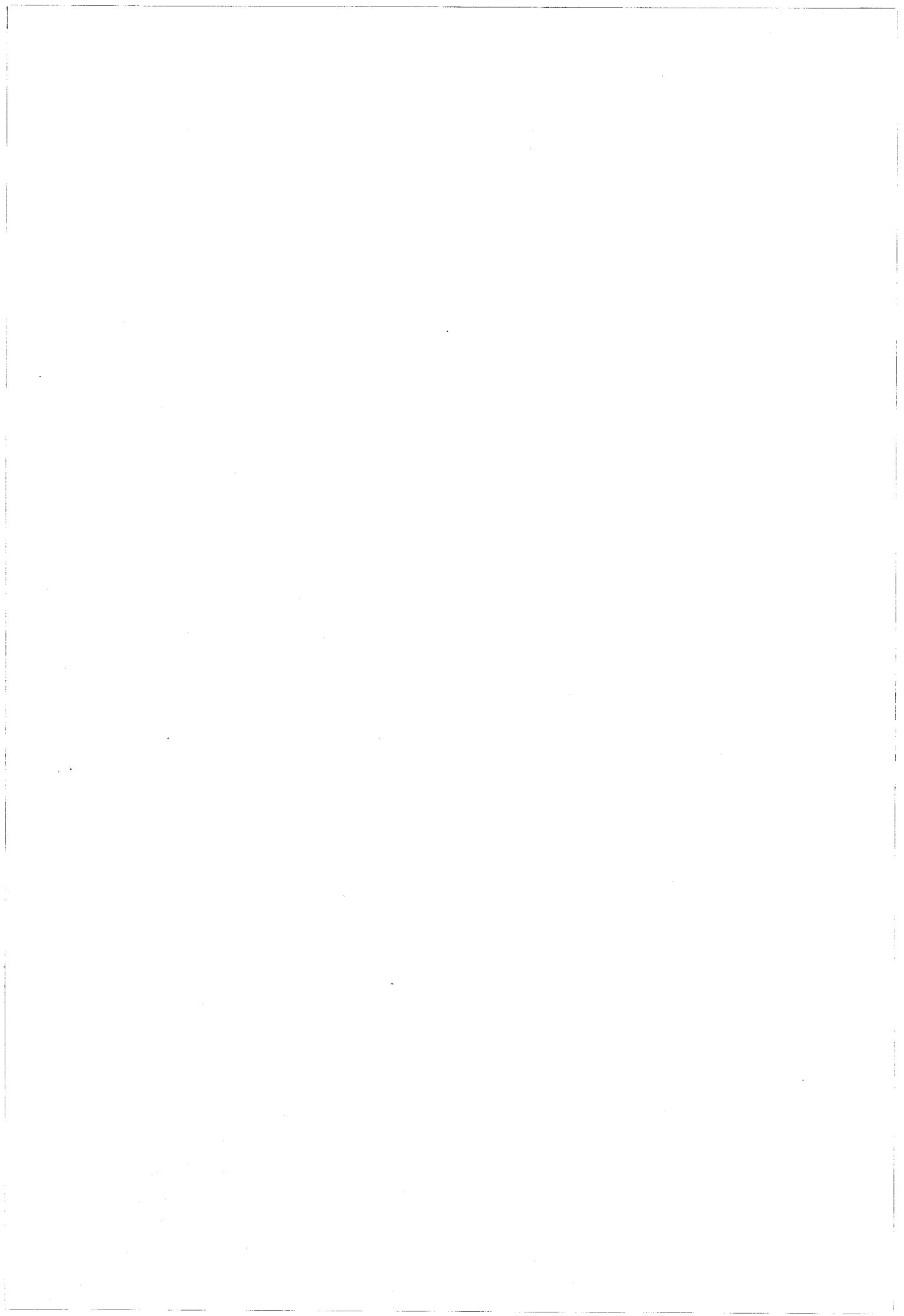
- [11] FARVACQUE J.L.  
J. de Phys. Colloque C2 sup. au n°6 39 (1978) 25.
- [12] TEICHLER H.  
Lattice defects in semiconductors  
Inst. Phys. Conf. Ser. 23 (1975) 374.
- [13] MASUT R., PENCHINA C.M., FARVACQUE J.L.  
J. Appl. Phys. 53, 7 (1982) 4964.



CHAPITRE VI

PROPRIÉTÉS GALVANOMAGNÉTIQUES

DES ÉCHANTILLONS DÉFORMÉS



## CHAPITRE VI

\*\*\*

### PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES DES ECHANTILLONS DEFORMES

#### VI-1. INFLUENCE DE LA DEFORMATION PLASTIQUE SUR LES PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES

VI-1.1. Conditions expérimentales

VI-1.2. Relation entre grandeurs mesurées et grandeurs calculées

VI-1.3. Effet Hall et résistivité de GaAs déformé

VI-1.4. Effet Hall et résistivité de InSb déformé

#### VI-2. ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

VI-2.1. Problèmes liés à la description du matériau de référence

VI-2.2. Principe de dépouillement

VI-2.3. Analyse de l'effet Hall dans GaAs déformé

#### VI-3. DISCUSSION

VI-3.1. Comparaison des résultats obtenus dans GaAs et InSb

VI-3.2. Sur une origine possible des défauts ponctuels créés au cours de la déformation



## VI-1. INFLUENCE DE LA DEFORMATION PLASTIQUE SUR LES PROPRIETES GALVANOMAGNETIQUES.

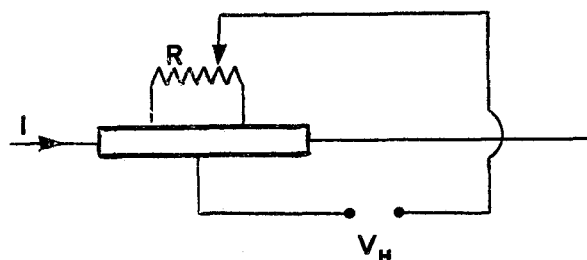
### VI-1.1. Conditions expérimentales

Les échantillons de mesures électriques sont extraits des éprouvettes de déformation ; leurs dimensions sont environ  $10 \times 1,5 \times 1,5 \text{ mm}^3$ . L'axe des barreaux est suivant la direction  $\langle 123 \rangle$ , parallèle à l'axe de compression.

Les contacts électriques nécessaires à la mesure de la résistivité et de l'effet Hall ont été réalisés, sur InSb, avec des fils de cuivre soudés à l'indium. Sur GaAs de type n, les contacts ohmiques sont généralement réalisés par évaporation d'un mélange Ni/Ge-Au, suivi d'un recuit à  $450^\circ\text{C}$  sous atmosphère d'hydrogène [1,2]. La technique mise en oeuvre, bien adaptée à la fabrication des composants, s'est avérée peu commode pour réaliser les contacts aux extrémités et sur les faces latérales de nos échantillons. Nous lui avons préféré une "recette" d'alliage à l'étain sous atmosphère d'hydrogène en présence de chlorure d'ammonium. Nous nous sommes assurés que, pour des échantillons équivalents, les mesures de résistivité et d'effet Hall étaient identiques pour les deux types de contacts. Une méthode d'alliage à l'indium dans les mêmes conditions mais après avoir porté à  $650^\circ\text{C}$  une lame de zinc placée dans le four, nous a permis de réaliser les contacts ohmiques sur GaAs de type p.

Les mesures ont été effectuées entre la température ambiante et la température de l'azote liquide. Les échantillons sont polarisés en courant avec des intensités suffisamment faibles pour rester dans un domaine ohmique et assurer un bon équilibre thermique entre l'échantillon et le fluide cryogénique. La résistivité  $\rho$  est déterminée pour les faibles valeurs, en mesurant le courant traversant l'échantillon et la tension à ses bornes. Pour des valeurs de  $\rho$  élevées, la résistance de l'échantillon est mesurée directement avec un électromètre Keithley utilisé en fonction ohmmètre.

Une méthode de pont diviseur est utilisée pour mesurer la tension de Hall (Figure VI-1). Elle permet d'éviter la tension parasite de désalignement qui existe inévitablement dans une méthode classique à deux contacts. La tension de Hall est égale à la moyenne de quatre mesures de la tension transverse obtenues en inversant successivement le sens du courant et le sens du champ magnétique. Cette méthode permet d'éliminer les contributions des effets thermomagnétiques.



*Figure VI-1 : Dispositif expérimental pour mesurer l'effet Hall des échantillons.*

#### VI-1.2. Relation entre grandeurs mesurées et grandeurs calculées

Les grandeurs accessibles expérimentalement sont le coefficient de Hall et la résistivité alors que les grandeurs déterminées théoriquement sont les concentrations des porteurs libres et leurs mobilités. Dans le cas d'une conduction à un seul type de porteurs et dans un champ magnétique faible, la densité électronique se déduit du coefficient du Hall par la relation  $R_H = \alpha/ne$ , où  $e$  est la charge de l'électron et  $\alpha$  un coefficient dépendant du mécanisme de diffusion des porteurs.

Les mesures d'effet Hall et de résistivité permettent le calcul de la mobilité de Hall  $\mu_H = R_H/\rho$ , reliée à la mobilité de dérive par  $\mu_H = \alpha \mu$ . La détermination exacte de la mobilité de dérive dans le cas général est un problème complexe puisqu'elle nécessite de calculer, à toute température et pour chaque famille de porteurs libres, le coefficient de Hall dû à plusieurs mécanismes de conduction agissant simultanément. Nous avons adopté, pour dépouiller nos résultats expérimentaux, l'approximation utilisée couramment dans les études de caractérisation des semiconducteurs et qui consiste à confondre la mobilité de dérive et la mobilité de Hall [3,4].

### VI-1.3. Effet Hall et résistivité de GaAs déformé

L'effet Hall et la résistivité ont été mesurés sur une série d'échantillons tous déformés à la même température ( $T = 625 \text{ K}$ ) mais à différents taux de déformation. L'absence d'une contamination possible des échantillons, due aux conditions de déformation, a été contrôlée en mesurant un échantillon non déformé mais ayant subi le même traitement thermique que les échantillons déformés.

Un exemple type de la réduction du nombre des porteurs libres après déformation plastique est donné sur la figure VI-2 dans le cas d'un matériau de type n. Si nous attribuons à un niveau profond associé aux dislocations l'effet de piégeage observé, nous concluons à un rôle accepteur de la dislocation. La dépendance en température de  $R_H$ , très faible dans le matériau de référence puisqu'elle correspond alors au domaine d'exhaustion des impuretés, est d'autant plus marquée que le taux de déformation des échantillons est plus grand. La variation  $\Delta n/n$  du nombre des porteurs libres atteint environ 90 % à la température de l'azote liquide dans les échantillons les plus déformés.

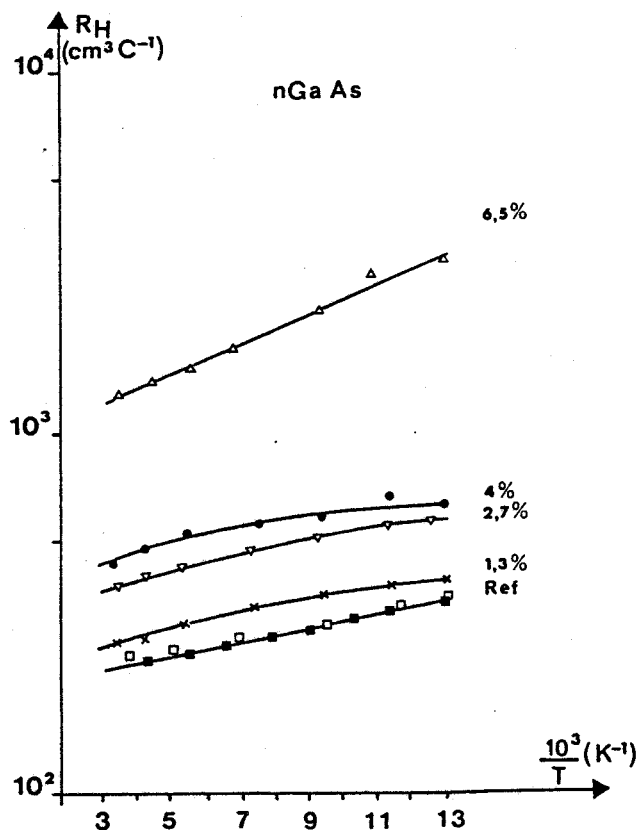


Figure VI-2 : Variation expérimentale de la constante de Hall à différents taux de déformation. Cas de GaAs de type n.

La déformation plastique induit également une diminution du nombre des porteurs libres dans le matériau de type p, révélant ainsi le caractère amphotère des centres profonds créés par la déformation. Les mesures de la constante de Hall en fonction de la température sont reportées sur la figure VI-3 ; elles correspondent à des échantillons contenant  $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  centres accepteurs. A taux de déformation identique, la variation relative  $\Delta p/p$  du nombre de porteurs est du même ordre de grandeur que celle observée dans le matériau de type n.

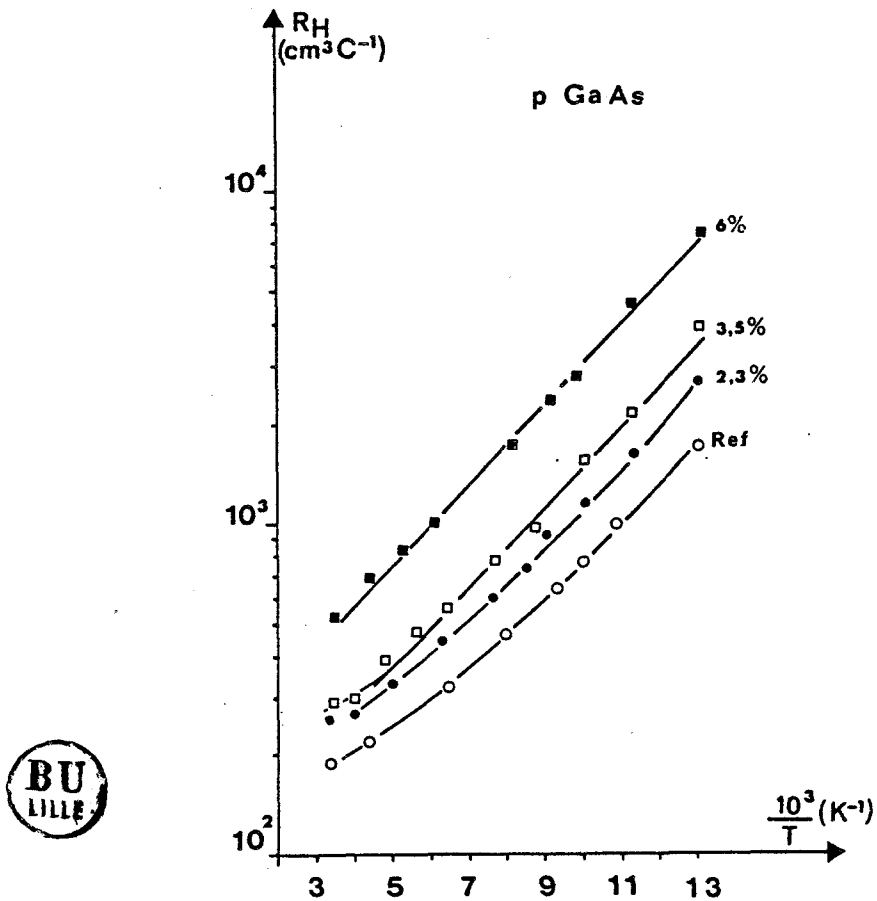


Figure VI-3 : Variation expérimentale de la constante de Hall à différents taux de déformation. Cas de GaAs de type p.

De ces résultats expérimentaux, nous pouvons dès maintenant dégager quelques réflexions qui serviront de base à la discussion du paragraphe suivant :

• le comportement plastique de l'arséniure de gallium est peu sensible au caractère n ou p du matériau, tout au moins pour les faibles valeurs du dopage que nous avons étudiées. Deux échantillons déformés dans les mêmes conditions doivent alors correspondre à des sous-structures de dislocations comparables. Ni l'analyse des courbes contrainte - déformation, ni l'observation directe en microscopie électronique en transmission ou topographique aux rayons X par méthode de Lang n'a effectivement révélé de différences significatives entre un échantillon de type n et un échantillon de type p.

• dans un modèle de piégeage des porteurs libres par les dislocations, le niveau associé au défaut doit se situer dans la partie centrale de la bande interdite pour que la réduction de la densité des porteurs libres soit du même ordre de grandeur dans le matériau de type n et dans le matériau de type p.

La variation de conductivité mesurée expérimentalement (figures VI-4 et VI-5) provient d'une part de la réduction de la densité de porteurs libres, d'autre part de la réduction de leur mobilité. La mobilité réciproque  $\mu^{-1}$  induite par les dislocations est obtenue en appliquant la règle de Matthiessen

$$\mu_{\text{Dislo.}}^{-1} = \mu_{\text{Def.}}^{-1} + \mu_{\text{Ref.}}^{-1}$$

La figure VI-6 représente la mobilité pour différentes valeurs du taux de déformation. Dans les échantillons de type n, la mobilité électronique, de l'ordre de  $4000 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^2$  pour la référence, décroît jusqu'à environ  $10 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^2$  pour un taux de déformation  $\delta l/l \approx 6 \%$ . Dans GaAs de type p, la mobilité des porteurs est également très réduite dans les échantillons déformés (figure VI-7). Dans les deux cas, matériaux de type n et de type p, la dépendance en température de la mobilité est modifiée de manière significative par la déformation plastique.

