

50376
1991
232



67250

50376
1991
232

N° d'ordre : 801

THÈSE

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE
LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : SCIENCES DES MATERIAUX

par

Abdelkrim OUBRAHAM

**MECANISMES DE CONDUCTION A BASSE
TEMPERATURE ET MAGNETORESISTANCE
NEGATIVE DANS CdAs₂ ISOLANT.**

Soutenue le 7 Novembre 1991 devant la commission d'examen.

Président, Rapporteur : M. J. C. PORTAL

Rapporteur: M. G. BISKUPSKI

Examineurs: M. H. DUBOIS

M. J. L. FARVACQUE

Professeur à l'I.N.S.A de Toulouse.

Professeur à l'Université de LILLE I.

Professeur à l'Université de LILLE I.

Professeur à l'Université de LILLE I.

A mon épouse

A Maïté

A mes parents

A ma famille

Ce travail a été effectué au laboratoire de Spectroscopie Hertzienne (URA 249) de l'Université des Sciences et techniques de Lille dirigé par Monsieur le Professeur B. MACKE.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur le professeur J. C. PORTAL de l'I.N.S.A de Toulouse pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury de cette thèse et l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur le professeur H. DUBOIS qui m'a accueilli dans son équipe et qui a suivi ce travail avec un intérêt constant.

Je remercie Monsieur Le professeur G. BISKUPSKI pour son aide constante. Ses suggestions et critiques pour la réalisation des expériences et l'interprétation des résultats expérimentaux m'ont été d'une aide précieuse pour mener ce travail à son terme.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Monsieur le professeur J. L. FARVACQUE pour l'intérêt qu'il porte à ce travail et sa participation au jury.

Je tiens à exprimer mes remerciements les plus sincères à Madame E. ZDANOWICZ de l'université de Wroclaw (Pologne) pour sa participation aux expériences, ainsi qu'à Messieurs les Professeurs W. ZDANOWICZ de l'institut de physique des solides de Zabrze (Pologne) et S. F. MARENKIN de l'institut de chimie générale et inorganique (Académie des Sciences, Moscou), qui ont fabriqué les matériaux utilisés.

Je remercie Messieurs A. EL KAAOUACHI et B. CAPOEN pour leurs encouragements et leur amicale collaboration.

Je tiens à remercier l'ensemble du personnel technique du laboratoire et de l'U.F.R ainsi que l'équipe du secrétariat pour leur aide et leur disponibilité.

Que Monsieur S. FAUQUEMBERGUE trouve ici l'expression de ma reconnaissance pour avoir assuré l'impression de ce travail.

SOMMAIRE

INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE I : RAPPEL SUR LES SEMICONDUCTEURS DOPES.....	4
I-1 : Modèle hydrogénoïde - Bande d'impuretés - Niveaux donneurs.....	5
I-2 : Désordre et états localisés.....	6
I-3 : Front de mobilité - Transition de Anderson - Conductivité métallique minimum.....	7
I-4 : Mécanismes de conduction - Expressions de la conductivité.....	11
I-4-1 : Cas où le niveau de Fermi est dans une région d'états localisés ($E_F < E_C$).....	11
a) Hautes températures.....	11
b) Températures intermédiaires.....	12
c) Basses températures.....	13
I-4-2 : Cas où le niveau de Fermi est dans une région d'états délocalisés ($E_F > E_C$).....	17
a) Hautes températures.....	17
b) Basses températures.....	17
I-5 : "Gap" de Coulomb.....	17
I-6 : Conséquences - Loi en $T^{-1/4}$ et loi en $T^{-1/2}$	20
CHAPITRE II : CdAs₂ MATERIAU SEMICONDUCTEUR.....	22
II-1 : Propriétés et caractéristiques physiques du CdAs ₂	23
II-1-1 : Structure cristallographique.....	23
II-1-2 : Structure de bande.....	24
II-1-3 : Masse effective.....	24
II-2 : Dispositif expérimental.....	25
II-2-1 : Préparation des échantillons et réalisation de contacts ohmiques.....	25
II-2-2 : Description du banc de mesure automatique.....	27
II-2-3 : Technique expérimentale.....	27
a) Hautes températures ($T > 4,2$ K).....	27
b) Basses températures ($T < 4,2$ K).....	30
II-3 : Mesures d'effet Hall - Classification.....	30
II-4 : Concentration critique de Mott - Rayon effectif de Bohr.....	31

CHAPITRE III : ETUDE DES MECANISMES DE CONDUCTION.....32

III-1 : Variation de la constante de Hall et de la mobilité - Conduction dans la bande d'impuretés.....33

III-2 : Détermination de la compensation K, du nombre de donneurs N_D et d'accepteurs N_A34

 III-2-1 : Modèle de Brooks-Herring.....34

 III-2-2 : Résolution de l'équation de De Boer.....35

III-3 : Détermination des énergies d'ionisation des donneurs.....38

 III-3-1 : Etude de la résistivité à haute température - Energie d'ionisation des donneurs.....39

 III-3-2 : Modèle hydrogénoïde de Bohr - Masse effective de densité d'état.....39

 III-3-3 : Méthode variationnelle.....40

 III-3-4 : Ajustement des courbes de résistivité.....43

III-4 : Détermination de l'énergie d'activation ϵ_3 dans un régime de conduction par saut au plus proche voisin.....45

 III-4-1 : Modèle de Miller et Abrahams.....46

 a) Détermination de la probabilité de transition.....47

 b) Détermination du flux moyen.....49

 c) Expression de la conductivité de Miller et al.....50

 III-4-2 : Résultats et discussion.....51

CHAPITRE IV : ETUDE DE LA MAGNETORESISTANCE NEGATIVE.....63

IV-1 : Magnétorésistance positive dans le régime de conduction par saut.....64

 1) Cas des champs faibles ($\lambda \gg a$).....65

 2) Cas des champs forts ($\lambda \ll a$).....65

IV-2 : Magnétorésistance négative.....66

 IV-2-1 : Modèle empirique de la magnétorésistance négative.....66

 IV-2-2 : Modèle des moments magnétiques de Toyozawa.....68

 IV-2-3 : Discussion.....72

 IV-2-4 : Magnétorésistance négative due à l'effet Zeeman et à l'action du champ magnétique sur le front de mobilité.....73

 IV-2-5 : Discussion.....78

IV-3 : Magnétorésistance due à l'effet orbital - Interférences quantiques.....80

 IV-3-1 : Interférences quantiques dans un régime de conduction par saut à distance variable.....80

IV-3-2 : Résultats et discussion.....	83
IV-3-3 : Magnétorésistance négative due à l'effet orbital selon Sivan et al [SEI].....	86
a) Cas des champs très faibles.....	87
b) Cas des champs intermédiaires.....	88
c) Cas des champs élevés.....	88
IV-3-4 : Résultats et discussion.....	89
IV-4 : Magnétorésistance négative associée aux interférences quantiques et au déplacement du front de mobilité.....	92
IV-4-1 : Correction au modèle et discussion.....	95
IV-5 : Analyse de Zhao, Spivak et al.....	98
IV-5-1 : Résultats et discussion.....	100
CONCLUSION.....	129
BIBLIOGRAPHIE.....	132
ANNEXE 1	136
ANNEXE 2	145
ANNEXE 3	150

INTRODUCTION

Le composé CdAs_2 est un semiconducteur (II-V) dont la structure cristallographique est tétragonale et la masse effective anisotrope. Les surfaces isoénergétiques sont des ellipsoïdes de révolution aplatis, orientés suivant l'axe unique d'ordre 4.