Figure VI-4

Variation expérimentale de la résistivité des échantillons déformés. Cas de GaAs de type n.

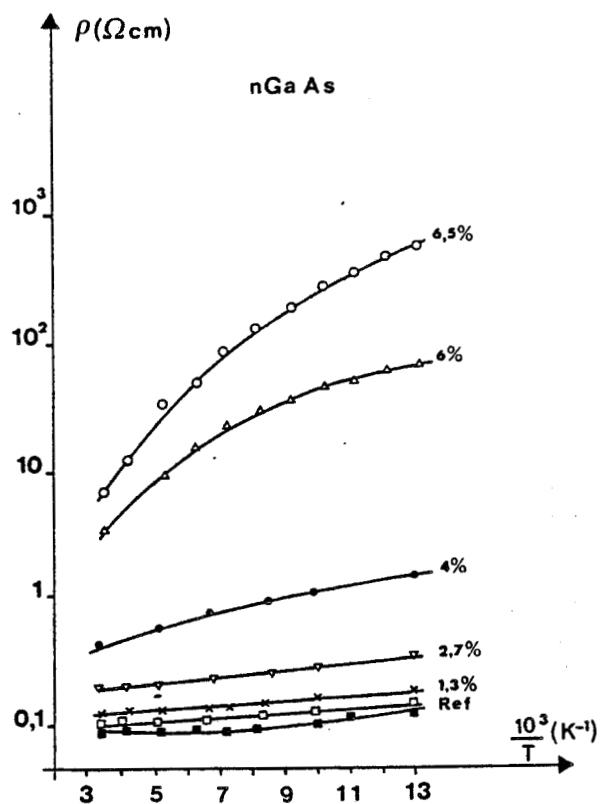


Figure VI-5

Variation expérimentale de la résistivité des échantillons déformés. Cas de GaAs de type p.

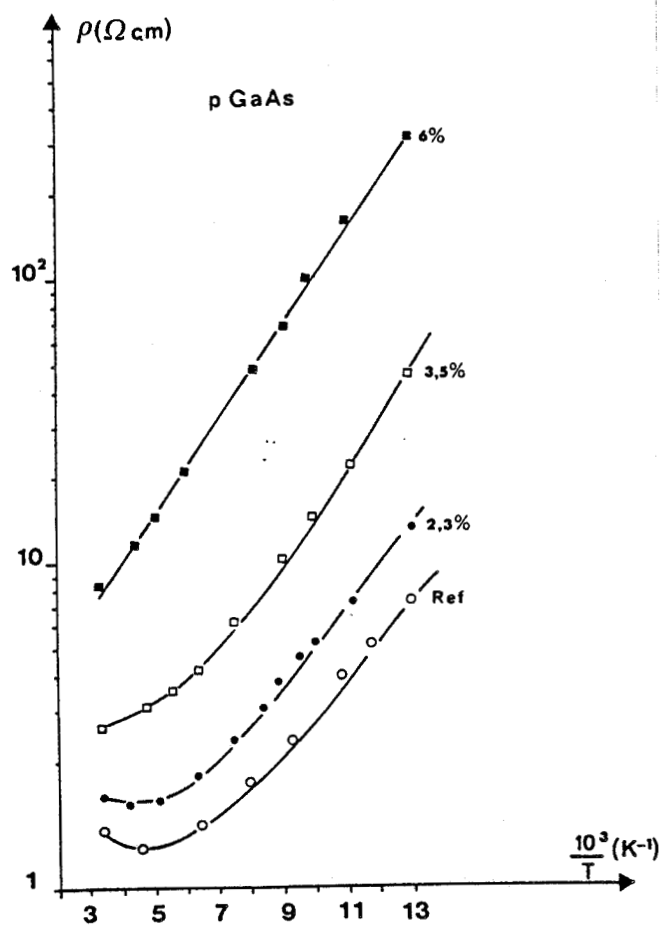


Figure VI-6

Variation expérimentale de la mobilité des échantillons déformés. Cas de GaAs de type n.

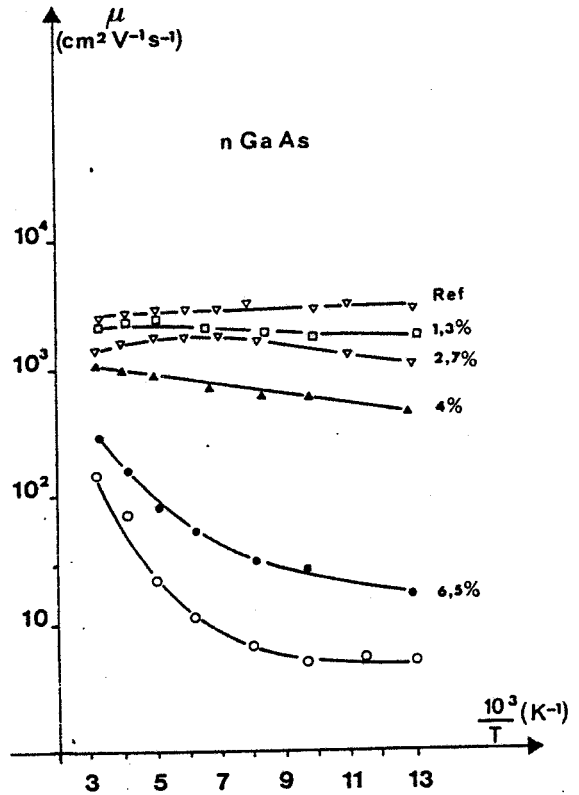
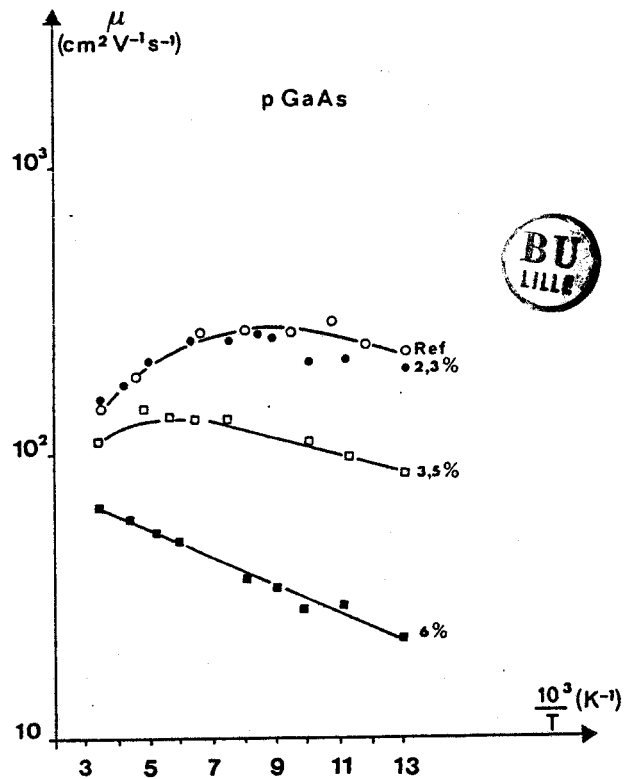


Figure VI-7

Variation expérimentale de la mobilité des échantillons déformés. Cas de GaAs de type p.



#### VI-1.4. Effet Hall et résistivité de InSb déformé

L'antimoniure d'indium de type n représente un cas de figure intéressant car la concentration des donneurs  $y$  est extrêmement faible ( $N_D \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) et l'effet d'une déformation plastique même peu importante est très marquée.

\* cas des échantillons déformés en compression

La déformation plastique provoque une diminution systématique de la densité des porteurs libres dans le régime extrinsèque, aussi bien dans le matériau de type n que dans le matériau de type p. Cette réduction est illustrée par les figure VI-8 et VI-9.

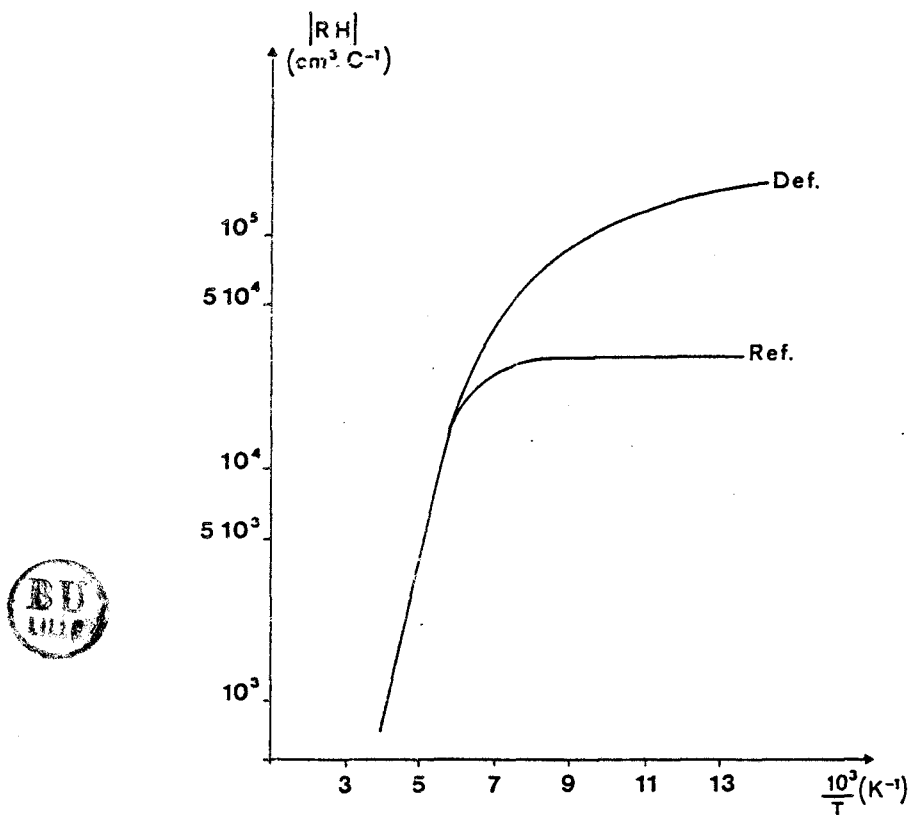


Figure VI-8 : Courbe de variation de la constante de Hall pour un échantillon de référence et pour un échantillon déformé en compression ( $\delta l/l \approx 2\%$ ). Cas de InSb de type n.



De l'ensemble des mesures effectuées se dégagent plusieurs points intéressants :

- quel que soit le taux de déformation des échantillons mesurés, la courbe d'effet Hall d'un échantillon déformé ne croise jamais la courbe d'effet Hall de l'échantillon de référence.

- la réduction du nombre des porteurs libres est moins importante, à taux de déformation comparables, dans le type p que dans le type n. Si l'origine du piégeage est la même dans les deux cas, les différences entre les deux matériaux sont cependant plus faibles que ne le laisse supposer le rapport de leurs taux de dopage.

- la dépendance en température de l'effet Hall n'est que très peu modifiée par la déformation plastique dans les échantillons de type p alors que, dans les échantillons de type n, l'allure de la courbe  $R_H = f(1/T)$  évolue avec le taux de déformation.

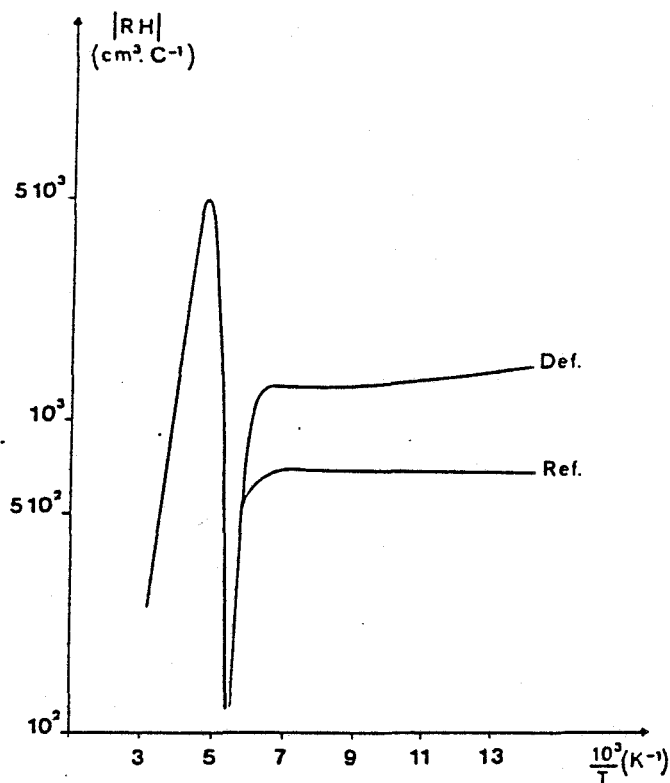


Figure VI-9 : Courbe de variation de la constante de Hall pour un échantillon de référence et pour un échantillon déformé en compression ( $\delta l/l \approx 2\%$ ). Cas de InSb de type p.

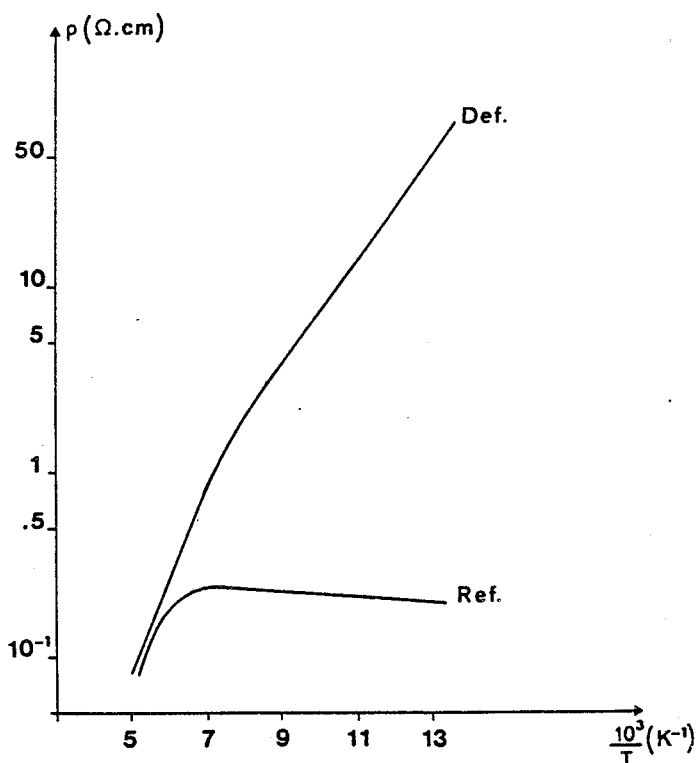
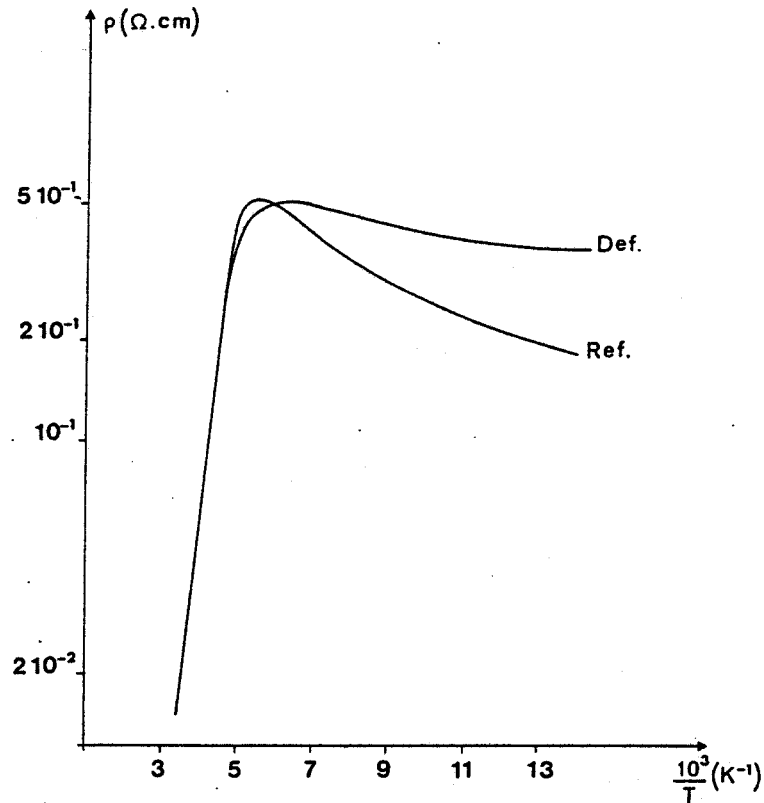


Figure VI-10 : Variation de la résistivité du matériau de référence et d'un échantillon déformé en compression ( $\delta l/l \approx 2\%$ ). Cas de InSb de type n.



La résistivité de l'antimoniure d'indium de type n est affectée de manière très spectaculaire par la déformation plastique. Alors que la résistivité du matériau de référence est de l'ordre de  $0,2 \Omega \text{ cm}$ , elle atteint à 77 kelvins,  $10^4 \Omega \text{ cm}$  pour un échantillon déformé de quelques pour cent (figure VI-10). A cause de ces valeurs de résistivité très élevées, la constante de Hall n'a pu être mesurée dans de bonnes conditions dans les échantillons les plus déformés. La variation de la résistivité dans l'antimoniure d'indium de type p n'atteint jamais une telle amplitude car la densité des porteurs libres susceptibles d'écranter les centres diffuseurs introduits par la déformation plastique est toujours beaucoup plus grande que dans le matériau de type n (figure VI-11).