Dans ce travail nous avons étudié la résistivité et l'effet Hall de plusieurs échantillons de CdAs_2 dans un domaine de température compris entre 290 K et 1,6 K, en présence de champs magnétiques atteignant 1,5 Tesla. Ces expériences nous ont permis d'observer les phénomènes suivants :

- _ La variation de la résistivité avec la température.
- _ L'existence d'un maximum de la constante de hall liée à une conduction dans la bande d'impuretés.
- _ L'apparition d'une conduction par saut dans la bande d'impuretés.
- _ L'observation d'une magnéto-résistance négative.

La première partie de ce travail nous a permis d'établir une classification grâce au critère de Mott qui situe tous nos échantillons du côté isolant de la transition métal-non-métal. Les mesures d'effet Hall réalisées au laboratoire confirment les résultats de travaux précédents selon lesquels un mécanisme de conduction particulier peut être associé à chaque domaine de température où la constante de Hall change de comportement.

La connaissance de la compensation et de la concentration des donneurs étant nécessaires, nous avons pour cela effectué une étude détaillée permettant le calcul de ces constantes avec la plus grande précision possible.

L'étude et la détermination de l'énergie d'activation liée à chaque processus de conduction est entreprise dans ce chapitre. Un problème important lié à l'ajustement de la conductivité par la somme de deux termes exponentiels, décrivant chacun un type de conduction particulier, a pu être résolu. La conduction à basse température pouvant s'effectuer par saut au plus proche voisin dans la bande d'impuretés, nous avons alors comparé les énergies d'activation

déduites de l'expérience à celles calculées par des modèles théoriques existants.

Le quatrième chapitre porte sur l'étude et l'interprétation de la magnétorésistance négative du côté isolant de la transition métal-isolant. Ce phénomène souvent observé du côté métallique a pu être interprété grâce à la localisation faible. Cette théorie ne s'appliquant pas aux isolants, nous avons pour cela utilisé plusieurs modèles que nous avons comparé aux résultats expérimentaux.

Un modèle empirique suggère une variation de la magnétorésistance négative proportionnelle à B^x , où $0 < x < 1$, en champs magnétiques faibles. Cependant aucune hypothèse physique n'est émise à ce sujet du côté isolant de la transition métal-non-métal.

Le premier modèle basé sur des hypothèses physiques a été mis au point par Toyozawa. Il propose l'existence d'un nombre de moments magnétiques relativement élevé qui serait à l'origine de l'apparition d'une magnéto-résistance négative. Nous étudierons par la suite l'action du champ magnétique sur les niveaux d'énergie ("effet Zeeman") et sur le front de mobilité E_C .

La nature orbitale de la magnétorésistance négative ayant été prouvée, nous avons consacré la dernière partie de ce travail à l'étude des phénomènes d'interférences associés à la diffusion par une ou plusieurs impuretés. Nous avons également comparé nos résultats expérimentaux à des modèles prenant en compte l'action du champ magnétique sur la longueur de localisation et sur le front de mobilité. Devant la difficulté d'adaptation de certains modèles théoriques avec l'expérience et dans le but d'apporter certaines améliorations, nous avons toujours tenu compte de la composante positive de la magnéto-résistance qui constitue un terme non négligeable dans notre cas.

CHAPITRE I
RAPPEL SUR LES
SEMICONDUCTEURS
DOPES

I-1 Modèle hydrogénoïde - Bande d'impuretés - Niveaux donneurs.

CdAs₂ est un semiconducteur (II-V). Les deux éléments Cd et As possèdent respectivement deux et cinq électrons de valence. Le dopage de type n est réalisé en substituant des atomes de cadmium (du groupe II) par des atomes (du groupe III) introduisant un électron supplémentaire en interaction faible. D'après la théorie élémentaire de Bohr, cet électron se déplace sur une orbite de grand rayon et le potentiel à grande distance, créée par l'impureté ionisée, est décrit de manière correcte par la constante diélectrique du matériau.

Le potentiel créé à grande distance s'écrit :

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa r} \quad (I-1-1)$$

où κ est la constante diélectrique.

Le mouvement de l'électron dans ce potentiel est décrit par l'équation :

$$H \Psi = E \Psi \quad (I-1-2)$$

Ψ est la fonction d'onde de l'électron et l'hamiltonien hydrogénoïde H s'écrit :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2 m^*} \Delta - \frac{e^2}{\kappa r} \quad (I-1-3)$$

où m^* représente la masse effective.

La résolution de l'équation (I-1-2) permet de déterminer les états accessibles à l'électron donnés par :

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \left[\frac{m_0 e^4}{2 \hbar^2} \right] \left[\frac{m^*}{m_0 \kappa^2} \right] \quad (I-1-4)$$

Ces niveaux d'énergie sont situés sous la bande de conduction dans la bande interdite. Ils forment un continuum et constituent la bande d'impuretés.

I-2 Désordre et états localisés.

Dans le cas d'un cristal parfait, la fonction propre d'un électron dans un potentiel périodique est une fonction de Bloch :

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) \exp(i \vec{k} \vec{r}) \quad (I-2-1)$$

où $u_k(\mathbf{r})$ possède la périodicité du réseau.

Dans l'approximation des liaisons fortes, on considère une fonction d'onde électronique $\Phi(\mathbf{r})$ dans le potentiel $u(\mathbf{r})$ d'un atome isolé et E_0 l'énergie associée.

On suppose que les interactions entre les atomes du solide cristallin sont faibles. La fonction d'onde approchée d'un électron dans le réseau s'écrit :

$$\Psi_k = N^{-\frac{1}{2}} \sum_j \Phi_j(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) \exp(i \vec{k} \vec{r}) \quad (I-2-2)$$

L'indice j représente les nœuds du réseau.

L'énergie potentielle dans laquelle se déplace l'électron est donnée par :

$$u(\mathbf{r}) = \sum_j u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) = \sum_j u_j \quad (I-2-3)$$

L'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_j u_j \quad (I-2-4)$$

L'énergie de l'électron dans l'état k est donnée par l'expression :

$$\mathcal{E}(k) = \langle \Psi_k | \hat{H} | \Psi_k \rangle \quad (I-2-5)$$

En ne considérant que les interactions entre proches voisins, l'énergie $\mathcal{E}(k)$ s'écrit :

$$\mathcal{E}(k) = E_0 + \alpha + \beta \sum_n \exp(i \vec{k} \vec{r}_n) \quad (I-2-6)$$

$$\text{où } \alpha = \langle \phi_i | u(r) - u_i | \phi_i \rangle$$

$$\text{soit } \alpha = \sum_{n \neq i} \langle \phi_i | u_n | \phi_i \rangle \quad (1-2-7)$$

$$\text{et } \beta = \sum_{j \neq i} \langle \phi_i | u_j | \phi_j \rangle \quad (1-2-8)$$

α et β sont respectivement les termes de dérive et de recouvrement.

Dans le cas d'un réseau cubique simple où les fonctions d'onde atomiques sont des fonctions du type 1s, l'énergie $\epsilon(k)$ est donnée par :

$$\epsilon(k) = E_0 + \alpha + 2\beta \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) \right] \quad (1-2-9)$$

Les niveaux permis à l'électron forment une bande de largeur J proportionnelle à β et centrée sur la valeur : $E = E_0 + \alpha$.

La fonction d'onde $\Psi_k(r)$ est celle d'un électron libre si $u_k(r)$ est une constante. L'électron est alors délocalisé; sa fonction d'onde est étendue à tout le cristal.

Si l'électron est localisé sur un site donné, sa fonction d'onde décroît suffisamment rapidement vers zéro dans toutes les directions à partir du site considéré.

Dans le cas d'une structure désordonnée l'énergie potentielle n'est plus une fonction périodique. Celle-ci peut se présenter sous les deux formes suivantes :

- _ Une répartition aléatoire de puits de potentiel de même profondeur.
- _ Une répartition régulière de puits de potentiel de profondeur variable.

I-3 Front de mobilité - Transition de Anderson - Conductivité métallique minimum.

Anderson [1] a étudié le mouvement d'un électron dans une bande de largeur B où la distribution de potentiel est perturbée par l'introduction d'un potentiel aléatoire d'amplitude V_0 .

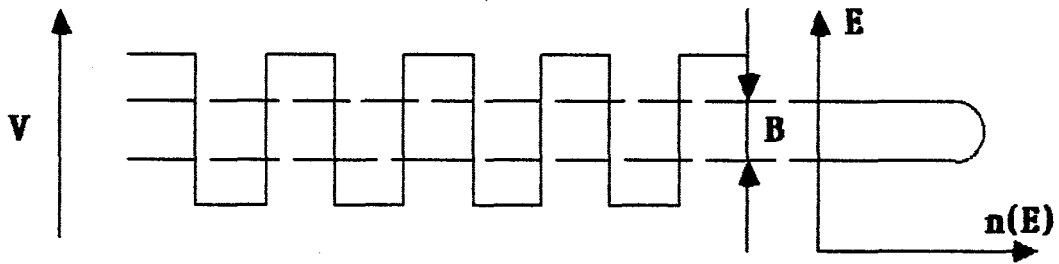


Figure (I- 1- a)

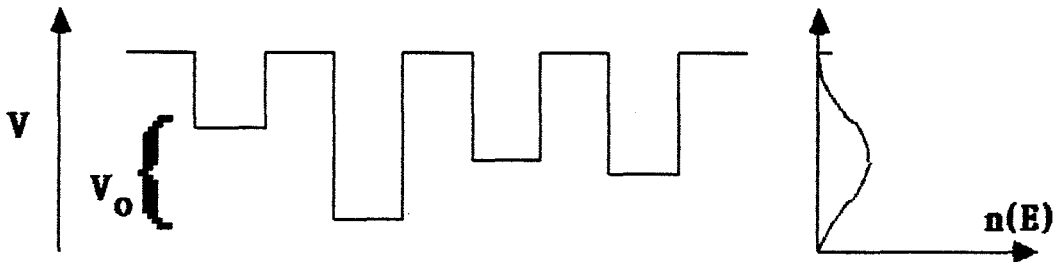


Figure (I-1- b)

Energie potentielle d'un électron dans le modèle de Anderson
(a) - Avant l'introduction d'un potentiel p erturbateur.
(b) - Apr es l'introduction d'un potentiel perturbateur.

Lorsque ($V_0 \ll B$), la perturbation est n egligeable devant la largeur de bande, le d esordre au sens de Anderson est faible et les  etats  electroniques sont d elocalis es dans toute la bande.

Quand le rapport (V_0/B) devient sup erieur  a une valeur critique, les fonctions d'ondes sont localis ees dans l'espace. Un  electron peut alors se d eplacer en  echangeant de l' energie avec les phonons.

Lorsque ($V_0 \gg B$), tous les  etats de la bande sont localis es. Les  electrons sont correctement d ecrits par des fonctions d'ondes dont l'enveloppe d ecroit exponentiellement (suivant $e^{-\alpha r}$).

Mott [2] a propos e l'existence d'une  energie E_C correspondant  a la valeur critique de $(V_0/B)_C$ s eparant les  etats localis es des  etats d elocalis es. Cette  energie E_C s epare en fait les  etats pour lesquels la conductivit e est nulle  a $T=0$ K de ceux pour lesquels elle est non nulle.

E_C est appel e front de mobilit e.

La position du niveau de Fermi E_F (à $T=0$ K) par rapport au front de mobilité E_C permet de déterminer le caractère métallique ou isolant du système. Deux cas sont à envisager :

1 - $E_F > E_C$: Le système est métallique et la conductivité tend vers une valeur finie non nulle quand la température tend vers zéro.

2 - $E_F < E_C$: Le système est isolant et la conductivité tend vers zéro lorsque la température tend vers zéro.

Quand $(E_F - E_C)$ change de signe, une transition métal-isolant se produit. Ce type de transition est appelé transition de Anderson. Le signe de $(E_F - E_C)$ peut être modifié de plusieurs façons :

- _ en modifiant la concentration en impuretés.
- _ en appliquant un champ magnétique.
- _ en appliquant des contraintes axiales.

Le concept de conductivité métallique minimum fut introduit par Mott [2]. Celui-ci se déduit de la formule de Kubo-Greenwood en tenant compte du critère de Ioffe-Regel selon lequel le libre parcours moyen ne peut être inférieur à la distance interatomique. Pour un réseau cubique simple l'expression de la conductivité s'écrit :

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{\hbar a} z a^6 I^2 [N(E_F)]^2 \quad (I - 3 - 1)$$

avec : a : distance interatomique
 z : nombre de coordination.
 I : intégrale de recouvrement.
 $N(E_F)$: densité d'états du niveau de Fermi.

Au voisinage de la transition de Anderson, V_0 est plus grand que la largeur de bande B sans désordre. Dans ces conditions la densité d'état s'écrit en première approximation :

$$N(E) = \frac{1}{a^3 V_0} \quad (I - 3 - 2)$$

D'où l'expression de la conductivité :

$$\sigma = \frac{\pi}{4} \frac{e}{z \hbar a} \left(\frac{B}{V_0} \right)^2 \quad (1-3-3)$$

$$\text{où } B = 2 z I \quad (1-3-4)$$

En admettant comme critère de Anderson $(V_0/B)_C = 2$ à la transition, l'expression de la conductivité métallique minimum s'écrit :

$$\sigma_{\min} = 0,026 \frac{e^2}{\hbar a} \quad (1-3-5)$$

Le concept de conductivité métallique minimum a cependant été remis en cause par Abrahams, Anderson, Licciardello et Ramakrishnan [3] en 1979. En effet grâce à la théorie d'échelle ces auteurs montrent qu'en négligeant les interactions électron-électron la conductivité métallique minimum n'existe pas. Ce résultat a été confirmé plus récemment par Mott [4] et Biskupski [5].

Pour des transitions induites par un champ magnétique, les mesures expérimentales montrent que la conductivité tend continument vers zéro suivant une loi du type $(H_C - H)^\nu$ où $\nu=1$ pour plusieurs matériaux. Cette conductivité métallique minimum conserve néanmoins sa valeur de facteur préexponentiel dans l'expression de la conductivité associée à l'excitation des électrons au front de mobilité.