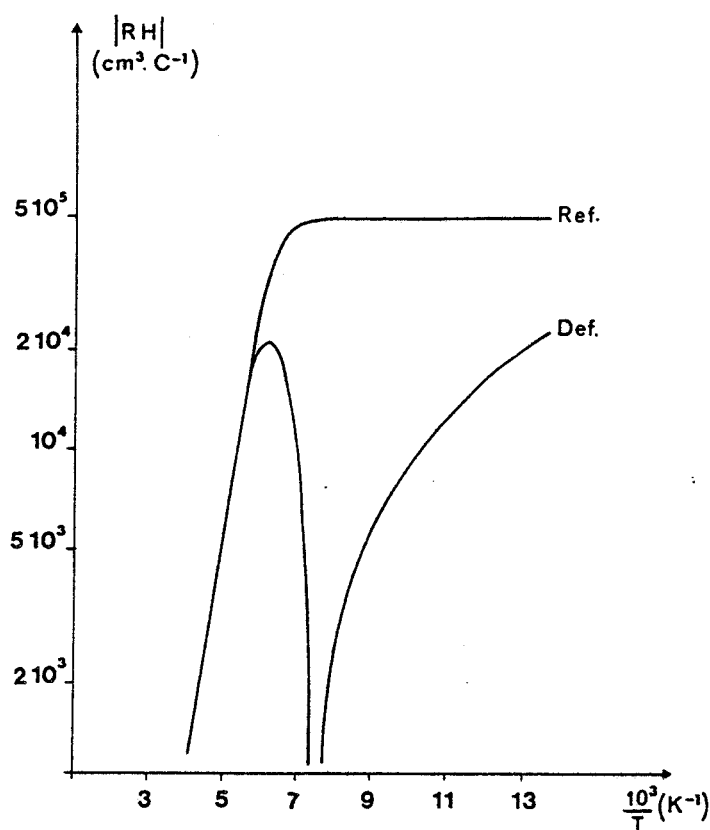
*Figure VI-11 : Variation de la résistivité du matériau de référence et d'un échantillon déformé en compression ( $\delta l/l \approx 2\%$ ). Cas de InSb de type p.*



\* cas des échantillons déformés en torsion

La sous structure de dislocations introduite dans les échantillons déformés en compression étant composée d'une majorité de segments à composante coin, il nous a semblé intéressant de déformer des échantillons en torsion afin de disposer de sous-structures constituées essentiellement de dislocations vis pour lesquelles il n'y a pas de diffusion liée au champ de déformation à longue distance.

L'étude, réalisée sur l'antimoniure d'indium de type n, a conduit à des résultats tout à fait différents de ceux obtenus pour les échantillons déformés en compression. Un exemple en est donné sur la figure VI-12). Pour



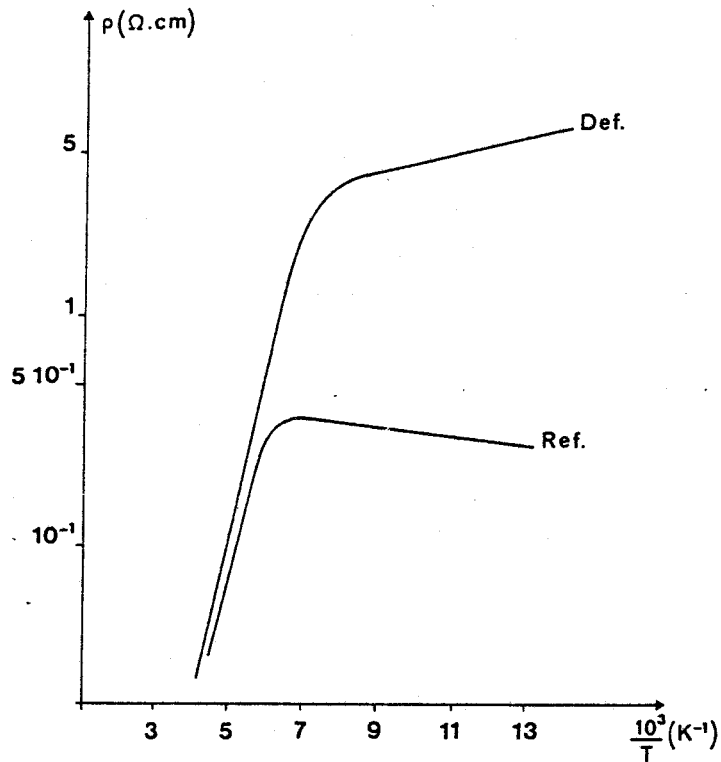
*Figure VI-12 a : Evolution caractéristique de la constante de Hall d'un échantillon de référence et d'un échantillon d'antimoniure d'indium de type n déformé en torsion.*



une torsion de  $10^\circ/\text{cm}$  effectuée à 500 K, l'effet Hall change de signe et présente, en fonction de la température, l'évolution caractéristique d'un matériau de type p illustrant ainsi le caractère fortement accepteur des défauts introduits au cours de la déformation.

La résistivité des échantillons déformés en torsion est plus grande que celle de l'échantillon de référence mais n'atteint pas de valeurs très élevées, comparables à celles mesurées sur les échantillons déformés en compression. Ce résultat est à relier au caractère peu efficace de la diffusion par les dislocations vis.

L'antimoniure d'indium de type n constitue le cas le plus favorable pour l'observation d'effets très marqués de la déformation et nous n'avons pas renouvelé pour d'autres matériaux les expériences, très délicates, de déformation en torsion.



*Figure VI-12 b : Evolution caractéristique de la résistivité d'un échantillon de référence et d'un échantillon d'antimoniure d'indium de type n déformé en torsion.*

En comparant l'ordre de grandeur des effets observés, leur évolution en fonction de la température et du taux de déformation avec les variations données par le modèle théorique que nous avons présenté, nous discutons dans les paragraphes suivants du rôle respectif des dislocations et des défauts ponctuels sur les effets de piégeage et de diffusion. En particulier, tout en privilégiant le cas de GaAs pour lequel le domaine de température correspondant au régime de conduction extrinsèque est plus étendu, nous montrons quels sont dans GaAs comme dans InSb, les problèmes liés à l'interprétation des résultats expérimentaux.

VI-2. ANALYSE ET DISCUSSION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

VI-2.1. Problèmes liés à la description du matériau de référence

Dans les semiconducteurs, la position du niveau de Fermi  $E_F$  dépend de la distribution des électrons suivant les différents états permis : niveaux d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction mais aussi états localisés associés aux défauts donneurs et accepteurs présents dans le matériau. L'équation de neutralité électrique du cristal établit la relation entre la valeur de  $E_F$  et les caractéristiques de chaque famille de défauts (concentration, énergie de l'état localisé) soit :

$$p - n + \sum_{\ell} N_{D_{\ell}}^{+} - \sum_n N_{A_n}^{-} = 0$$

Les concentrations  $n$  et  $p$  des porteurs libres dans les bandes sont données par :

$$n = N_C \exp - \frac{(E_C - E_F)}{kT} \quad \text{avec} \quad N_C = 2 \left( \frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$p = N_p \exp \frac{(E_V - E_F)}{kT} \quad \text{avec} \quad N_p = 2 \left( \frac{2\pi m_h^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Les concentrations d'impuretés ionisées s'écrivent

$$N_D^{+} = \frac{N_{D_{\ell}}}{1 + g_{D_{\ell}} \exp \frac{E_F - E_{D_{\ell}}}{kT}}$$

$$N_{A_n}^{-} = \frac{N_{A_n}}{1 + g_{A_n} \exp \frac{E_{A_n} - E_F}{kT}}$$

où le terme  $g$  est le facteur de dégénérescence de l'état d'impureté considéré.

Si l'évolution de la densité des porteurs libres avec la température est connue, alors la résolution numérique de l'équation de neutralité permet, en principe, d'évaluer les concentrations des différents défauts et les énergies d'activation correspondantes.

L'hypothèse la plus simple consiste à considérer uniquement deux familles de défauts

- l'une en densité importante et située près d'un bord de bande, détermine le type  $n$  ou  $p$  du matériau. Elle correspond à ce qui est généralement défini comme un niveau de dopage.

- l'autre, en densité moindre, est représentative de l'ensemble des défauts situés plus profondément dans la bande interdite et dont l'effet est de compenser le niveau de dopage.

\* exemple de l'arséniure de gallium de type  $p$ .

Dans un modèle décrivant le matériau de référence de type  $p$  avec un nombre constant de donneurs ionisés et une famille d'accepteurs, les valeurs de  $N_A$ ,  $E_A$  et  $N_D$  sont respectivement :

$$N_A \simeq 6,91 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} ; E_A = 12,5 \text{ meV}$$

$$N_D \simeq 6,34 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

Bien que rendant compte des valeurs expérimentales de la constante de Hall, cette solution ne peut être retenue car des concentrations de défauts aussi grandes sont incompatibles avec l'ordre de grandeur et l'évolution en fonction de la température de la mobilité mesurée. En effet, la mobilité expérimentale peut être analysée comme résultant d'une diffusion par les phonons optiques et d'une diffusion par les impuretés ionisées suivant une

loi phénoménologique de la forme | 5 | :

$$\mu_{\text{Total}}^{-1} = \mu_{\text{Phonons}}^{-1} + \mu_{\text{impuretés}}^{-1}$$

$$= \left[ 2,5 \cdot 10^{-3} \left( \frac{T}{300} \right)^{2,3} + 4 \cdot 10^{-21} N_I \left( \frac{300}{T} \right)^{1,5} \right] \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

La figure VI-13 sur laquelle sont représentées la contribution  $\mu_{\text{Phonons}}^{-1}$  due aux phonons, la contribution  $\mu_{\text{impuretés}}^{-1}$  due aux impuretés ionisées ainsi que la variation expérimentale de  $\mu^{-1}$  pour GaAs de type p non déformé, illustre l'incapacité du modèle proposé à décrire correctement la référence.

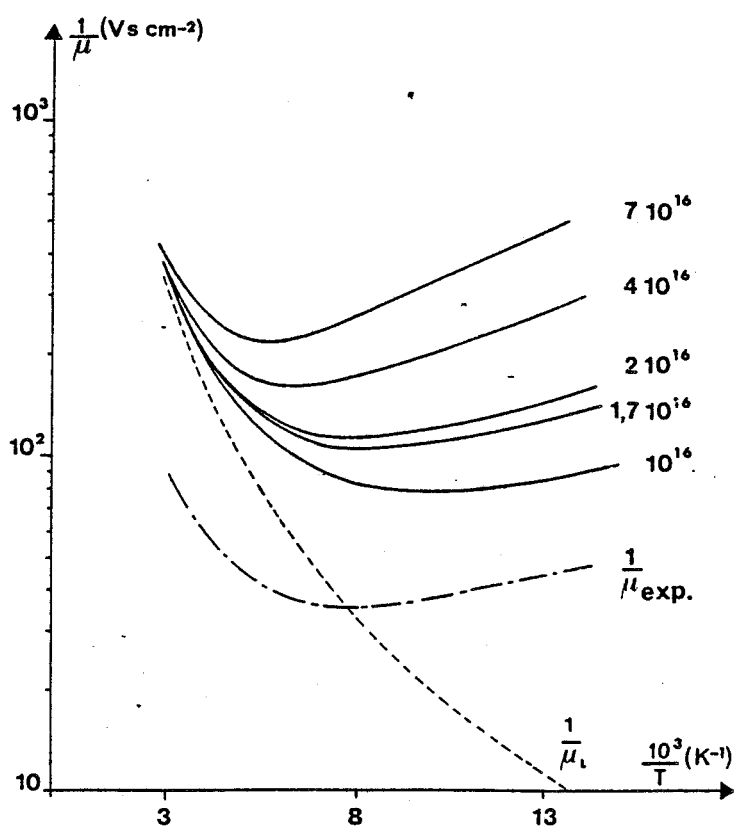


Figure VI-13 : Variation de la mobilité inverse en fonction de  $1/T$  pour différentes valeurs de la densité de donneurs. La courbe  $1/\mu_L$  représente la contribution des phonons à la mobilité totale.



Il est également possible de rendre compte des valeurs expérimentales de la constante de Hall en considérant, en plus des donneurs ionisés, non plus une mais deux familles d'accepteurs peu profonds. Il existe alors une infinité de solutions répondant au problème posé ; elles sont représentées graphiquement sur la figure VI-14 et correspondent toujours à une première famille d'accepteurs dont la concentration est voisine de  $2,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  avec une énergie d'ionisation de l'ordre de 58 meV et à une seconde famille d'accepteurs en densité d'autant plus grande que leur énergie d'ionisation est plus faible ; la concentration des donneurs et celle des accepteurs les plus légers diffèrent d'une quantité approximativement constante. Dans ce modèle, la densité d'impuretés ionisées imposant la valeur de la mobilité peut, sans difficulté, être choisie de manière à correspondre aux valeurs expérimentales. Dans ces conditions, un choix raisonnable des paramètres est :

$$N_{A_I} \simeq 3,04 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad E_{A_I} \simeq 24 \text{ meV}$$

$$N_{A_{II}} \simeq 2,7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad E_{A_{II}} \simeq 58 \text{ meV}$$

$$N_D \simeq 1,7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

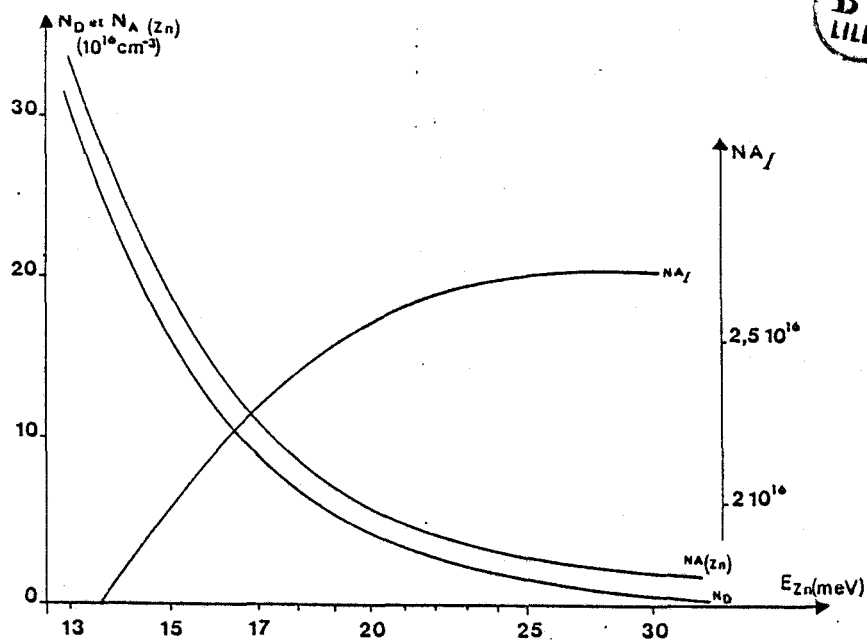


Figure VI-14 : Concentration de chacune des familles d'accepteurs et des donneurs décrivant les variations de la constante de Hall dans GaAs de type p en fonction de la position  $E(Z_n)$  du niveau associé aux accepteurs légers.

Une étude de l'énergie d'activation des trous en fonction de la concentration de zinc dans des couches épitaxiées faiblement dopées ayant montré l'existence d'un niveau accepteur profond, d'origine inconnue, à 56 meV du sommet de la bande de valence, nous avons choisi de retenir cet ensemble de paramètres pour décrire le cristal de référence | 6 | . Si l'accepteur léger peut raisonnablement être associé au zinc avec lequel est dopé le matériau pour le rendre p, les impuretés et les défauts de réseau, globalement décrits par les donneurs et les accepteurs profonds ne sont pas identifiés.

\* Cas des matériaux de type n.

La variation théorique de l'effet Hall dans le matériau de référence de type n - GaAs et InSb - ne correspond aux valeurs mesurées que pour une énergie d'activation des donneurs, voisine de zéro. Un tel comportement ne doit pas surprendre si l'on se souvient que des donneurs en densité importante ne peuvent plus être décrits en termes d'états localisés situés sous la bande de conduction mais forment au contraire une bande d'états délocalisés à l'énergie  $E_C$ .

Dans ce cas, il importe de reconsidérer le problème de la dégénérescence de l'état d'impureté. Généralement, lorsqu'on considère des impuretés sans interaction, on admet qu'un seul électron peut occuper l'état fondamental g fois dégénéré de l'impureté. Cette restriction n'a plus lieu dans le cas d'une bande d'impuretés pour laquelle les fonctions d'onde sont suffisamment délocalisées pour que plus d'un électron puisse occuper les états correspondants à un atome d'impureté. La seule condition est alors que les  $g N_D$  états possibles contiennent moins de  $N_D$  électrons.

L'équation de neutralité applicable à cette situation particulière est | 7 | :

$$n + N_A - N_D \left( 1 - \frac{g}{1 + \exp \frac{E_C - E_F}{KT}} \right) = 0$$

plutôt que la relation habituelle

$$n + N_A - N_D \left( 1 - \frac{1}{1 + g \exp \frac{E_D - E_F}{KT}} \right) = 0$$

A partir de cette analyse, nous avons évalué à  $N_D \simeq 3,06 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  la densité de donneurs dans GaAs de type n. La densité d'accepteurs compensant partiellement les donneurs est de l'ordre de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  mais compte tenu de l'imprécision sur les mesures de la densité de porteurs libres, cette valeur ne nous semble pas significative ; elle indique tout au plus une compensation très faible justifiant que nous prenions  $N_A = 0$  dans la suite de ce travail.