Comme nous avons vu que l'on pouvait inverser le signe $(E_F - E_C)$ en faisant varier la concentration, E_F atteint E_C par addition d'impuretés et la concentration critique vérifie le critère de Mott défini par :

$$n_e^{1/3} a_H = 0,26 \pm 0,05 \quad (1-3-6)$$

où a_H représente le rayon effectif de Bohr.

En présence d'un champ magnétique, il existe de la même façon une valeur critique B_C pour laquelle une transition de Anderson est induite.

I-4 Mécanismes de conduction - Expressions de la conductivité.

I-4-1 Cas où le niveau de Fermi est dans une région d'états localisés ($E_F < E_C$).

L'échantillon est isolant, différents modes de conduction sont possibles suivant le domaine de température considéré.

a) Hautes températures :

Pour des températures comprises entre 100 K et 10 K, la conduction s'effectue par ionisation des atomes donneurs et excitation des électrons dans la bande de conduction.

Dans ces conditions les électrons sont libres et la conductivité s'écrit :

$$\sigma = n e \mu \quad (I - 4 - 1)$$

n et μ étant respectivement la densité et la mobilité électronique.

La densité électronique peut s'écrire :

$$n(E) dE = N(E) f(E) dE \quad (I - 4 - 2)$$

où $N(E)$ est la densité d'états et $f(E)$ la fonction de distribution de Fermi-Dirac, soit :

$$N(E) = C (E - E_A)^{1/2} \quad (I - 4 - 3)$$

C est une constante et E_A l'énergie du bas de la bande de conduction. La fonction de distribution de Fermi-Dirac s'écrit :

$$f(E) = \left[1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right]^{-1} \quad (I - 4 - 4)$$

D'où

$$f(E) = n = \int_{E_A}^{\infty} C (E - E_A)^{1/2} \left[1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right]^{-1} dE \quad (I - 4 - 5)$$

Comme $E \geq E_A$ alors $E \gg E_F$, on peut faire l'approximation suivante :

$$\left[1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right]^{-1} = \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \quad (I - 4 - 6)$$

On pose $\epsilon = E - E_A$ pour avoir :

$$n = C \exp \left(- \frac{E_A - E_F}{k_B T} \right) \int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} \exp \left(- \frac{\epsilon}{k_B T} \right) d\epsilon \quad (I - 4 - 7)$$

Après intégration on a

$$n = A \exp \left(- \frac{E_A - E_F}{k_B T} \right) \quad (I - 4 - 8)$$

On reporte cette valeur dans l'expression (I-4-1), d'où l'expression de la conductivité :

$$\sigma = \sigma_1 \exp \left(- \frac{E_A - E_F}{k_B T} \right) \quad (I - 4 - 9)$$

On pose $\epsilon_1 = E_A - E_F$ représentant l'énergie d'activation du mécanisme de conduction pour écrire la conductivité sous la forme suivante :

$$\sigma = \sigma_1 \exp \left(- \frac{\epsilon_1}{k_B T} \right) \quad (I - 4 - 10)$$

où σ_1 est un facteur préexponentiel indépendant de l'énergie.

b) Températures intermédiaires :

Dans ce domaine de température les électrons sont excités au front de mobilité, qui joue le rôle de bas de la bande de conduction.

En procédant de la même façon qu'au paragraphe précédent, et en conservant la même approximation où le rapport $(E_F - E_C)/k_B T$ reste suffisamment important, on aboutit à l'expression suivante de la conductivité :

$$\sigma = \sigma_2 \exp \left(- \frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) \quad (I-4-11)$$

On pose : $\epsilon_2 = E_F - E_C$, et on écrit :

$$\sigma = \sigma_2 \exp \left(- \frac{\epsilon_2}{k_B T} \right) \quad (I-4-12)$$

Mott [6] a remarqué la très bonne adéquation entre la valeur expérimentale de σ_2 mesurée dans un cristal d'InSb [7] et la valeur théorique de la conductivité métallique minimum. On a donc

$$\sigma_2 = \sigma_{\min} = 0,026 \frac{e^2}{h a} \quad (I-4-13)$$

$$\text{et } \sigma = \sigma_{\min} \exp \left(- \frac{\epsilon_2}{k_B T} \right) \quad (I-4-14)$$

c) Basses températures :

Dans ce cas la conduction s'effectue par saut dans les états localisés. La contribution à la conductivité dans l'hypothèse des champs faibles ($eER \ll k_B T$) [6] est donnée par l'expression :

$$\sigma = 2 e^2 R^2 v_{ph} N(E_F) \exp \left(- 2\alpha R - \frac{W}{k_B T} \right) \quad (I-4-15)$$

où v_{ph} : facteur dépendant du spectre des phonons.

R : distance entre deux sites.

$N(E_F)$: densité d'états au niveau de Fermi.

$a = 1/\alpha$: longueur de localisation.

W : différence d'énergie entre deux sites.

Selon la fonction suivante :

$$f(R) = \left(- 2\alpha R - \frac{W}{k_B T} \right) \quad (I-4-16)$$

deux cas sont à envisager.

1^{er} Cas : Les deux termes de f(R) sont très différents.

Les états sont fortement localisés ($\alpha R \gg 1$) et la température relativement élevée ($W/k_B T \approx 1$). La conductivité s'écrit simplement :

$$\sigma = 2 e^2 R^2 v_{ph} N(E_F) \exp\left(-\frac{W}{k_B T}\right) \quad (I-4-17)$$

On pose $\sigma_3 = 2 e^2 R^2 v_{ph} N(E_F)$ et $W = \epsilon_3$.

D'où l'expression de la conductivité :

$$\sigma = \sigma_3 \exp\left(-\frac{\epsilon_3}{k_B T}\right) \quad (I-4-18)$$

avec ϵ_3 la distance énergétique entre deux sites voisins. Ce mécanisme est la conduction par saut au plus proche voisin.

2^{ème} Cas : Les deux termes de f(R) sont de même grandeur.

- Les états sont fortement localisés ($\alpha R \gg 1$) et la température basse ($[W/k_B T] \gg 1$).

- Les états sont faiblement localisés ($\alpha R \approx 1$, E_F proche de E_C) et la température relativement élevée ($[W/k_B T] \approx 1$).

Dans ces deux cas, la conduction a lieu par saut à distance variable. L'électron effectue des sauts vers les sites proches énergétiquement. On écrit alors :

$$\bar{W} = \frac{3}{4 \pi R^3 N(E_F)} \quad (I-4-19)$$

et la distance moyenne de saut est :

$$\bar{R} = \int_0^R r^3 dr \left(\int_0^R r^2 dr \right)^{-1} = \frac{3R}{4} \quad (I-4-20)$$

La distance de saut optimale pour laquelle la probabilité est maximale se déduit de la relation $(\partial f(R)/\partial R) = 0$.