#### VI-2.2. Principe de dépouillement

Dans l'hypothèse où les dislocations sont, au moins partiellement, responsables de la diminution du nombre de porteurs libres, la charge excédentaire  $n_t$  piégée sur les dislocations vaut :

$$n_t = \frac{2D}{b} \left( \frac{1}{1 + \exp \frac{E_D^* - E_F}{KT}} - \xi \right)$$

Inversant l'expression précédente, il est alors possible de tracer, pour chaque échantillon déformé, l'évolution du niveau effectif  $E_D^*$  en fonction de la charge excédentaire par site le long de la dislocation. La position du niveau de Fermi est déterminée par la valeur expérimentale de la densité  $n$  ou  $p$  des porteurs libres. La position du niveau  $E_D^0$  associé à la dislocation dans son état neutre se déduit de  $E_D^*$  par

$$E_D^0 = E_D^* - AY$$

Y est la charge excédentaire par site.

AY représente le décalage total du niveau d'énergie associé à la dislocation dû à la charge piégée le long de la ligne.

La quantité A, dont l'expression a été établie au chapitre IV s'écrit :

$$A = \frac{e^2}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_L b} \left[ \text{Log} \left( \frac{\lambda_G}{b} \right) - \frac{1}{2} \right] + \frac{\alpha}{\epsilon_L}$$

Les valeurs de Y pour lesquelles  $E_D^*$  est défini sont situées dans l'intervalle  $]-2\xi, 2(1-\xi)[$  ; elles n'ont toutefois de signification physique que si les valeurs de  $E_D$  qui leur correspondent sont comprises entre 0 et  $E_G$ .

Les courbes  $E_D^* = f(Y)$  et  $E_D = g(Y)$  sont représentées sur les figures VI-15 et VI-16 pour deux échantillons déformés d'arséniure de gallium de type p et pour deux échantillons déformés d'arséniure de gallium de type n. Ces courbes montrent d'abord que l'évolution de  $E_D$  avec Y est essentiellement déterminée par le terme AY et par là même peu sensible à la valeur choisie pour le paramètre  $\xi$ . Elles montrent également que, quel que soit le taux de déformation des échantillons, la charge excédentaire par site reste toujours très faible ( $Y < 0,3$ ), ce qui ne sera compatible avec une réduction importante de la densité de porteurs libres que si la densité de dislocations est très élevée. Elles montrent enfin, et c'est là peut être le résultat le plus intéressant de cette approche, que, quel que soit le niveau  $E_D^0$  associé à la dislocation neutre, la valeur de la charge excédentaire par site est, dans tous les échantillons déformés, une fonction extrêmement peu dépendante de la température.

Ces conclusions ont des conséquences très importantes pour l'analyse des résultats expérimentaux.

Dans le cristal de référence, l'équation de neutralité électrique s'écrit

$$p - n + \sum_{\ell} N_{D_{\ell}}^{+} - \sum_n N_{A_n}^{-} = 0$$

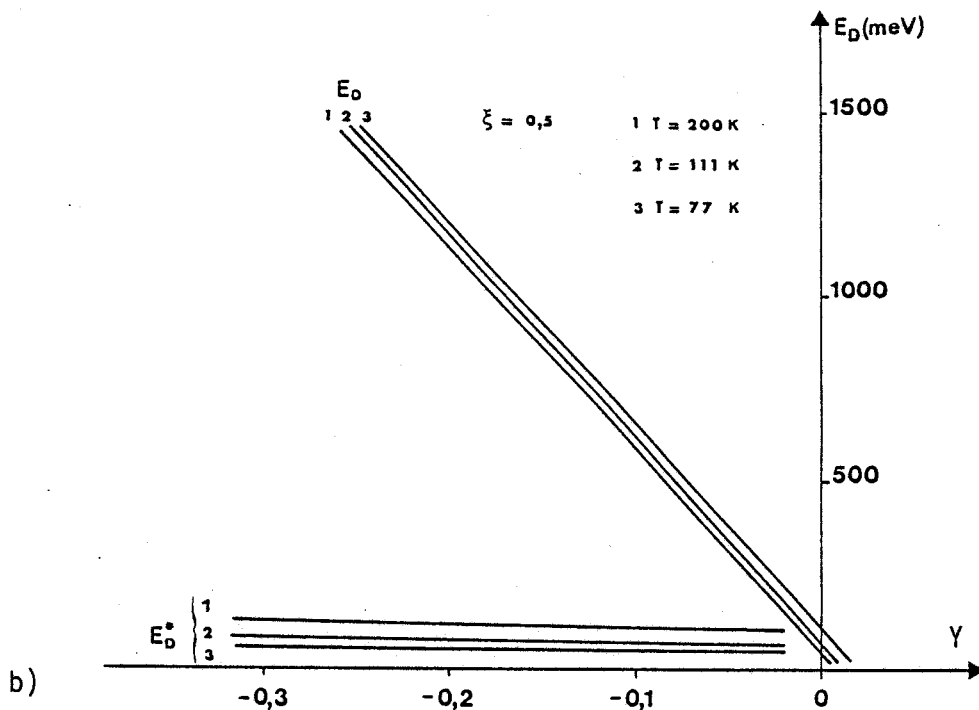
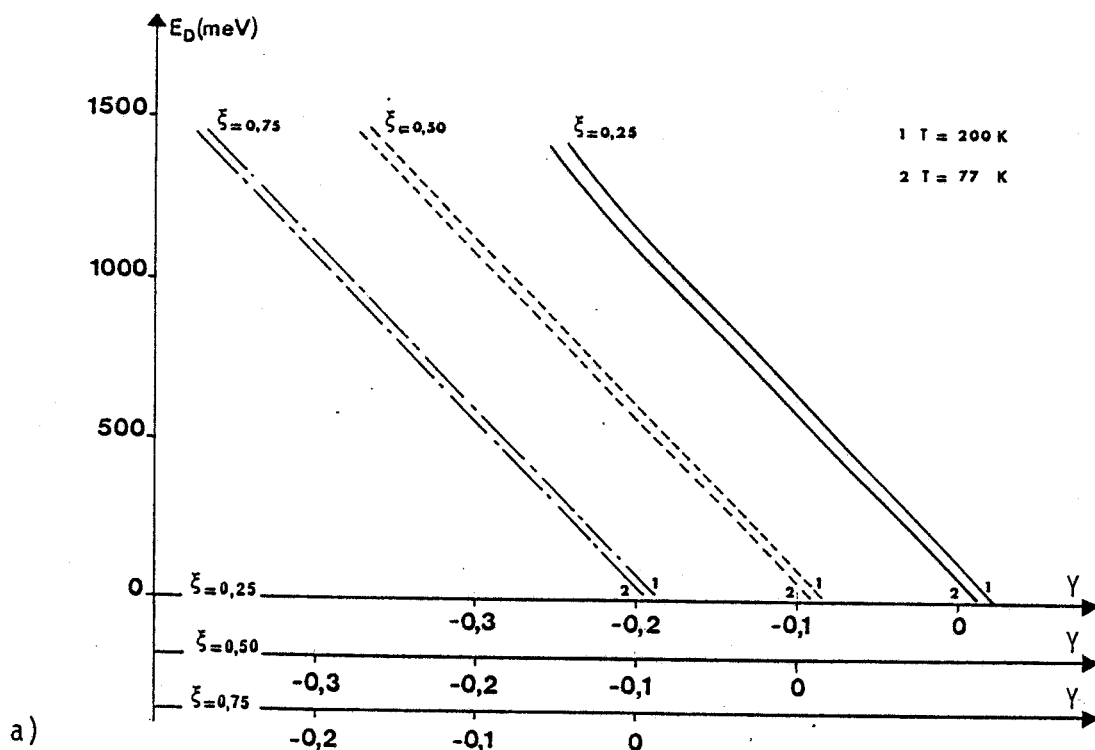


Figure VI-15 : Position des niveaux  $E_D$  et  $E_D^*$  associés à la dislocation neutre en fonction de la variation du taux d'occupation de la dislocation.

L'écrantage de la ligne chargée est assuré par les porteurs libres et les impuretés ionisées.

Cas de p - GaAs. a)  $\delta l/l \simeq 3,5 \%$  b)  $\delta l/l \simeq 6 \%$ .

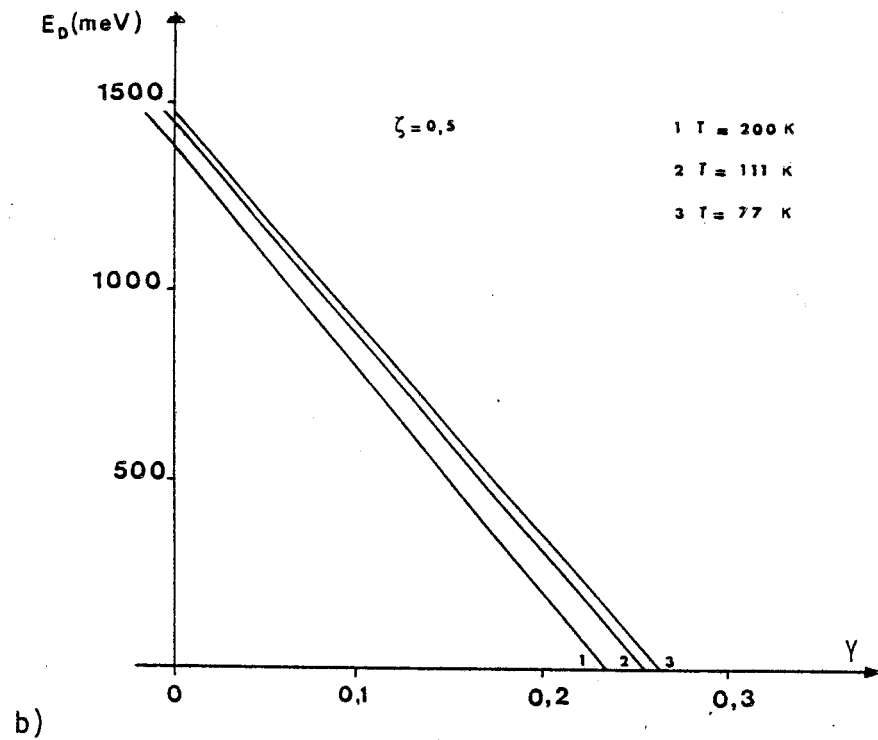
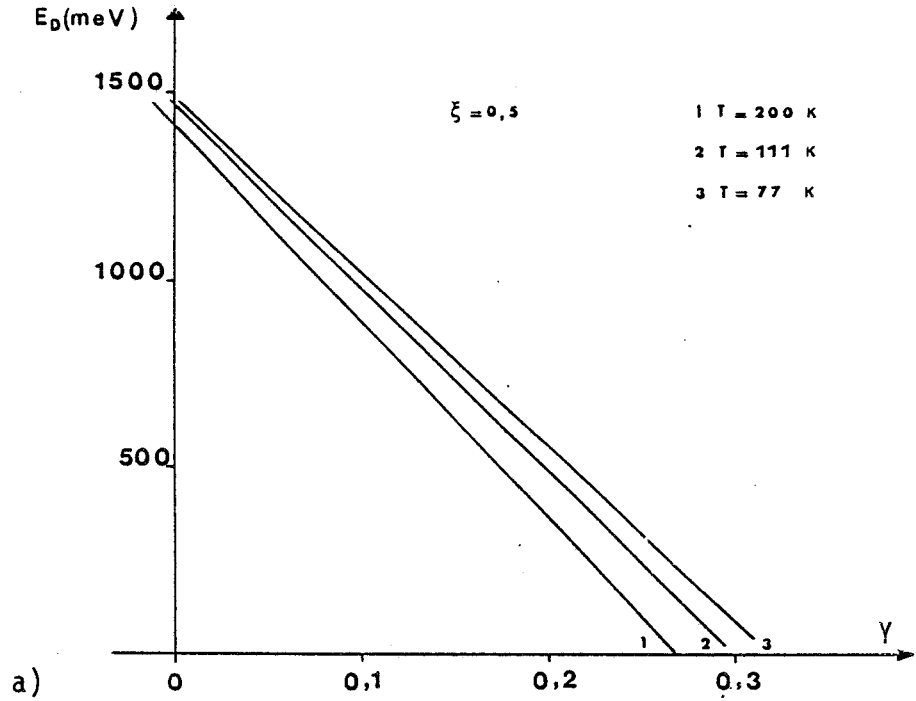


Figure VI-16 : Position du niveau  $E_D$  associé à la dislocation neutre en fonction de la variation du taux d'occupation de la dislocation.

L'écrantage de la ligne chargée est assuré par les porteurs libres et les impuretés ionisées.

Cas de n - GaAs. a)  $\delta l/l \approx 3\%$  b)  $\delta l/l \approx 6\%$ .

Après déformation et si l'on fait l'hypothèse que les familles de donneurs et d'accepteurs présents dans le cristal de référence se retrouvent dans le cristal déformé sans modification ni de leur intensité, ni de la valeur de leur énergie d'activation, l'équation de neutralité électrique devient :

$$\underbrace{p' - n' + \sum_{\ell} N_{D_{\ell}}^{+} - \sum_n N_{A_n}^{-}}_X + [\text{Def.}] = 0$$

La quantité  $X$  est connue, pour chaque échantillon déformé, si la référence est bien décrite puisque le niveau de Fermi est déterminé par la valeur expérimentale de  $n$  ou  $p$ . L'ensemble des défauts électriquement actifs introduits par la déformation est symboliquement décrit par le terme  $[\text{Def.}]$ .

• Pour que l'effet de la déformation plastique soit réductible au seul piégeage des porteurs libres sur un niveau d'énergie associé aux dislocations, c'est à dire pour pouvoir écrire

$$X = p' - n' + \sum_{\ell} N_{D_{\ell}}^{+} - N_{A_n}^{-} = n_t$$

il faut que la valeur expérimentale de  $X$  varie peu avec la température puisque la quantité  $X = n_t$  et la quantité  $Y$  sont alors proportionnelles, le coefficient de proportionnalité étant égal à  $\frac{2D}{b}$ . Si tel n'est pas le cas, les dislocations ne peuvent être seules responsables de la diminution du nombre de porteurs libres.

• La faible variation de la charge excédentaire par site lorsque la température varie rend difficile la distinction entre un piégeage par des dislocations et un piégeage par un ensemble de centres profonds dont l'effet se traduirait, dans l'équation de neutralité par l'addition d'un terme indépendant de la température.

Si le piégeage observé est dû seulement à des dislocations, le rapport des valeurs de  $X$  à deux températures données  $T_1$  et  $T_2$  doit être égal au rapport des charges excédentaires par site à ces mêmes températures soit

$$\frac{X(T_2)}{X(T_1)} = \frac{Y(T_2)}{Y(T_1)}$$

Ce rapport  $X(T_2)/X(T_1)$  est égal à 1 dans le cas d'un piégeage dû uniquement à des défauts ponctuels de caractère accepteur. Dans l'hypothèse où le piégeage résulte de l'action simultanée d'une densité  $D$  de dislocations et d'une densité  $D_p$  de défauts ponctuels accepteurs, la charge excédentaire totale portée par les dislocations devient  $n_t = X - D_p$ . La valeur de  $D_p$  est ajustée de telle sorte que le rapport  $\frac{n_t(T_2)}{n_t(T_1)}$  soit égal à  $\frac{Y(T_2)}{Y(T_1)}$ .

La densité de dislocations, liée à  $n_t$  et à  $Y$  par la relation  $n_t = 2DY/b$  s'en déduit immédiatement.

### VI-2.3. Analyse de l'effet Hall dans GaAs déformé

Nous examinons dans ce qui suit les résultats obtenus pour deux échantillons de type  $n$ , l'un peu déformé ( $\delta l/l \simeq 3\%$ ), l'autre très déformé ( $\delta l/l \simeq 6\%$ ) et deux échantillons de type  $p$  également faiblement et fortement déformés. Le comportement des échantillons correspondant à des valeurs de  $\delta l/l$  comprises entre les deux situations présentées est intermédiaire et confirme l'identité de comportement pour tous les échantillons déformés.

\* Cas de GaAs de type  $n$  très déformé.

Les valeurs de la quantité  $X$  telle qu'elle a été définie dans le paragraphe ci-dessus valent respectivement aux températures  $T_1 = 200$  K,  $T_2 = 111$  K et  $T_3 = 77$  K,  $X_1 = 2,54 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $X_2 = 2,72 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $X_3 = 2,91 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Il s'agit d'une valeur très faiblement croissante quand la température diminue.



L'analyse précédente permet, pour différentes positions du niveau  $E_D^0$  associé à la dislocation neutre, de déterminer la concentration  $D_p$  des défauts ponctuels et la densité  $D$  de dislocations justifiant les valeurs expérimentales de la constante de Hall. Les résultats sont reportés dans le tableau ci-dessous.

$E_D^0$ (meV)	$D_p$ ( $10^{-16}$ cm $^{-3}$ )	$D$ ( $10^{-9}$ cm $^{-2}$ )
1250	2,32	1,73
1100	2,13	1,60
950	1,97	1,50
800	1,83	1,40
650	1,69	1,33
500	1,60	1,24
350	1,50	1,17
200	1,37	1,15
50	1,34	1,14

A propos de ce tableau nous ferons plusieurs remarques

- la densité de défauts ponctuels nécessaires pour compléter le piégeage par des dislocations est d'autant plus faible que le niveau  $E_D^0$  est plus bas dans la bande interdite. Ce résultat correspond aux simulations numériques présentées au chapitre V : nous avons montré alors que l'efficacité du piégeage par les dislocations est d'autant plus grand que le niveau  $E_D^0$  est plus éloigné du niveau de Fermi.

- la densité de dislocations varie sur une plage extrêmement étroite (entre  $1,14 \cdot 10^9$  et  $1,74 \cdot 10^9$  cm $^{-2}$ ) ce qui rend particulièrement difficile - sinon illusoire - de déterminer la position du niveau  $E_D^0$  à partir d'une mesure directe de la densité de dislocations.

• bien que les variations de  $X$  à partir desquelles nous avons déterminé les couples  $(D, D_p)$  soient faibles, elles restent légèrement supérieures aux incertitudes évaluées en supposant des densités de porteurs libres mesurées à 10 % près. Il reste dans ces conditions possibles de conclure, dans les échantillons les plus déformés, à une action conjointe des dislocations et de centres profonds ayant un caractère accepteur.

\* Cas de GaAs de type n peu déformé.

La même analyse, appliquée à un échantillon peu déformé fait globalement apparaître les mêmes tendances que pour les échantillons très déformés. Les valeurs de  $X$  à différentes températures sont cependant si proches les unes des autres que nous pourrions aisément conclure à une absence de niveaux associés aux dislocations et donc à un piégeage par des défauts ponctuels uniquement.

Cependant, le comportement observé peut tout aussi bien correspondre à des dislocations en densité assez faible ( $D \approx 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ) pour que leur contribution au piégeage soit négligeable devant celle des centres accepteurs profonds.

De ce point de vue, les échantillons peu déformés sont moins que les échantillons très déformés, susceptibles d'apporter une information claire sur l'origine du piégeage.

\* Cas de GaAs de type p.

L'analyse des résultats expérimentaux pour les échantillons de type p est plus complexe encore dans la mesure où les valeurs de  $X$  sont négatives et très fortement décroissantes en valeur absolue quand la température décroît. Ceci ne correspond ni au cas d'un piégeage par des centres profonds ( $X$  serait constant) ni à celui d'un piégeage par des dislocations ( $X$  serait très légèrement décroissant avec  $T$ ), ni à une situation intermédiaire comme dans le matériau de type n (figure VI-17). En considérant comme nous l'avons fait que tous les défauts préexistants dans le cristal de référence, se retrouvent intégralement dans le matériau déformé, nous ne pouvons pas justifier les variations de  $X$  observées, aussi bien dans les échantillons peu déformés

que dans les échantillons très déformés. Si par contre nous admettons qu'il puisse y avoir modification des populations initiales de donneurs et d'accepteurs, nous trouvons que l'échantillon peu déformé ( $\delta l/l \approx 3\%$ ) correspond à la création de  $6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  donneurs profonds et à la "disparition" simultanée de 50 % environ (soit  $1,3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) des accepteurs situés à 58 meV du sommet de la bande de valence. Dans l'échantillon le plus déformé, la proportion d'accepteurs qui "disparaissent" passe à 70 % environ ( $1,8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) tandis qu' "apparaissent"  $1,1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  donneurs profonds.

Cette description est cohérente avec le modèle de Figielski de création de centre  $EL_2$  au cours de la déformation. Ce centre, de nature très complexe mais auquel semble être associé l'antisite  $As/Ga$ , serait formé au détriment des défauts de réseau initialement présents dans le cristal [8].

Notons ici encore, qu'en parlant de donneurs profonds, il nous est difficile de faire la différence entre des impuretés électriquement indépendantes et des dislocations dont le taux d'occupation est très lentement variable en fonction de la température.

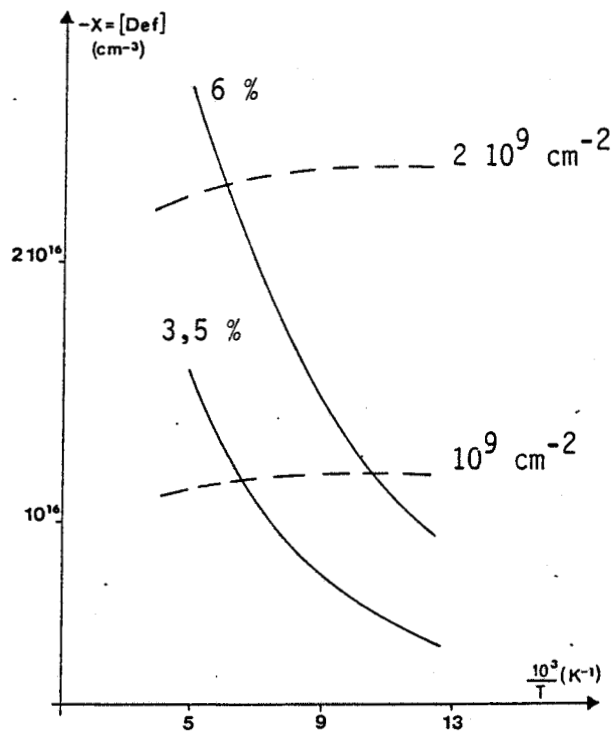


Figure VI-17 : Variation de la quantité  $X = p - n + \sum_{\lambda} N_{D\lambda}^+ - \sum_n N_{A_n}^-$  en fonction de la température pour deux échantillons de GaAs de type p déformés.

Les courbes en pointillé représentent la variation qu'aurait la quantité X si le piégeage pouvait être attribué en totalité aux dislocations.

S'il apparaît que la déformation plastique a un effet accepteur dans le matériau de type n et un effet donneur dans le matériau de type p il reste très difficile, à partir de la seule analyse des courbes d'effet Hall, de conclure à l'existence de niveaux d'énergie associés aux dislocations, à plus forte raison de situer ce niveau dans la bande interdite. Sur ce point, nous sommes incapables de conclure aussi précisément que Gerthsen [9] qui, à l'issue d'une étude somme toute assez peu différente de la nôtre, place à 0,38 eV du sommet de la bande de valence, le niveau associé aux dislocations  $60^\circ$  dans l'arséniure de gallium.

### VI-3. DISCUSSION

#### VI-3.1. Comparaison des résultats obtenus dans GaAs et InSb

Dans GaAs de type n, l'effet Hall s'interprète de façon satisfaisante en considérant à la fois des défauts ponctuels et des dislocations. La contribution des défauts ponctuels à la réduction de mobilité des porteurs libres est toujours négligeable devant celle des dislocations. La mobilité réciproque calculée en tenant compte simultanément de l'effet piézoélectrique, de l'effet du potentiel de déformation et de l'effet de ligne chargée est d'autant plus élevée que le niveau associé à la dislocation est situé plus bas dans la bande interdite. Les valeurs expérimentales très faibles de la mobilité électronique dans les échantillons déformés seraient alors compatibles avec un niveau de la dislocation très proche du sommet de la bande de valence.

L'existence de niveaux associés à la dislocation situés très bas dans la bande interdite est tout à fait cohérent avec les mesures de photoconductivité qui s'interprètent bien avec cette hypothèse [10]. Elles justifieraient de plus pourquoi ces niveaux n'ont jamais été observés par absorption optique.

Dans GaAs de type p, le taux d'occupation de la dislocation est, dans ces conditions, voisin de zéro et la variation de la densité des porteurs libres ne vient que d'une modification des populations de défauts ponctuels. Avec les hypothèses faites sur l'origine possible de la réduction de mobilité dans

les échantillons déformés, seul l'effet piezoélectrique et l'effet du potentiel de déformation sont susceptibles de jouer un rôle important si la dislocation n'est pas chargée. Si l'ordre de grandeur de la mobilité réciproque dû au seul effet piezoélectrique reste toujours faible devant la valeur expérimentale même pour des densités de dislocations importantes, la contribution du potentiel de déformation est en revanche très grande et permet de rendre compte des valeurs mesurées en considérant dans les échantillons les plus déformés, des densités de dislocations aussi basses que  $4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . A taux de déformation identique, ces valeurs sont plus faibles que celles évaluées à partir des courbes d'effet Hall dans le matériau de type n. Cependant, le niveau associé aux dislocations étant proche de la bande de valence, les densités de dislocations déduites de la statistique d'occupation de niveaux sont surestimées dès lors qu'on n'a pas tenu compte de la délocalisation.

Les résultats obtenus pour InSb sont très similaires à ceux de GaAs. L'effet du piégeage des porteurs libres est important dans les échantillons de type n. Un tel effet n'est compatible avec la faible valeur du taux d'occupation de la dislocation que si les niveaux éventuellement associés aux dislocations se situent dans la partie inférieure de la bande interdite. Cette conclusion se trouve confirmée par l'absence d'un point de croisement des courbes d'effet Hall correspondant à un échantillon de référence et à un échantillon déformé. Dans le matériau de type p, les dislocations ne peuvent en aucun cas piéger un pourcentage  $\Delta p/p$  de la densité initiale de porteurs libres suffisant pour justifier l'augmentation expérimentale de la constante de Hall. Par exemple,  $R_H$  est multiplié par un facteur 2 alors que  $5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$  dislocations ne peuvent piéger que 10 % environ des porteurs; Cette dernière contradiction peut être levée si nous admettons, comme pour GaAs, que le glissement des dislocations fait apparaître des défauts ponctuels de caractère donneur. La densité de ces défauts est de l'ordre de  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  pour un taux de déformation  $\delta l / l \simeq 2 \%$ .

Les courbes de conductivité font apparaître, dans le cas n, un effet très important de la déformation plastique sur la mobilité des électrons alors que dans le cas p, la mobilité des trous ne semble pas très affectée par la déformation. Les simulations numériques présentées au chapitre V nous permettent d'attribuer cette différence aux mécanismes d'écrantage des centres

diffuseurs. Dans le type n, la densité initiale de porteurs libres est très faible - de l'ordre de  $10^{14} \text{ cm}^{-2}$  - et la mobilité électronique très élevée -  $\mu_e \approx 600.000 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  -. Toute introduction de défauts au cours de la déformation plastique va se manifester par une grande variation de la mobilité parce que :

1) la densité de centres diffuseurs augmente très fortement par rapport à celle du cristal parfait,

2) le nombre de porteurs libres susceptibles d'écranter les centres diffuseurs est très fortement réduit par le piégeage des dislocations.

L'origine de cette diffusion est beaucoup plus à relier à l'effet de champs de déformation qu'à l'effet de ligne chargée.

Dans le cas p, la densité de porteurs libres, bien que réduite par rapport à la densité initiale, reste suffisante pour permettre un écrantage très efficace des centres diffuseurs. Alors que les effets de diffusion sont spectaculaires dans le matériau de type n, les mécanismes d'écrantage les rendent négligeables dans le type p.

En conclusion, InSb montre une grande analogie de comportement avec GaAs. Les effets galvanomagnétiques des échantillons déformés s'interprètent de façon satisfaisante par l'existence de niveaux d'énergie associés aux dislocations situés au-dessus de la bande de valence et par la création de défauts ponctuels de caractère donneur sans lesquels les effets de piégeage dans le matériau de type p resteraient incompris. Le potentiel de déformation semble être dans tous les cas le mécanisme de diffusion des porteurs libres le plus efficace. Il faut toutefois noter que les valeurs théoriques de la mobilité auxquelles il conduit dans InSb de type n sont toujours plus faibles que les valeurs expérimentales. La diffusion par effet de ligne chargée n'apporte une contribution non négligeable à la réduction de mobilité des porteurs libres que dans GaAs de type n.

L'ensemble de ces résultats a été établi en confondant la mobilité des porteurs libres et leur mobilité de Hall, c'est à dire en approximant à 1 la valeur du coefficient  $\alpha$  pour tous les mécanismes de diffusion. Un traitement plus rigoureux nécessiterait d'introduire dans le calcul, les valeurs exactes de  $\alpha$  pour chacun des mécanismes de diffusion associés aux dislocations, valeurs qui à notre connaissance n'ont pas été déterminées.

### VI-3.2. Sur une origine possible des défauts ponctuels créés au cours de la déformation

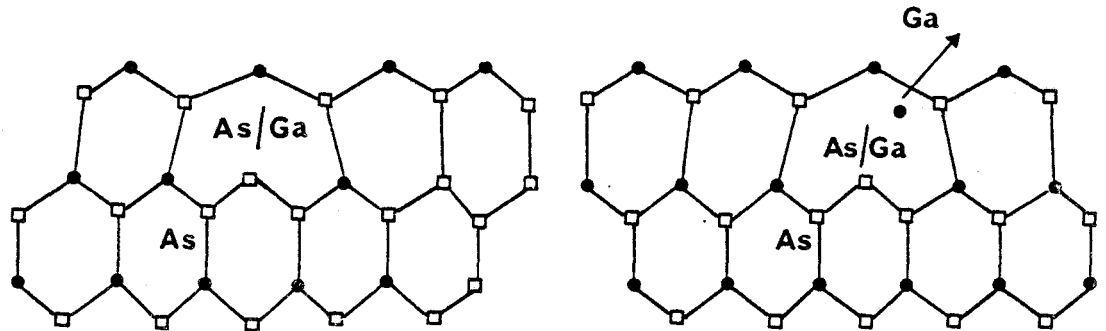
L'origine des défauts ponctuels de type donneur apparaissent aussi bien dans GaAs que dans InSb n'a pas fait, dans notre travail, l'objet d'une étude particulière. Cependant, différents travaux publiés [11,12] montrent que, dans l'arséniure de gallium, la déformation plastique a pour effet d'augmenter la densité de centres donneurs  $EL_2$ . Si nous identifions les centres donneurs créés par la déformation dans nos échantillons aux centres  $EL_2$ , ceci pourrait signifier qu'il existe dans InSb un centre de même nature qui serait associé à l'antisite Sb/In.

Des modèles théoriques ont été proposés pour expliquer l'apparition d'antisites au cours de la déformation. Le modèle de Figelski par exemple [8] considère que des intersticiels d'arsenic sont piégés dans le coeur d'une dislocation B de type glide. Le glissement ultérieur de la dislocation met en compétition cet atome d'arsenic avec un atome de gallium. Si le processus est favorable à la formation de l'antisite As/Ga, l'atome de gallium est éjecté du coeur de la dislocation et se retrouve dans le cristal en position intersticielle (Figure VI-18). Plusieurs conditions doivent cependant être remplies pour que la création de centres  $EL_2$  en grand nombre soit possible dans ce modèle :

1) les dislocations doivent être de type B glide,

2) la concentration d'intersticiels d'arsenic dans le matériau de départ doit être élevée, d'autant plus que la probabilité de capture d'un atome d'arsenic sur un site gallium est faible,

3) même si, dans la position de col de la dislocation l'atome de gallium est faiblement lié au réseau, rien ne permet d'affirmer qu'il peut être éjecté facilement sous forme d'interstitiel.



*Figure VI-18 : Mécanisme de formation d'un antisite AsGa par capture d'un interstitiel d'arsenic dans le coeur d'une dislocation B glide. Modèle de Figelski.*

Nous proposons un autre mécanisme de création d'antisites qui n'est pas dû à une transformation d'interstitiels préexistants en antisites mais à la création de défauts ponctuels, associée aux interactions entre les dislocations de glissement et les dislocations de la forêt. Un tel mécanisme d'interaction, illustré sur la figure VI-19 conduit à la création de dipôles lacunaires et de dipôles interstitiels. Les observations en microscopie électronique en transmission montrent que de tels dipôles sont effectivement présents en grand nombre dans les échantillons déformés (figure VI-20).

L'étude des défauts élémentaires de type interstitiels ou lacunaires, en particulier la stabilité des paires de Frenkel créées par irradiation, montre que la lacune et l'interstitiel d'arsenic sont tous deux chargés positivement alors que la lacune de gallium est chargée négativement et l'interstitiel de gallium est chargé positivement. Puisque les dipôles coin créés au cours de la déformation plastique correspondent à des rangées de bi-interstitiels ou de



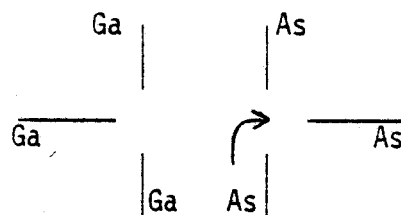
bi-lacunes, lorsque les dipôles s'annihilent, il y a probablement, à cause des interactions électriques, création, soit de bi-lacunes, soit d'interstitiels séparés.

A partir de ces défauts, vraisemblablement introduits par la déformation plastique, la formation du complexe  $EL_2$  associant un antisite As/Ga à d'autres défauts plus élémentaires peut être envisagée des deux façons suivantes :

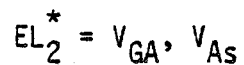
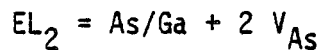
- l'antisite n'est pas créé par la déformation plastique mais préexiste dans le cristal. Dans ce cas, les défauts associés à l'antisite pour former le complexe  $EL_2$  sont les défauts élémentaires créés au cours de la déformation : ils sont soit de nature interstitielle soit de nature bi-lacunaire. Dans les expériences d'irradiation aux neutrons ou aux électrons, il est peu probable de créer directement des bi-lacunes mais plus probable de créer des paires de Frenkel dont la plus stable est celle d'arsenic. La densité de centres  $EL_2$  augmentant fortement par irradiation, le défaut élémentaire associé à l'antisite pourrait être dans ce cas, la lacune ou l'interstitiel d'arsenic. Si nous supposons un mécanisme unique de formation de  $EL_2$  par irradiation et par déformation plastique, le défaut élémentaire commun est l'interstitiel d'arsenic.