Celle ci s'écrit:

$$R = \left[\frac{3}{2 \pi \alpha N(E_F) k_B T} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (1-4-21)$$

Comme la distance moyenne de saut est donnée par :

$$\bar{R} = \frac{3R}{4}$$

La probabilité de saut s'écrit :

$$p = v_{ph} \exp \left(- \frac{B}{T^{1/4}} \right) \quad (1-4-22)$$

$$\text{où } B = B_0 \left[\frac{\alpha^3}{k_B N(E_F)} \right]^{\frac{1}{4}} \text{ et } B_0 = 2 \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} = 1,66 \quad (1-4-23)$$

L'expression de la conductivité (I-4-15) s'écrira alors :

$$\sigma = 2 e^2 R^2 v_{ph} N(E_F) \exp \left(- \frac{B}{T^{1/4}} \right) \quad (1-4-24)$$

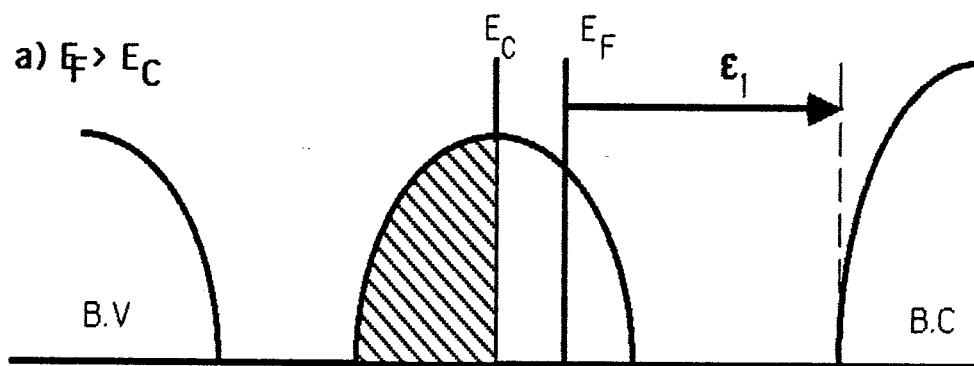
Elle peut se mettre sous la forme :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left(- \left[\frac{T_0}{T} \right]^{\frac{1}{4}} \right) \quad (1-4-25)$$

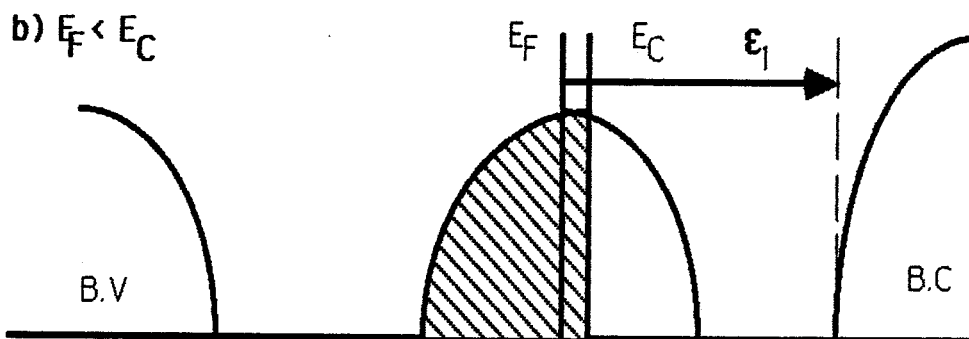
C'est la loi de Mott de conduction par saut à distance variable et la différence d'énergie W entre les sites s'écrit :

$$W = C \frac{T^{3/4}}{a^{3/4} N(E_F)^{1/4}} \quad (1-4-26)$$

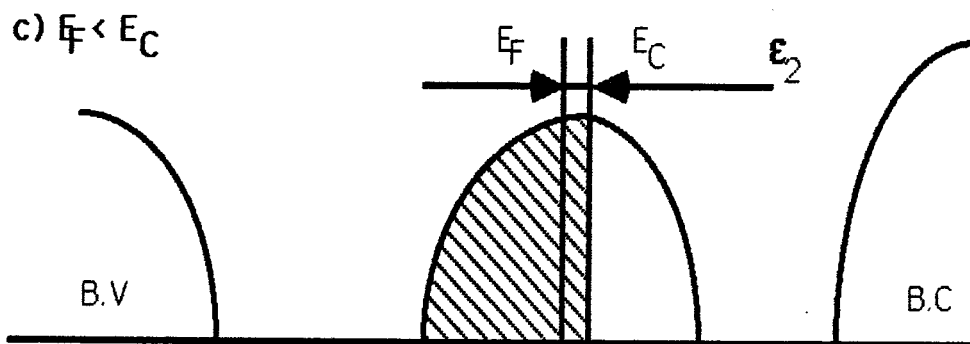
$$\text{et } C = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{2\pi k_B}{3} \right)^{3/4}$$



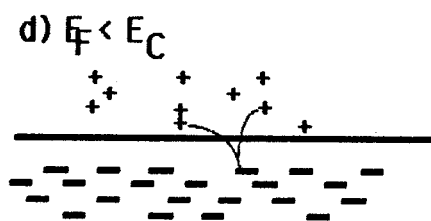
excitation des électrons dans la bande de conduction



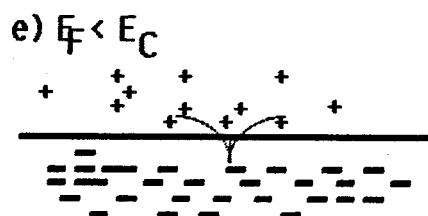
excitation des électrons dans la bande de conduction



excitation des électrons au front de mobilité



Saut au plus proche voisin



Saut à distance variable

FIGURE [I-2]

I-4-2 Cas où le niveau de Fermi est dans une région d'états délocalisés ($E_F > E_C$).

a) Hautes températures :

Les électrons sont excités dans la bande de conduction et de la même façon qu'au paragraphe (I-4-1-a) la conductivité s'écrit :

$$\sigma = \sigma_1 \exp \left(- \frac{\varepsilon_1}{k_B T} \right) \quad (I - 4 - 27)$$

b) Basses températures :

La conductivité est donnée par l'expression de Drude et tend vers une valeur finie non nulle à $T=0$ K. Elle est donnée par :

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m} \quad (I - 4 - 28)$$

L'ensemble de tous ces mécanismes de conduction sont résumés par la figure [I-2].

I-5 "Gap" de Coulomb dans les isolants.

On considère un système désordonné d'états localisés proches du niveau de Fermi. On suppose que la longueur de localisation est beaucoup plus faible que la distance entre sites et que le recouvrement entre les fonctions d'ondes est négligeable.

L'énergie de ce système [8] est donnée par :

$$E = \sum_i E_i^0 n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} e_{ij} n_i n_j \quad (I - 5 - 1)$$

où : E_i^0 est l'énergie du site sans interaction.

$e_{ij} = (e^2 / (\kappa r_{ij}))$ est l'énergie d'interaction électron-électron.

$r_{ij} = |r_i - r_j|$ est la distance séparant les sites i et j .

κ est la constante diélectrique.

n_i est le nombre d'occupation ($n_i = 0$ ou 1).

En exprimant l'énergie d'excitation d'une particule sous la forme suivante :

$$E = E_i^0 + \sum_{i \neq j} e_{ij} n_i \quad (I-5-2)$$

Le transfert d'un électron du site i au site j (respectivement occupé et vide à l'état fondamental) accroît l'énergie du système de :

$$\Delta E = E_j - E_i - e_{ij} > 0 \quad (I-5-3)$$

où e_{ij} est le terme décrivant l'interaction de Coulomb de la paire électron-trou. On pose pour la suite : $E_i - E_j = \mathcal{E}$.