Cette conclusion sur la nature possible du centre  $EL_2$  est identique à celle proposée par Stievenard et Bourgoïn [14] .

- l'antisite est créée par le glissement des dislocations. Sa formation correspond au déplacement d'un atome d'arsenic dans le site gallium de la bi-lacune formée par recombinaison d'un dipôle lacunaire conformément au schéma suivant :



Le complexe qui en résulte est un antisite As/Ga associé à deux lacunes d'arsenic. Cette éventuelle association de l'antisite et des lacunes à l'avantage de faire apparaître clairement deux configurations métastables possibles qui sont |15| :



Nous ne prétendons aucunement donner ici la clef du problème  $EL_2$  qui est sans doute un de ceux ayant donné lieu ces dernières années au plus grand nombre de travaux publiés et aux controverses les plus vives. L'approche du sujet par le biais de la déformation plastique est relativement rare et nous avons simplement voulu montrer dans ce paragraphe quelle contribution nous pouvions apporter au lent cheminement des idées sur la nature exacte du centre  $EL_2$ .

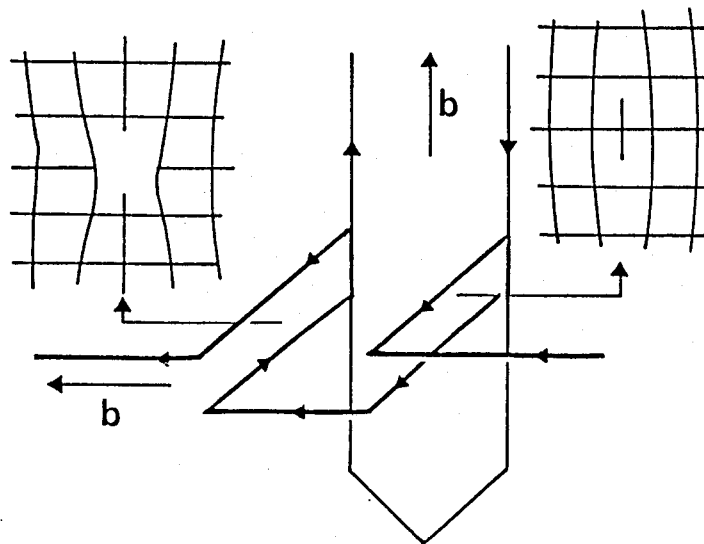


Figure VI-19 : Formation de dipôles interstitiel et lacunaire par interaction des dislocations de glissement et des dislocations de la forêt.

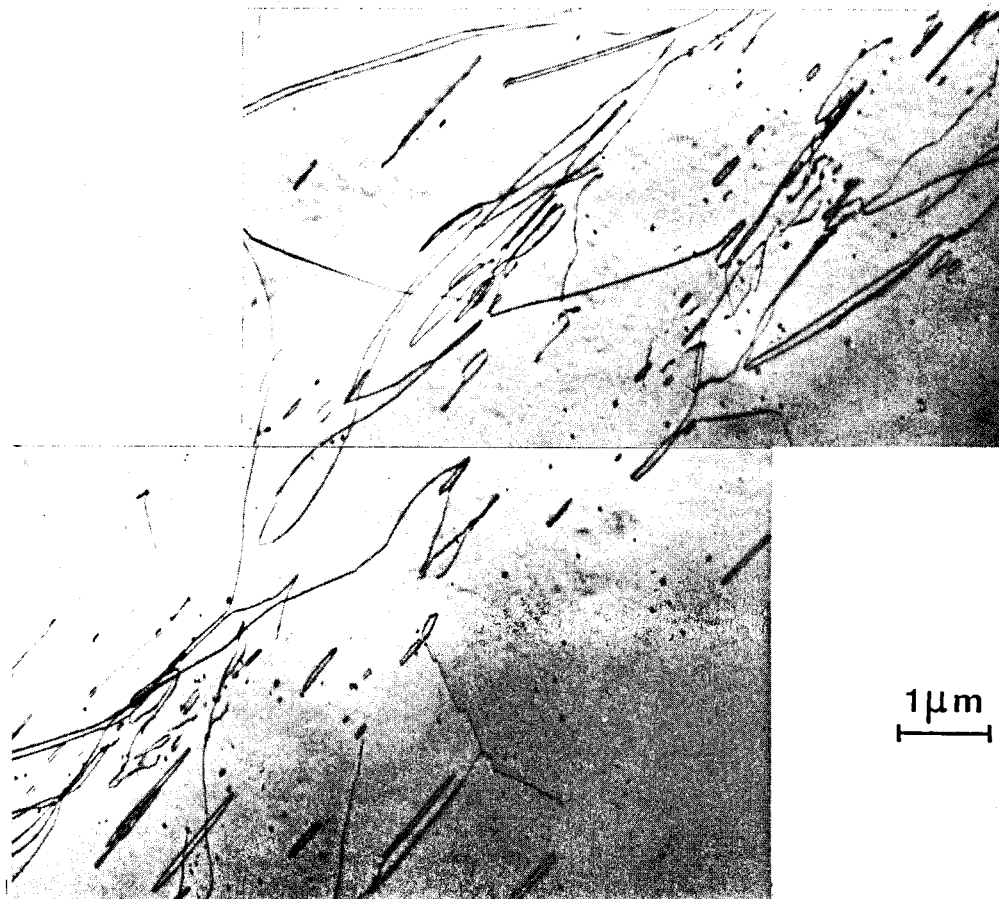


Figure VI-20 : Micrographie électronique en transmission . InSb .  $T = 550$  K.  
Noter la présence de nombreux dipôles coin. (cliché A. Lefebvre).



BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE VI

- [1] MITRA R.N., ROY S.B., DAW A.N.  
J. of Scientific and industrial research 38 (1979) 410.
  
- [2] YODER M.N.  
Solid State Electron. 23 (1980) 117.
  
- [3] RODE D.L., KNIGHT S.  
Phys. Rev. 133 (1971) 2534.
  
- [4] FLETCHER K., BLUTCHER P.N.  
J. Phys. C 5 (1972) 212.
  
- [5] BLAKEMORE J.S.  
J. Appl. Phys. 53, 10 (1982) 124.
  
- [6] HILL D.E.  
J. Appl. Phys. 41, 4 (1970) 1815.
  
- [7] BLAKEMORE J.S.  
Semiconductors statistics Pergamon Press (1962) 166.
  
- [8] FIGIELSKI T., WOSINSKI T., MORAWSKI A.  
J. de Physique C4 sup. n° 9, 44 (1983) 353.
  
- [9] GERTHSEN D.  
Thèse Göttingen 1986.
  
- [10] FARVACQUE J.L., GRUSON B.  
à paraître.
  
- [11] WEBER E.R., ENNEN H., KAUFMANN V., WINDSCHEIF J.,  
SCHNEIDER J., WOSINSKI T.  
J. Appl. Phys. 53, 9 (1982) 6140.

- [12] ISHIDA T., MAEDA K., TAKEUCHI S.  
Appl. Phys. 21 (1980) 257.
  
- [13] BARAFF E.A., SCHLÜTER M.  
Phys. Rev. Letters 55, 12 (1985) 1327.
  
- [14] STIEVENARD D., BOURGOIN J.C.  
J. Appl. Phys. 59, 3 (1986) 743.
  
- [15] FARVACQUE J.L., GRUSON.  
V International Symposium on structure and properties of  
dislocations in semiconductors, Moscou (1986) à paraître.

## CONCLUSION

\*\*\*

L'étude de plasticité macroscopique que nous avons développée, associée à des observations par méthode de Lang, établit clairement l'origine de l'asymétrie de comportement plastique observée dans les semiconducteurs composés de type III-V. Cette asymétrie ne résulte pas, comme il était généralement admis, du glissement de deux types de dislocations de structures de coeur différentes, l'un ayant une mobilité beaucoup plus grande que l'autre. Cette hypothèse, avancée par différents auteurs pour expliquer des expériences de flexion alternée, n'est donc pas confirmée par les résultats de notre étude. Dans InSb en particulier, le caractère sessile des segments de dislocation  $60^\circ B(s)$  ne permet pas le fonctionnement des sources de volume. La plasticité provient uniquement des sources de surface susceptibles d'émettre des demi-boucles de front  $60^\circ A(s)$ ; elle est contrôlée par le mouvement des dislocations vis.

La détermination des paramètres caractérisant le glissement des dislocations - énergie libre d'activation et extension spatiale (volume d'activation) du phénomène est rendue délicate par l'allure particulière des courbes contrainte - déformation et volume de relaxation - déformation. Nous montrons que l'existence d'un maximum dans la courbe  $\tilde{V}(\epsilon)$  pour InSb et l'absence d'un tel maximum pour GaAs s'interprètent bien en considérant une densité critique des dislocations en dessous de laquelle il est déraisonnable d'introduire un durcissement dans les équations phénoménologiques de la déformation. En adaptant le formalisme de l'activation thermique au cas des matériaux contenant une faible densité initiale de dislocations, nous avons pu déterminer dans GaAs et InSb, l'énergie libre d'activation à 0 Kelvin.

La maîtrise des techniques expérimentales de plasticité acquise au cours de ce travail nous a permis d'introduire dans des échantillons de type n et p des sous-structures de dislocations bien caractérisées. Des mesures de conductivité et d'effet Hall, effectuées entre 300 K et 77 K sur des échantillons d'arséniure de gallium et d'antimoniure d'indium faiblement dopés montrent une augmentation systématique de la résistivité avec le taux de déformation qui provient à la fois d'une diminution de la densité des porteurs libres et d'une diminution de leur mobilité.

L'analyse des résultats expérimentaux a été faite en associant aux dislocations des niveaux d'énergie dépendant de façon auto-cohérente, par l'intermédiaire des possibilités d'écrantage du matériau, de leur taux d'occupation. La mobilité théorique est calculée en utilisant le formalisme de l'énergie perdue à partir de l'expression des potentiels diffuseurs non écrantés et de la fonction diélectrique électronique.

Une étude théorique systématique 1) des mécanismes de diffusion associés aux dislocations (effet de ligne chargée, potentiel de déformation, potentiel piezoélectrique) et 2) des possibilités de piégeage (interaction électrostatique entre porteurs piégés, écrantage par les porteurs libres et par les impuretés ionisées, effet de délocalisation des états électroniques associés aux dislocations) nous ont permis de montrer :

- que les dislocations ne peuvent pas être seules responsables des variations de l'effet Hall observées mais que la déformation plastique crée simultanément des défauts ponctuels donneurs et accepteurs. Ces défauts pourraient apparaître lors de la recombinaison de dipôles lacunaires ou intersticiels résultant des interactions entre dislocations de glissement et dislocations de la forêt.

- que la réduction de mobilité des porteurs libres n'est pas uniquement liée au champ coulombien des dislocations mais doit plus vraisemblablement être attribuée à l'effet des champs de déformation. L'effet



de diffusion piezoélectrique, seul mécanisme de diffusion spécifique des composés III-V ne représente jamais la contribution majeure à cette réduction.

- que la compatibilité des mesures de Hall et des mesures de conductivité implique l'existence d'un niveau associé aux dislocations situé près du sommet de la bande de valence.

Enfin, dans les perspectives ouvertes par ce travail, il sera intéressant d'étendre à des systèmes bidimensionnels l'étude des mécanismes de diffusion des porteurs libres associés aux défauts étendus. L'influence de la qualité des substrats sur la mobilité électronique dans les couches epitaxiées pourrait sans doute être abordée à partir d'une analyse voisine de celle que nous avons appliquée au matériau massif.



## ANNEXE A

### ÉNERGIE ÉLECTROSTATIQUE DU SYSTÈME CONSTITUÉ PAR LA DISLOCATION CHARGÉE ET SON CYLINDRE D'ÉCRAN APPROXIMATION DE LA ZONE DÉPLÉTÉE

La charge piégée par unité de longueur de dislocation est définie par

$$\lambda = - \frac{n_t e}{D}$$

où  $n_t$  est le nombre d'électrons excédentaires par unité de volume.

La charge piégée par site le long de la ligne est égale à  $-\frac{n_t e b}{D}$ .

Si la dislocation chargée est écrantée par les porteurs libres, le rayon du cylindre d'écran que les porteurs ont déserté est défini par

$$\pi R^2 n = \frac{n_t}{D}$$

où  $n$  est la densité des porteurs libres.

L'énergie électrostatique de la configuration correspondant à une dislocation de longueur unité est

$$W = W_{e.e} + W_{e.q} + W_{q.e} + W_{q.q}$$

$W_{e.e}$  est l'énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés le long de la ligne,

$W_{q.q}$  est l'énergie d'interaction électrostatique des charges dans le cylindre d'écran,

$W_{q.e}$  et  $W_{e.q}$  correspondent aux termes d'interaction entre la charge piégée par la dislocation et la charge à l'intérieur du cylindre d'écran.

Calcul de  $W_{e.e}$

$$W_{e.e} = \frac{1}{2} q_i V_i = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L} \cdot \frac{1}{b} \cdot 2 \sum_{n=0}^{2/b} \left( \frac{-n_t e b}{D} \right)^2$$

$$= \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left[ \text{Log } \frac{2}{b} + 0,577 \right]$$

Calcul de  $W_{q.e}$

Le potentiel de la distribution de charge dans le cylindre d'écran en un point à la distance  $r < R$  de la dislocation est donnée par l'équation de Poisson.

Il vaut

$$V(r) = \frac{-n r^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L} + K \text{Log } r + K'$$

Les constantes d'intégration  $K$  et  $K'$  sont déterminées à partir de l'expression en  $r = R$  du potentiel à l'extérieur du cylindre d'écran, soit

$$V(r) = \frac{n}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L} (R^2 - r^2) + \frac{n_t e}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \text{Log } \frac{1}{R}$$

L'énergie d'interaction électrostatique des charges contenues dans le cylindre d'écran est donnée par

$$W_{q.q} = \frac{1}{2} \int_0^R n V(r) dv$$

Le résultat de cette intégration conduit à l'expression suivante de  $W_{q.q}$

$$W_{q.q} = \frac{n_t^2 e^2}{D^2} \cdot \frac{1}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L} \left( \text{Log } \frac{1}{R} + \frac{1}{4} \right)$$

Calcul de  $W_{q.e}$

$$W_{q.e} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{b} \cdot \left( - \frac{n_t e b}{D} \right) V(r = 0)$$

$$= - \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left( \text{Log } \frac{1}{R} + \frac{1}{2} \right)$$

L'énergie totale de la configuration est

$$W = W_{e.e} + W_{q.q} + 2 W_{q.e}$$

$$= \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left( \text{Log } \frac{R}{b} - 0,866 \right)$$

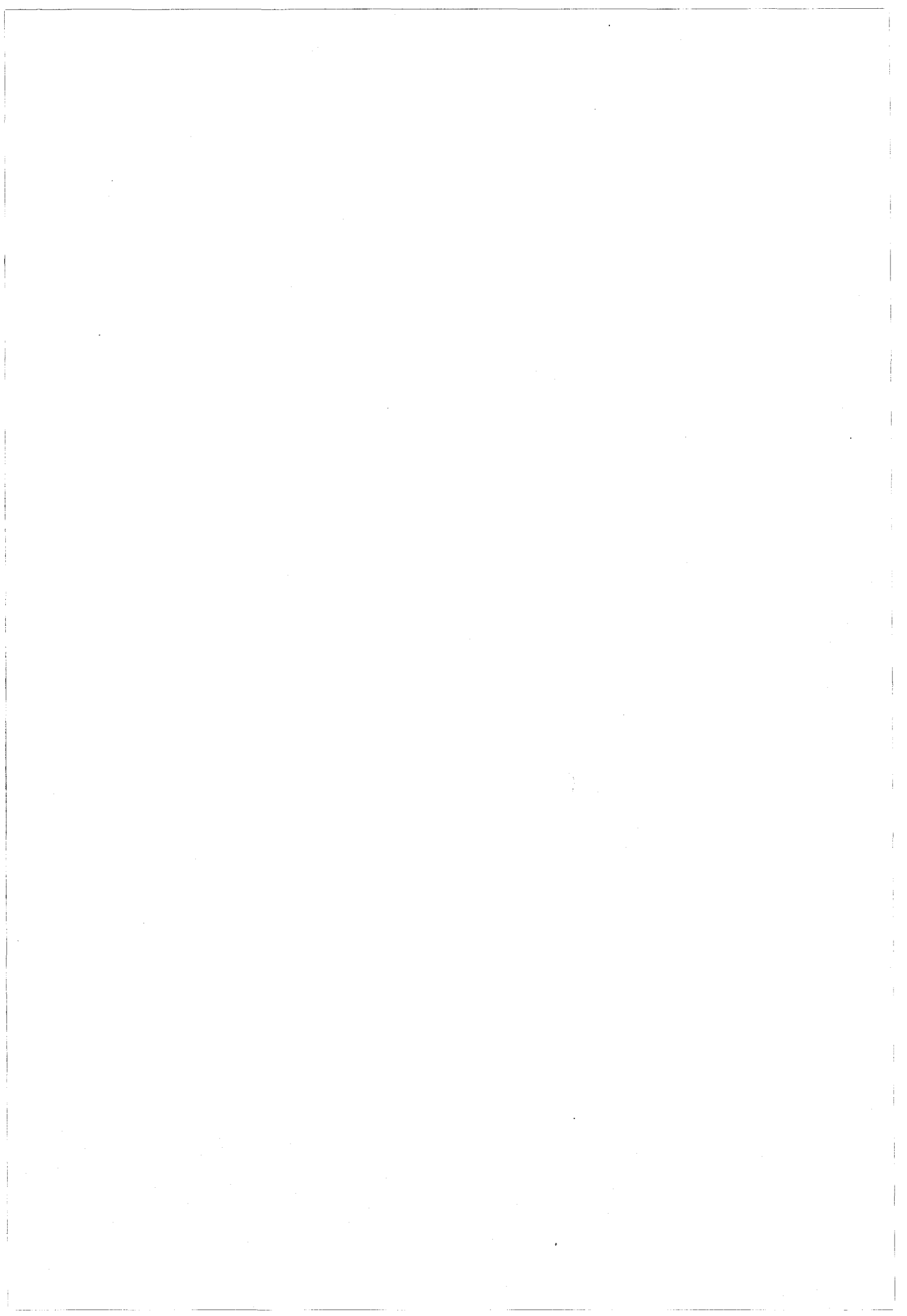
Par unité de volume du cristal, c'est à dire pour une longueur  $D$  de dislocations, l'énergie d'interaction électrostatique de la dislocation chargée et de son cylindre d'écran est :

$$W(n_t) = \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left( \text{Log } \frac{R}{b} - 0,866 \right)$$

Cette expression est à comparer avec la valeur

$$W(n_t) = \frac{n_t^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D} \left( \text{Log } \frac{\lambda_{D.H.}}{b} - \frac{1}{2} \right)$$

obtenue dans un modèle d'écrantage par les porteurs libres de type Debye-Hückel.