En supposant que la densité d'états $N_0(E)$ est constante, la distance moyenne entre les états dans le faible intervalle d'énergie \mathcal{E} , centré sur le niveau de Fermi, s'écrit :

$$N_0(E) \mathcal{E} \approx n \approx \frac{1}{R^3} \quad (I-5-4)$$

$$\text{soit } R = [N_0(E) \mathcal{E}]^{-1/3} \quad (I-5-5)$$

L'expression (I-5-3) s'annule lorsque :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_m = \Delta = \frac{e^2}{\kappa r_{ij}} \quad (I-5-6)$$

Comme la densité d'états établie par Shklovskii [9] s'écrit :

$$N_0(\mathcal{E}) = \alpha \frac{\mathcal{E}^2 \kappa^3}{e^6} \quad (I-5-7)$$

$$\text{d'où } \mathcal{E} = \alpha \left(\frac{N_0(\mathcal{E}) e^6}{\alpha \kappa^3} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (I-5-8)$$

L'expression (I-5-5) devient :

$$R \approx \left[\left(\frac{N_0(\epsilon) e^6}{\alpha \kappa^3} \right)^{\frac{1}{2}} N_0(\epsilon) \right]^{-1/3} \quad (I-5-9)$$

$$\text{soit : } R = C \frac{\kappa^{1/2}}{N_0(\epsilon)^{1/2} e} \quad (I-5-10)$$

On remplace R dans (I-5-6) et on trouve :

$$\Delta = \frac{N_0(\epsilon)^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2}} \quad (I-5-11)$$

Si $\epsilon \ll \Delta$, l'énergie d'interaction $[e^2/(\kappa r)] = (e^2/\kappa)(N_0 \epsilon)^{1/3}$ est supérieure à ϵ , ce qui est incompatible avec l'inégalité (I-5-3).

Si on suppose que $[e^2/(\kappa r)] > \epsilon$, on aura :

$$\frac{e^2}{\kappa} (N_0(\epsilon) \epsilon)^{1/3} = \left(\frac{N_0(\epsilon)^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2}} \right) \epsilon^{1/3} \left(\frac{N_0(\epsilon)^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2}} \right)^{-1/3} > \epsilon \quad (I-5-12)$$

Etant donné (I-5-11), on écrira :

$$\Delta \left(\frac{\epsilon}{\Delta} \right)^{1/3} > \epsilon \iff \Delta > \epsilon^{2/3} \Delta^{1/3} \quad (I-5-13)$$

Ce qui est vérifié compte-tenu de l'hypothèse $\epsilon \ll \Delta$.

Cependant on ne peut utiliser une densité d'états constante, car ceci nous amènerait à une contradiction avec l'inégalité (I-5-3).

Nous devons donc toujours avoir : $\epsilon > \Delta$. Pour cela il suffit que Δ diminue avec ϵ et tende vers zéro quand ϵ tend vers ϵ_F .

Il en résulte que l'existence du "gap" de Coulomb, centré au niveau de Fermi est une conséquence de l'inégalité (I-5-3) qui veut que $[\varepsilon - e^2/(\kappa r_{ij})] > 0$, c-à-d qu'il y ait effectivement transfert d'électrons du site i au site j . La décroissance de la densité d'états près du niveau de Fermi est alors proportionnelle à ε^2 . Nous allons analyser dans le paragraphe suivant les conséquences sur la conductivité de l'existence du "gap" de Coulomb.

I-6 Conséquences - Loi en $T^{-1/4}$ et loi en $T^{-1/2}$.

Dans le paragraphe précédent (I-4-1), nous avons vu que lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable, la conductivité pouvait se mettre sous la forme :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left(- \left[\frac{T_0}{T} \right]^{1/4} \right) \quad (I-4-25)$$

et la différence d'énergie entre les sites est :

$$W = C \frac{T^{3/4}}{a^{3/4} N(E_F)^{1/4}} \quad (I-4-26)$$

Ce résultat a été obtenu en négligeant les interactions électron-électron.

Comme nous venons de voir que la densité d'états $N(E_F)$ s'annulait au niveau de Fermi, deux cas sont à envisager selon la valeur de $k_B T$.

1^{er} Cas : La température est suffisamment élevée pour pouvoir négliger l'influence du "gap", soit $W \gg \Delta$ et compte-tenu de (I-4-26) et (I-5-11) on aboutit à la condition :

$$T \gg T_C = \frac{e^4 N(E_F) a}{\kappa^2} \quad (I-6-1)$$

Dans ce cas la loi de Mott est valable et la conductivité donnée par l'expression (I-4-25) s'applique.

2^{ème} Cas : Si $T \ll T_C$ on ne peut plus négliger le "gap" de coulomb et la loi de Mott n'est plus applicable.

Shklovskii et al [8],[9] ont montré que la conductivité pouvait se mettre sous la forme :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left(- \left[\frac{T_0}{T} \right]^{1/2} \right) \quad (1-6-2)$$

$$\text{où } T_0 = \frac{\beta_1 e^2}{\kappa a}$$

et β_1 est un coefficient numérique évalué à $\beta_1=2,8$.

CHAPITRE II

**CdAs₂ MATERIAU
SEMICONDUCTEUR**

II-1 Propriétés et caractéristiques physiques du CdAs₂.

CdAs₂ est un composé (II-V) dont nous allons donner toutes les caractéristiques physiques intéressantes.

II-1-1 Structure cristallographique.

CdAs₂ cristallise dans une structure tétragonale [10] avec les paramètres de maille suivants : $a = 7,96 \text{ \AA}$ et $c = 4,67 \text{ \AA}$.

La projection dans un plan (xoy), est schématisée selon Cervinka et al [11] de manière suivante :

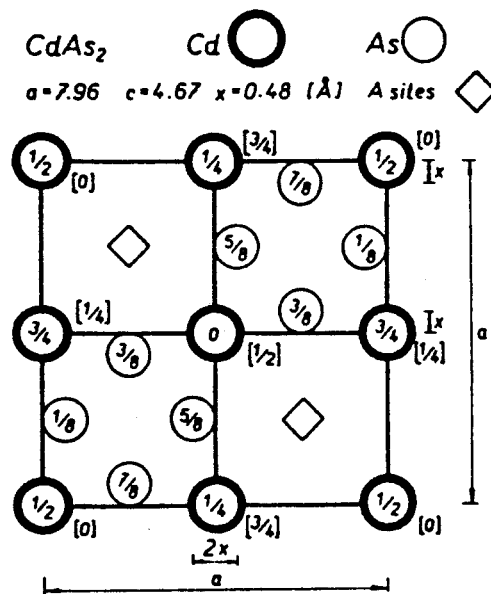


FIGURE [II-1]

La projection dans le plan (xoz) est schématisée par :

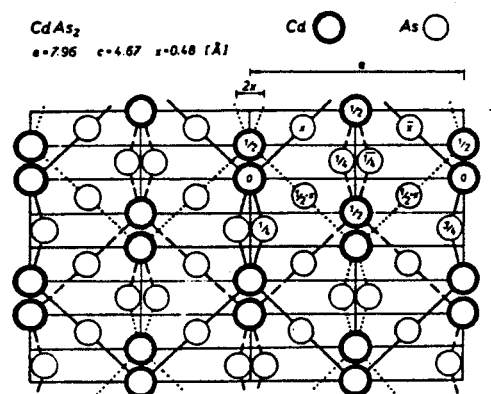


FIGURE [II-2]

II-1-2 Structure de bande.