## ANNEXE B

D. VIGNAUD et al.: Anisotropy of Free Carrier Piezoelectric Scattering

601

phys. stat. sol. (b) 110, 601 (1982)

Subject classification: 10.2 and 14.3; 22.2

*Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide, associé au C.N.R.S. n° 234,  
Université des Sciences et Techniques de Lille, Villeneuve d'Ascq<sup>1)</sup>*

### **Anisotropy of the Free Carrier Piezoelectric Scattering by Dislocations in III-V Compounds <sup>2)</sup>**

By

D. VIGNAUD, J. L. FARVACQUE, and D. FERRE

Calculations of the piezoelectric potential associated with dislocations of sphalerite structure are made, i) by taking into account the elastic anisotropy of the materials, ii) by neglecting it. The results show a large similarity in the behaviour of the induced resistivity calculated in both cases. These results allow to make use of the isotropic approximation for the elastical medium for any calculation of the electrical properties associated with dislocations.

Es werden Berechnungen des mit Versetzungen der Sphaleritstruktur verknüpften piezoelektrischen Potentials durchgeführt und dabei die elastische Anisotropie des Materials 1) berücksichtigt und 2) vernachlässigt. Die Ergebnisse zeigen eine große Ähnlichkeit im Verhalten des induzierten Widerstands, der für beide Fälle berechnet wird. Die Ergebnisse erlauben die Benutzung einer isotropen Näherung für das elastische Medium für alle Berechnungen der elektrischen Eigenschaften, die mit Versetzungen verknüpft sind.

#### **1. Introduction**

Scattering mechanisms associated with dislocations in semiconductors are classified in two categories which roughly correspond to the physical distinction between the dislocation core and the long-range strain fields. In the core region, the modification in the number of first neighbours and the strong lattice distortion may result in the apparition of extrinsic levels, localized along the dislocation line. Any ionization of these levels transforms dislocations into charged lines, the Coulomb potential of which leads, in the first order, to an isotropic behaviour of the induced resistivity. Outside the core region, long-range strain fields may lead to two kinds of scattering effects. First, they displace the ions from their ideal lattice sites. The resulting effect is usually described by means of the deformation potential which, now leads to an anisotropic behaviour of the induced resistivity. Yet, deformation potential effects are generally negligible in comparison with core effects. They were observed in Si in very narrow temperature ranges around particular values at which dislocations become neutral [1]. They were also proposed to explain the free carrier scattering by binary edge dislocations in Te [2].

For non-centrosymmetric crystals, another scattering mechanism may also be associated with dislocation long-range strain fields through their piezoelectric properties. Proposed, previously, by Merten [3], and then studied in several other works [4 to 6], this scattering mechanism appears to be very efficient and may become the prominent effect, even when core effects are present.

Since the series of III-V and II-VI compounds, widely used in the actual device technology, belong to the class of piezoelectric materials, we have established the

<sup>1)</sup> U.S.T.L. Bat. C6, 59655 Villeneuve d'Ascq Cédex, France.

<sup>2)</sup> This work has been done for the ATP contract number 4021 (C.N.R.S.).

piezoelectric potential for the common "60°" and screw dislocations by taking into account the anisotropy of the stiffness tensor. Our motivation issues from the fact that, in the case of Te and Se, the elastic anisotropy strongly modifies theoretical results one obtains by neglecting it [7]. In particular, a strong scattering effect is found for ternary screw dislocations although no effect at all is expected within the isotropic approximation.

We show, in this paper, that for the particular case of "60°" and screw dislocations in III-V compounds, the elastic anisotropy does not lead to a large effect which by return allows one to make the isotropic approximation for the elastic properties. Nonetheless, in cases where refined calculations would be needed, the following determination could be applied.

Actually, the determination of piezoelectric potentials associated with internal strain fields appears to be very tricky since both the dislocation strain field and its induced electric polarization self-consistently verify a set of coupled equations which are given, in Voigt's approximation [8] by

$$\sigma = \bar{C} : \varepsilon + \bar{e} \cdot E, \quad (a) \quad D = \bar{e} : \varepsilon - \chi \cdot E, \quad (b) \quad (1.1)$$

where  $\sigma$ ,  $\bar{C}$ ,  $\varepsilon$ ,  $\bar{e}$ ,  $\chi$  are respectively the stress, strain, stiffness, piezoelectric, and dielectric tensors;  $E$  and  $D$  are the electric and displacement fields.

In addition to this first problem of the self-consistency, one has also to consider the screening possibilities of the material, entering in (1.1) through the dielectric tensor.

A way to solve equations (1.1) was presented by Saada and Faivre and Saada [5] who extended to the determination of the quadri-vector  $(u, V)$  the method proposed by Eshelby et al. [9] for the determination of  $u$  in centrosymmetric materials. These authors essentially found that, in fact, the resulting strain fields were very near those which are obtained by neglecting the coupling effect. By the way, this fully justifies the approximation done by Merten who calculated the piezoelectric potential in a "decoupled" approximation.

In the next section, we neglect the coupling effect for the determination of the dislocation strain fields and we apply directly the method proposed by Eshelby et al. to the cases of "60°" and screw dislocations.

The strain field being known, the remaining problem consists in the determination of its corresponding piezoelectric potential which can be extracted from equation (1.1 b). Using the Boltzmann transport equation, would require the knowledge of the total potential, screening effect being included. Recently, a new method to evaluate transport properties was proposed by Gerlach [10]. This "energy loss" method, based on the dielectric properties of each material, requires the only knowledge of the Fourier transform of the unscreened potential as shown in [11]. The screening is self-consistently introduced by means of the material dielectric function.

Applying this method in the third section, one, thus, has only to determine the extra and unscreened polarization induced by the strain field, i.e. the quantity

$$P = \bar{e} : \varepsilon \quad (1.2)$$

which is a part of the total displacement field  $D$ . The polarization charge, as well as the scattering potential, can obviously be directly calculated from  $P$ .

Such a calculation was already presented in [12] in the case of the isotropic approximation. Nonetheless, the piezoelectric charge distribution found in this paper, does not vanish when one integrates the charge density over all the space. This does not verify the dipolar nature of induced piezoelectric charges and is a hint of probably some calculation mistake in that work.



This being done, we present results on the anisotropy of the induced resistivity, which term is the only one which can differ between the isotropic approximation and the total calculation. The total determination of the scattering effect (its absolute amplitude with respect to temperature), needs to have established previously the statistics of the whole energy spectrum, which will be presented in other papers.

2. Determination of the Dislocation Strain Fields

Excluding the coupling term  $\bar{e} \cdot E$  from equation (1.1a) one obtains the well known Navier's equation:

$$\sum_{\alpha, \beta, k} C_{\alpha k \beta} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = 0, \tag{2.1}$$

when  $\epsilon$  has been replaced by the derivative of the displacement vector. Equations (2.1) express the fact that, in absence of external forces, the internal forces equilibrate each other. It constitutes a set of differential equations of second order which, to be completely solved, needs the knowledge of boundary conditions. The Burgers conditions defining the dislocation, and the fact that stresses must vanish at the surface bring the six boundary conditions needed:

$$\oint \sum_{\alpha} \frac{\partial U_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} dx_{\alpha} = b_k, \tag{2.2}$$

$$\oint \sum_{\alpha, k} C_{\alpha k \alpha} \frac{\partial U_k}{\partial x_{\alpha}} dx_{\alpha} = 0, \tag{2.3}$$

where  $C_{\alpha k \beta}$  and  $b_k$  stand for the coefficients of the elastic tensor and the components of the Burgers vector, respectively.

The references system shown in Fig. 1 has been chosen to simplify the calculation for "60°" and screw dislocations of sphalerite structure. The dislocation line lies along the  $Oz$  axis. The Burgers vector of the "60°" dislocation is in the  $xOz$  plane. Displacements being additive, one may then separate the problem into the case of a pure edge dislocation, the Burgers vector of which,  $b_e$ , lies along  $Ox$ , and to the case of a pure screw dislocation, the Burgers vector of which,  $b_s$ , lies along  $Oz$ .

Due to the translational symmetry along  $Oz$ , the displacement vector does only depend on the  $x$  and  $y$  variables, i.e.  $U_k(x, y)$ . Let us perform the change of variable

$$\eta = x + sy, \tag{2.4}$$

where  $s$  is a compound quantity, and write the displacement components in the form

$$U_k = A_k(\eta). \tag{2.5}$$

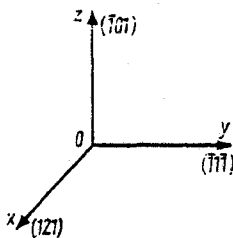


Fig. 1. Reference system, dislocation line along the  $Oz$  axis. Burgers vectors belonging to the plane  $xOz$

Then, introducing (2.5) into the Navier equations, this gives a linear set of equations verified by the  $A_k$ :

$$\sum_k \alpha_{ik} A_k = 0, \tag{2.6}$$

where the  $\alpha_{ik}$  depend on the components of the elastic tensor and on the quantity  $s$ . The system (2.6) possesses non-trivial solutions if its associated determinant vanishes.

Taking into account, the elastic tensor, and the choice of the reference system (Fig. 1) leads to

$$(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}^2) \alpha_{33} = 0, \tag{2.7}$$

where

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= \frac{1}{s} \{3(C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) + 2\sqrt{2}(C_{11} - C_{12} - 2C_{44})s + 2s^2(C_{11} - C_{12} + C_{44})\}, \\ \alpha_{22} &= \frac{1}{s} \{2(C_{11} - C_{12} + C_{44}) + 2s^2(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})\}, \\ \alpha_{33} &= \frac{1}{s} \{(C_{11} - C_{12} + 4C_{44}) + 2\sqrt{2}s(C_{12} - C_{11} + 2C_{44}) + 2s^2(C_{11} - C_{12} + C_{44})\}, \\ \alpha_{12} &= \frac{1}{s} \{\sqrt{2}(C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) + 2s(2C_{11} + C_{12} - C_{44})\}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Inserting expressions (2.8) into (2.7) gives an equation of sixth degree verified by  $s$ . This equation possesses six compound solutions conjugated two by two.

Displacements may therefore be written as a linear combination of three independent solutions for  $s$ :

$$U_k = \sum_{j=1}^3 R_j(A_{kj}f(\eta_j)). \tag{2.9}$$

One keeps for example solutions (noted by  $j$ ) which possess a positive imaginary part.

The strain components are continuous and analytical. They are obtained from the derivative of the displacements, i.e. of the function  $f(\eta)$ . Hence  $f(\eta)$  can be described by a Laurent series. Terms of the type  $\eta^n$  with positive  $n$  must be eliminated since they would correspond to the existence of a non-vanishing strain field at the infinity. Terms of the type  $\eta^n$  with  $n < 0$ , would become important in the core region one does not (cannot) describe. They do not play any role to describe long-range strain fields and are neglected in (2.10). The Laurent series reduces, thus, to its logarithmic term which one writes:

$$f(\eta_i) = -\frac{D_i b_{e/s}}{2\pi i} \ln(\eta_i). \tag{2.10}$$

Introducing the quantity  $B_{ki}$  such as

$$B_{ki} = \frac{iA_{ki}D_i}{b_s} \tag{2.11}$$

and inserting (2.10) into the Navier equation gives

$$\sum_k \alpha_{jk}(i) B_{ki} = 0. \tag{2.12}$$

The final determination of the  $B_{ki}$  consists then to solve the linear set of equations (2.12), where the  $\alpha_{jk}$  are now well known.  $B_{kj}$  being compound quantities, it is easier to separate their real and imaginary parts:  $B_{kj} = \lambda_{kj} + i\varepsilon_{kj}$ .

Then, the calculation deals with two independent sets of linear equations, for each value of  $i$ , and possessing each nine unknowns. In order to complete each set (three equations being provided by (2.12)) one just makes use of boundary conditions which bring six other equations.

Table 1

$i$	$p_i$	$q_i$	$L_i$	$M_i$	$N_i$	$\lambda_{i1}$	$\lambda_{i2}$	$\varepsilon_{i1}$	$\varepsilon_{i2}$
1	0.56	0.085	-0.88	0.36	-0.43	-0.18	0.17	0.16	-1.2
2	1.6	-0.43	6.3	-14	5.0	-0.63	0.34	-0.20	0.20
3	1.1	0.35							

Calculations have been carried out in the particular case of InSb with the following parameters:  $b = 4.6 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon_{14} = 0.71 \text{ C/m}^2$ ,  $m = 1.3 \times 10^{-32} \text{ kg}$ ,  $\varepsilon_L = 16$ ,  $C_{11} = 6.7 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ ,  $C_{12} = 3.7 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ ,  $C_{44} = 3.0 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ .

The structure of (2.7) allows the immediate distinction between the edge and the screw case.

1) Solutions of  $s$  corresponding to  $\alpha_{33} = 0$ , lead to the only non-trivial solution where  $B_{3j}$  is different from zero but with  $B_{1j} = B_{2j} = 0$ . Using (2.9) leads to

$$U_1 = U_2 = 0, \tag{2.13}$$

$$U_3 = \frac{b_s}{2\pi} \left\{ \frac{c_{45} - q_3 c_{44}}{2p_3 c_{44}} \ln [(x - q_3 y)^2 + (p_3 y)^2] + \text{arctg} \left[ \frac{p_3 y}{x - q_3 y} \right] \right\}^3,$$

where numerical values for  $p_i$  and  $q_i$  are given in Table 1.<sup>4)</sup> Applying to this case the Burgers condition shows that it corresponds to the displacement of the screw component  $b_s$  of the dislocation.

2) Solutions of  $s$  corresponding to  $(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}^2) = 0$  oblige  $B_{3j}$  (and therefore  $U_3$ ) to vanish. This corresponds to the edge component of the dislocation. The non-vanishing displacements  $U_1$  and  $U_2$  are then given by

$$U_i = \frac{b_s}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{\lambda_{ji}}{2} \ln [(x - q_j y)^2 + (p_j y)^2] - \varepsilon_{ji} \text{arctg} \frac{p_j y}{x - q_j y} \right\}. \tag{2.14}$$

Here, expressions of  $\lambda_{ij}$  and  $\varepsilon_{ij}$  are too complicated to be described in terms of the elastic coefficients. Their numerical values are given Table 1 for InSb.

An expression for the strain tensor components can be immediately found from the displacements. We do not report these expressions here.

Displacements being known for edge and screw components, it is easy to reconstitute the displacement field for a "60°" dislocation by inserting in  $U_1$  and  $U_2$  the value  $b_e = \sqrt{3}/2b$  and  $b_s = b/2$ . For the screw dislocation, its  $U_3$  component corresponds to (2.13) where one has to put  $b = b_s$ .

At this stage of calculation, it is difficult to compare the displacements expressed by (2.13) and (2.14) with the standard results one obtains considering the crystal as elastically isotropic. In order to check the similitude, it is necessary to continue evaluating the piezoelectric scattering of the free carriers. This is presented in the following section.

### 3. Anisotropy of the Induced Resistivity

#### 3.1 The unscreened piezoelectric charge distribution

As recalled in the Introduction, the energy loss method only requires the knowledge of the unscreened potential Fourier transform, or, as well, using the Poisson equation, the Fourier transform of the unscreened induced charge. In the direct space, the

<sup>3)</sup>  $c_{44} = 2(C_{11} - C_{12} + C_{44})$ ;  $c_{45} = \sqrt{2}(C_{12} - C_{11} + 2C_{44})$ .

<sup>4)</sup> For InSb.