Le composé CdAs₂ possède une structure tétragonale anisotrope avec un seul axe de symétrie d'ordre 4 (dirigé suivant c). L'analyse de la structure de bande effectuée par Long [12] suggère l'existence, soit d'un minimum dans la bande de conduction localisé en k=0, soit de 2 minimums équivalents localisés suivant k_z. Les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution aplatis dont l'orientation est parallèle à l'axe d'ordre 4 .

II-1-3 Masse effective.

Etant donné le caractère anisotrope de ce composé, les masses effectives longitudinales et transverses des électrons et des trous participant à la conduction sont les suivantes :

$$\begin{array}{ll}
 \text{Electrons:} & m_{e\perp} = 0,150 m_e \\
 & m_{e\parallel} = 0,580 m_e \\
 \text{Trous:} & m_{p\perp} = 0,094 m_e \\
 & m_{p\parallel} = 0,346 m_e
 \end{array}$$

L'ensemble des constantes physiques importantes extraites de l'encyclopédie Landolt et Bornstein [13] sont récapitulées dans la tableau (II-1).

Constante Physique	Valeur Numérique	Conditions expérimentales
Largeur de la bande interdite	1,00 eV 1,04 eV	T=297 K. E c T=297 K. E ⊥ c
Structure tétragonale	a = b = 7,96 Å c = 4,67 Å	
masses effectives	$m_{e\perp} = 0,584 m_0$ $m_{e\parallel} = 0,150 m_0$ $m_{p\perp} = 0,346 m_0$ $m_{p\parallel} = 0,094 m_0$	T = 1,5 K (par résonance cyclotron dans la direction c)
Constante diélectrique	$\epsilon (0) = 17,4$ $\epsilon (0) = 18,5$	T=300 K. E c T= 4,2 K. E ⊥ c

Tableau (II-1) : Caractéristiques physiques du CdAs₂

II-2 Dispositif expérimental.

L'objectif de ce travail est l'interprétation de la magnétorésistance négative ainsi que l'étude des phénomènes de transport dans le semiconducteur CdAs_2 . Nous avons pour cela effectué des mesures d'effet Hall pour déterminer la concentration de porteurs n , la mobilité μ_H , et la constante de Hall R_H .

Ces mesures ont été réalisées pour des températures comprises entre 290 K et 4,2 K et des champs magnétiques atteignant 1,5 Tesla. Nous avons également effectué des mesures de résistivité jusqu'à des températures atteignant 1,6 K dans le meilleur des cas.

Ces conditions expérimentales nous ont permis d'observer des mécanismes de conduction liés à la bande d'impuretés ainsi qu'une magnétorésistance négative. Les mesures de concentration situent tous nos échantillons du côté isolant de la transition métal-non-métal.

II-2-1 Préparation des échantillons et réalisation de contacts ohmiques.

Les échantillons étudiés ont une forme parallélépipédique de dimensions moyennes ($1 \times 0,2 \times 0,1 \text{ cm}^3$). La première opération consiste à polir mécaniquement tous nos échantillons fixés sur un support. Ce polissage est réalisé grâce à des poudres dont le grain est très fin.

Une fois cette opération terminée, on effectue un nettoyage chimique dans une solution d'acide chlorhydrique portée à ébullition pendant quelques secondes. Des contacts électriques d'étain pur sont ensuite déposés grâce à un flux d'acide lactique concentré sous atmosphère neutre d'argon. Sur ces contacts des fils d'argent très fins sont soudés à l'étain pur.

L'échantillon est monté sur un support solidaire d'une canne reliée aux différents appareils de mesure. Cette canne est ensuite introduite dans un cryostat à réserve d'hélium (Figure [II-3]) suspendu entre les deux bobines d'un électro-aimant.

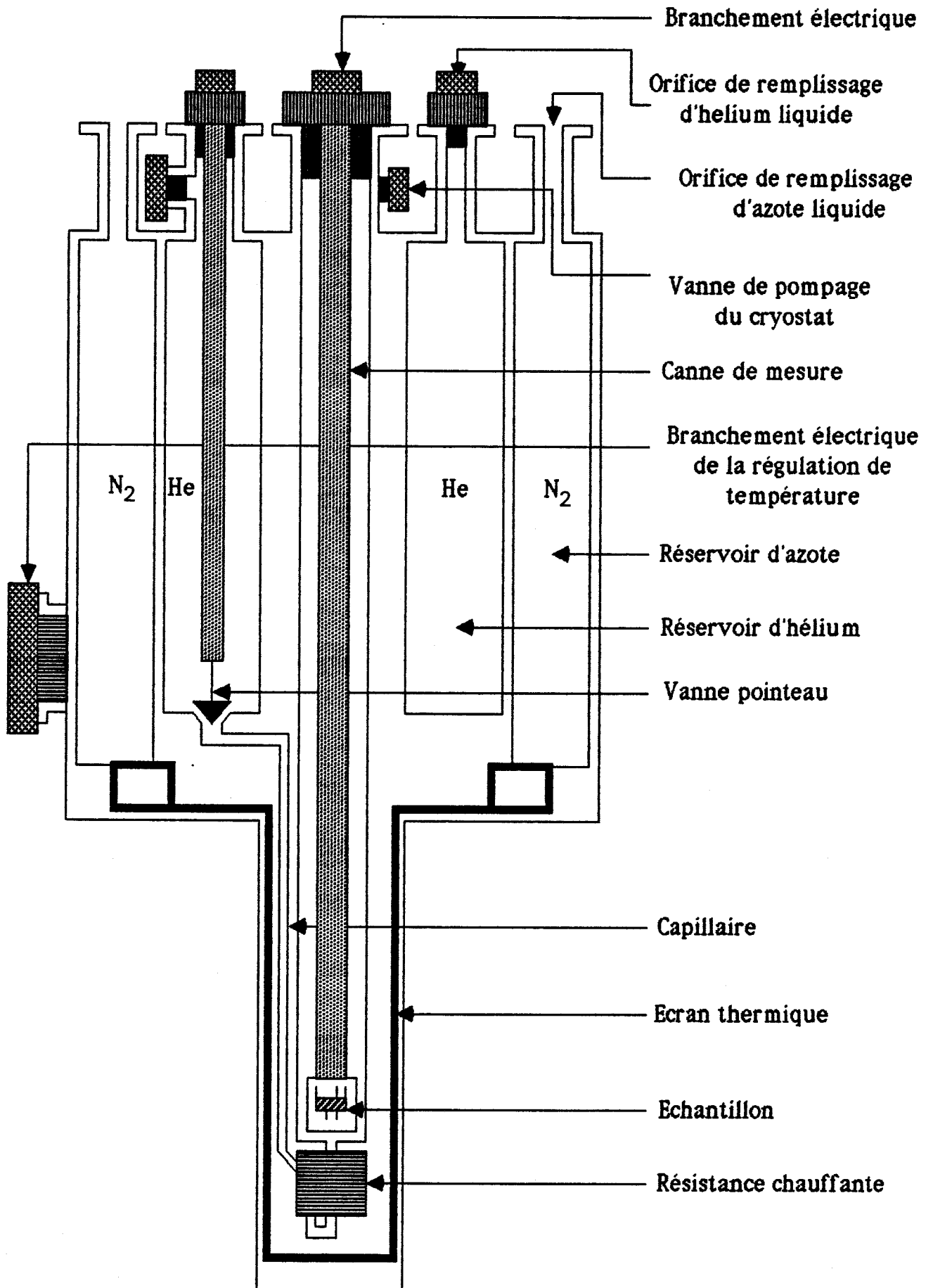


FIGURE [II-3] : Schéma du cryostat à réserve d'hélium

Le courant polarisant l'échantillon suivant l'axe x (Figure [II-4]) doit avoir une intensité suffisamment faible pour conserver un caractère ohmique et éviter tout phénomène d'échauffement. On assure ainsi un bon équilibre thermique entre le fluide cryogénique et l'échantillon.