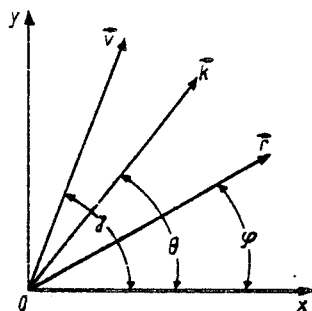


Fig. 2. Reference scheme for the angle notation

unscreened charge distribution corresponds to the divergence of the induced polarization:

$$\rho(r) = \text{div } \mathbf{P} = \text{div}(\bar{\epsilon} : \mathbf{s}) . \tag{3.1a}$$

Taking into consideration the special shape of the piezoelectric tensor [8] and evaluating from the displacements the strain components it is easy to show that

$$\rho(r) = \frac{b_0 e_{14}}{2\pi\sqrt{3}} \frac{1}{r^2} F_A(\varphi) \tag{3.1b}$$

with<sup>5)</sup>

$$F_A(\varphi) = \sum_{j=1}^2 \frac{L_j \cos^2 \varphi + M_j \sin^2 \varphi + N_j \sin^2 \varphi}{(\cos \varphi - q_j \sin \varphi)^2 + (p_j \sin \varphi)^2} , \tag{3.1c}$$

where the numerical values of the various constants are given Table 1 for InSb. Formula (3.1 b) shows that the induced polarization charge results only from the edge component of the dislocation Burgers vector. This gives a first important result: screw dislocations do not possess any piezoelectric scattering mechanism. This result is strictly identical to the one which is obtained in the isotropic approximation.

Concerning the edge component, results obtained in the isotropic approximation also follow the same relation (3.1 b) but where  $F_A(\varphi)$  ( $A$  anisotropic) has to be replaced by  $F_I(\varphi)$  ( $I$  isotropic) given by

$$F_I(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}(1-\nu)} \left\{ \sin 4\varphi + (1-2\nu) \sin 2\varphi + \sqrt{2}(\nu+1) \cos 2\varphi + \frac{\delta}{\sqrt{2}} \cos 4\varphi \right\} . \tag{3.1d}$$

Fig. 3a and b show the large resemblance of the charge distribution obtained in both cases.

### 3.2 The anisotropic behaviour of the free carrier mobility

Expression (3.1 b) shows that the temperature dependence of the induced mobility must be the same in both the isotropic approximation and the complete calculation since they possess the same dependence on the variable  $r$ . Both calculated resistivities must only differ in the induced anisotropy of scattering around the dislocation line.

To evaluate the difference, needs to know the Fourier transform of the charge distribution in both cases. This can be done without any difficulty in the isotropic approximation.

<sup>5)</sup> See Fig. 2 for angle notations.

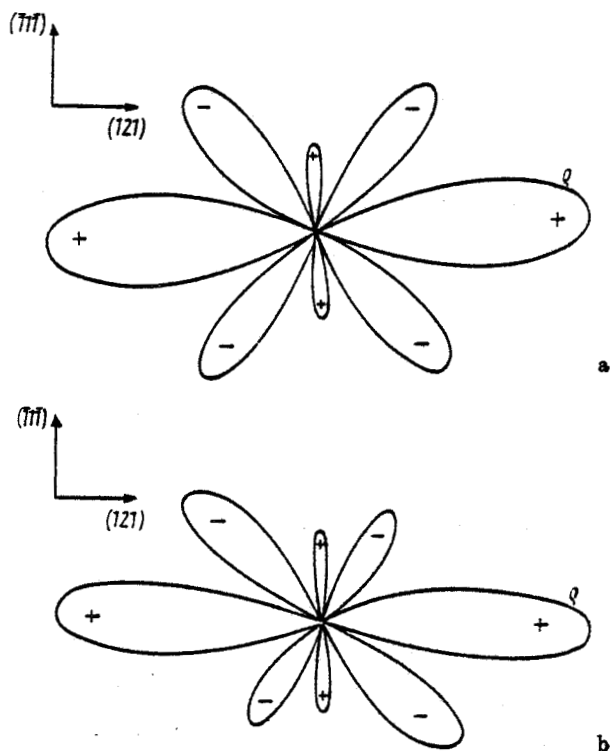


Fig. 3. Piezoelectric charge distribution in the a) isotropic approximation and b) complete calculation

Yet, it is impossible to find any analytical form for the Fourier transform of  $F_{\Delta}(\varphi)$ . In order to get semi-analytical expressions, one expands  $F_{\Delta}(\varphi)$  in a Fourier series:

$$F_{\Delta}(\varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_{2n}}{\cos \gamma_{2n}} \cos (2n \varphi - \gamma_{2n}), \quad (3.2a)$$

where  $\text{tg } \gamma_{2n} = b_{2n}/a_{2n}$ . Note that only odd terms are present in the series because  $F_{\Delta}(\varphi) = F_{\Delta}(\varphi + \pi)$ .

Introducing then (3.2a) into (3.1b), and performing the Fourier transform one obtains

$$q(\mathbf{k}) = q(\theta) = \frac{b_0 e_{14}}{\sqrt{3}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{a_{2n}}{2n \cos \gamma_{2n}} \cos (2n\theta - \gamma_{2n}). \quad (3.2b)$$

The coefficients  $a_{2n}$ ,  $b_{2n}$  and therefore  $\gamma_{2n}$  are numerically computed. Convergence tests allow us to stop the Fourier series expansion at the order 20.

The expression  $q(\mathbf{k})$ , which is semi-analytical, can then be introduced in the energy loss expression (see for instance [11]).

Following this last paper, the anisotropy of the scattering is given by the expression:

$$A(\gamma) = \int_0^{2\pi} \cos^2 (\theta - \gamma) f(\theta) d\theta, \quad (3.2c)$$

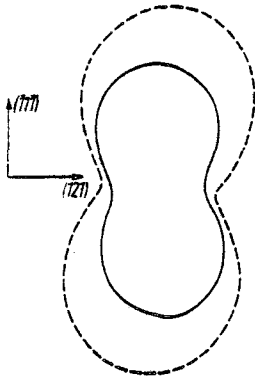


Fig. 4. Angular dependence of this induced resistivity ( $\mu^{-1}$ ) in the isotropic approximation (continuous line) and the complete calculation (dashed line)

where  $\gamma$  is the angle between the free carrier drift velocity and a chosen direction in the crystal, and where  $f(\theta)$  is the angular part of the Fourier transform of the unscreened scattering potential (see Fig. 2 for the meaning of the angle notations).

This last integration can be analytically done in the isotropic approximation, one obtains:

$$A_I(\gamma) = \frac{27}{4} + 6(1 + 2\nu)^2 - (3\nu + 6) \cos 2\gamma + \frac{3 - 12\nu}{\sqrt{2}} \sin 2\gamma. \quad (3.2d)$$

For the anisotropic case, the integration of (3.2c) is done numerically. Results are directly shown Fig. 4.

Except for the order of magnitude, the anisotropic behaviour is practically the same. Maximum and minimum of the induced resistivity occur in the same direction.

#### 4. Conclusion

The present calculation, performed within a set of reasonable approximations such as i) the decoupling approximation of Merten, ii) the determination of the strain fields by the method of Eshelby et al., iii) the use of the energy loss method for the determination of the free carrier mobility, leads to the important, because simplifying, result that the elastic anisotropy of III-V compounds does not bring any strong effect on the dislocation scattering properties. This allows one to neglect it and make the "isotropic approximation" for most purposes.

In any case, screw dislocations do not possess any piezoelectric scattering effect. They would just scatter the free carriers by means of their core effects, if available.

On the contrary, edge or  $60^\circ$  dislocations do possess a strong effect which is even more important in amplitude than the one associated with the core extrinsic levels (see [13]).

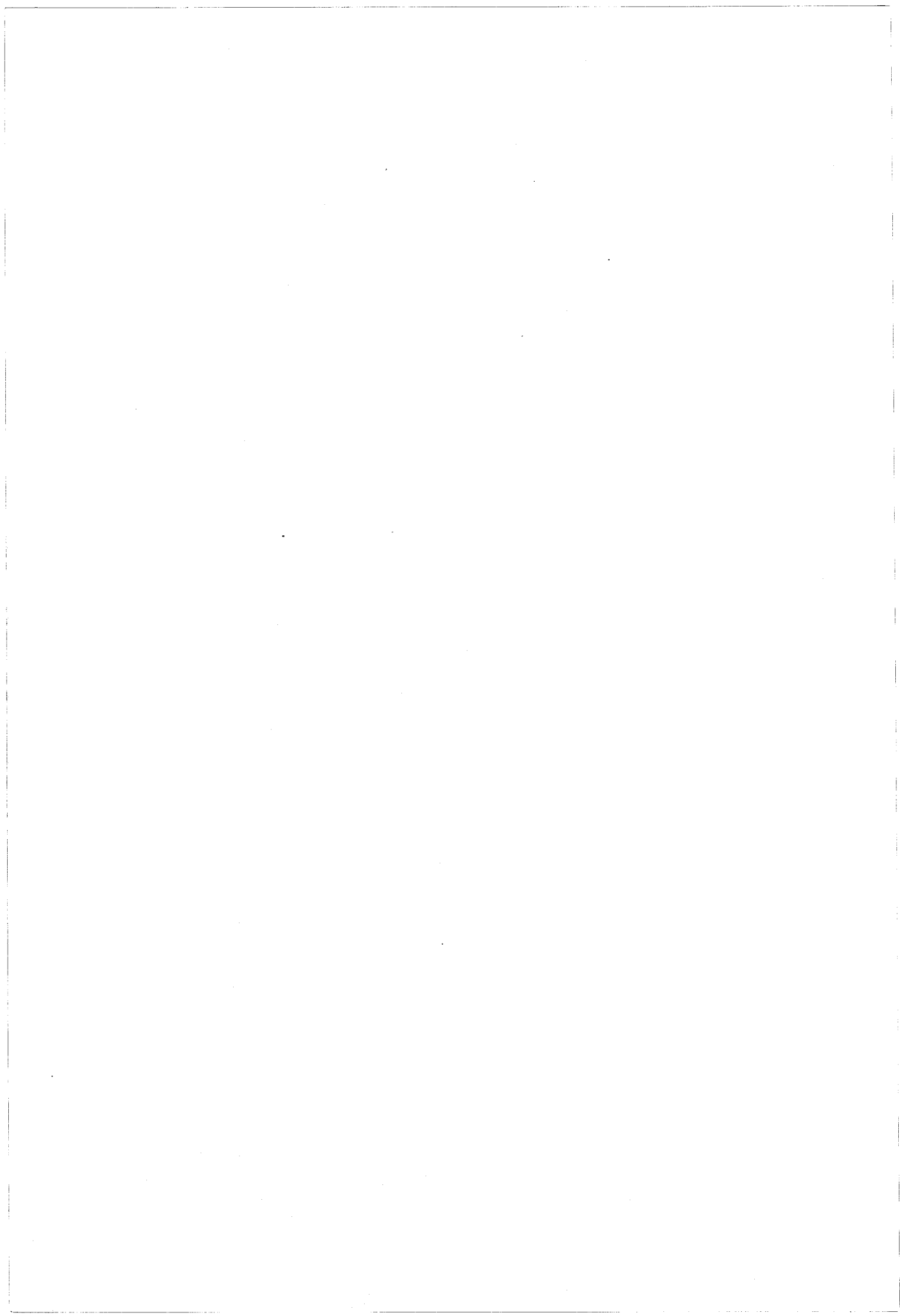
The anisotropy of the induced resistivity (in the ratio of about three) should be therefore easily observable, in crystals containing mainly one family of independent dislocations.

This last experimental condition is nonetheless very difficult to realize. Flexion experiments lead, by nature, to the constitution of rough tilt subgrain boundaries, minimizing so the dislocation long-range strain fields. Uniaxial deformation tests lead generally to the participation of many glide systems, rendering quasi-isotropic any electrical effect. Other deformation processes, establishing well-known dislocation substructures, are needed to permit a clear check of the present calculation.

References

- [1] F. DÜSTER and R. LABUSCH, *phys. stat. sol. (b)* 60, 161 (1973).
- [2] J. C. DOUKHAN, R. DROPE, J. L. FARVACQUE, E. GERLACH, and P. GROSSE, *phys. stat. sol. (b)* 64, 237 (1974).
- [3] L. MERTEN, *Phys. kondens Materie* 2, 53 (1964).  
L. MERTEN, *Z. Naturf.* 21, 793 (1966).
- [4] I. B. LEVINSON, *Soviet Phys. - Solid State* 7, 2336 (1965).
- [5] G. SAADA, *phys. stat. sol. (b)* 44, 717 (1971).  
G. FAIVRE and G. SAADA, *phys. stat. sol. (b)* 52, 127 (1972).
- [6] J. P. ESTIENNE and J. L. FARVACQUE, *phys. stat. sol. (b)* 95, 593 (1979).
- [7] J. L. FARVACQUE, Thèse d'Etat, Lille 1977.
- [8] See, for instance, W. G. Cady, *Piezoelectricity*, McGraw Hill, New York 1946.
- [9] J. D. ESHELBY, W. J. READ, and W. S. SHOCKLEY, *Acta metall.* 1, 251 (1953).
- [10] E. GERLACH, *phys. stat. sol. (b)* 61, K97 (1974).  
E. GERLACH, *phys. stat. sol. (b)* 62, K43 (1974).
- [11] J. L. FARVACQUE and E. GERLACH, *phys. stat. sol. (b)* 77, 651 (1976).
- [12] H. BOOYENS, J. S. VERMAAK, and G. R. PHOTO, *J. appl. Phys.* 48, 3008 (1977); 49, 1173 (1978).
- [13] C. M. PENCHINA, R. MASUT, and J. L. FARVACQUE, to be published.

(Received November 12, 1981)





## ANNEXE C

### ÉNERGIE D'INTERACTION ÉLECTROSTATIQUE ENTRE LES PARTIELLES CHARGÉES D'UNE DISLOCATION DISSOCIÉE

La statistique d'occupation des niveaux d'énergie associés à chacune des partielles d'une dislocation dissociée est fonction d'un niveau effectif dont la position varie avec le taux d'occupation. La proximité des deux partielles impose qu'en plus du terme d'interaction entre porteurs piégés le long de la ligne, on tienne compte pour l'évaluation du décalage rigide des états électroniques, de l'énergie d'interaction électrostatique entre les deux lignes chargées.

Supposons les deux partielles alignées selon la direction  $z$ , l'une en  $x = -\frac{a}{2}$ , l'autre en  $x = +\frac{a}{2}$ .

Elles portent respectivement des charges

$$\rho_1(r) = -\frac{nt_1 e}{D} \delta(x + \frac{a}{2}) \delta(y)$$

$$\text{et } \rho_2(r) = -\frac{nt_2 e}{D} \delta(x - \frac{a}{2}) \delta(y)$$

dont les transformées de Fourier sont :

$$\rho_1(k) = -\frac{2\pi nt_1 e}{D} \exp i k_x a \delta(k_z)$$

$$\text{et } \rho_2(k) = -\frac{2\pi nt_2 e}{D} \exp -i k_x a \delta(k_z)$$

$nt_1$  et  $nt_2$  sont les nombres d'électrons excédentaires par unité de volume, le long de chacune des partielles. L'énergie d'interaction des deux lignes chargées est, par unité de longueur égale à :

$$w = \frac{(2\pi)^2 n_{t_1} n_{t_2} e^2}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left\{ \frac{\exp i k_x a \delta(k_z)^2 d^3 k}{k^2 \left(1 + \frac{k_{DH}^2}{k^2}\right)^2} \right.$$

$$= \frac{n_{t_1} n_{t_2} e^2}{2(2\pi)^2 \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left\{ \frac{\exp i (k_{\perp} a \cos \theta) k^3 dk_{\perp} d\theta}{(k_{\perp}^2 + k_{DH}^2)^2} \right.$$

$k_{\perp}$  est la composante du vecteur  $k$  dans le plan perpendiculaire à la ligne de dislocation

$$w = \frac{n_{t_1} n_{t_2} e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left\{ \frac{k_{\perp}^3 J_0(k_{\perp} a) dk_{\perp}}{(k_{\perp}^2 + k_{DH}^2)^2} \right.$$

$J_0(k a)$  est la fonction de Bessel.

L'expression précédente s'écrit

$$w = \frac{n_{t_1} n_{t_2} e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp} (k_{\perp}^2 + k_{DH}^2)}{(k_{\perp}^2 + k_{DH}^2)^2} K_0(k_{\perp} a) dk_{\perp} \right.$$

$$\left. - k_{DH}^2 \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp} J_0(k_{\perp} a)}{(k_{\perp}^2 + k_{DH}^2)^2} dk_{\perp} \right\}$$

soit encore

$$w = \frac{n_{t_1} n_{t_2} e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \left\{ K_0(k_{DH} a) - \frac{k_{DH} a}{2} K_1(k_{DH} a) \right\}$$

Un développement en série de la fonction  $K_0(k_{DH} a)$  au premier ordre en  $k_{DH}$  permet d'écrire l'énergie d'interaction électrostatique entre les deux lignes chargées sous la forme

$$w = \frac{nt_1 nt_2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \text{Log} \left( \frac{2}{k_{DH} a} - C - \frac{1}{2} \right)$$

où  $C$  est la constante d'Euler.

L'énergie d'interaction entre porteurs piégés le long de la ligne est, par unité de longueur de ligne, définie par

$$W_{1,2} = \frac{nt_{1,2}^2 e^2}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_L D^2} \text{Log} \left( \frac{1}{k_{DH} b} - \frac{1}{2} \right)$$

Le décalage rigide des niveaux associés à chacune des partielles s'obtient en minimisant la quantité  $W + w$  par rapport à la charge piégée.