Le champ magnétique extérieur B est appliqué suivant l'axe z et la tension de Hall V_H est mesurée suivant l'axe y (Figure [II-4]).

II-2-2 Description du banc de mesure automatique.

Les mesures de constante de Hall, de concentration, et de mobilité sont faites systématiquement pour chaque échantillon. Spriet [14] a automatisé l'expérience pilotée par un micro-ordinateur commandant l'alimentation du champ magnétique. Le schéma du banc de mesure est représenté par la figure (II-5) ci-dessous.

Le programme d'acquisition a été écrit en BASIC par Spriet [14] et ne demande aucune rapidité d'exécution de mesure. Des temporisations peuvent être introduites pour stabiliser la valeur du champ et des différentes tensions.

II-2-3 Technique expérimentale.

a) - Hautes températures ($T > 4.2 K$) :

Dans cette gamme de température des mesures d'effet Hall et de résistivité ont été réalisées. Dans ce cas la température est stabilisée par un régulateur électronique.

La mesure d'effet Hall à température ambiante, où toutes les impuretés sont ionisées, permet de déterminer [15] la concentration de porteurs n.

La variation de la tension de Hall V_H avec le champ magnétique B permet de déterminer la constante de Hall. En effet dans le domaine où cette variation est linéaire en champ, la tension de Hall s'écrit : $V_H = (R_H . I . B) / d$ où R_H représente la constante de Hall, I le courant polarisant l'échantillon, et d l'épaisseur de celui-ci.

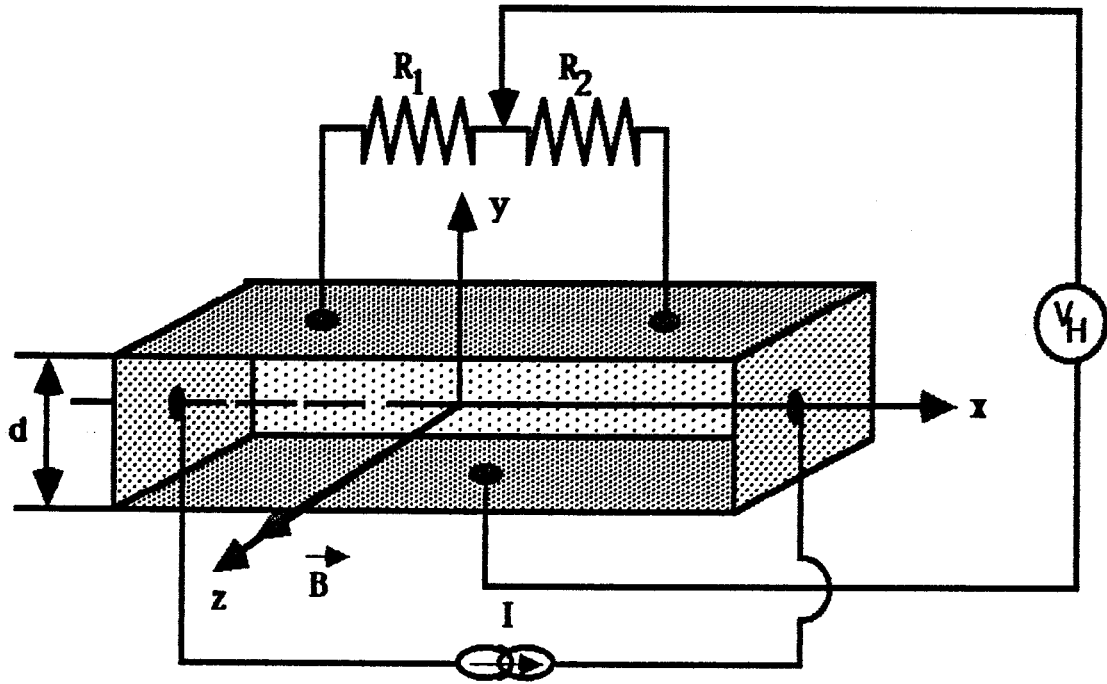


Figure (II-4-a) : Dispositif de mesure d'effet Hall.

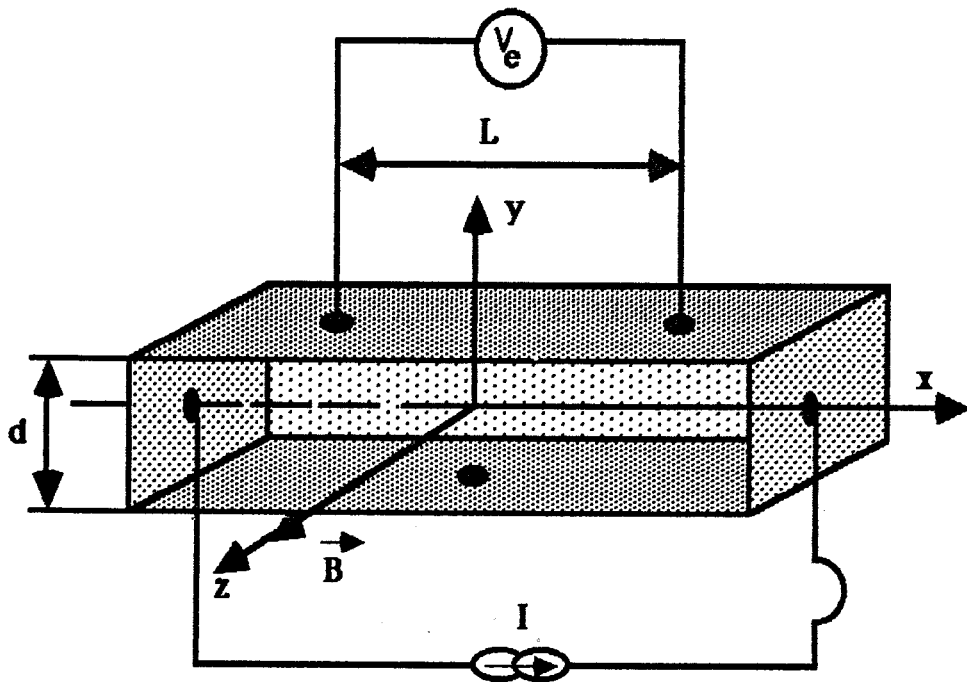


Figure (II-4-b) : Dispositif de mesure de résistivité.

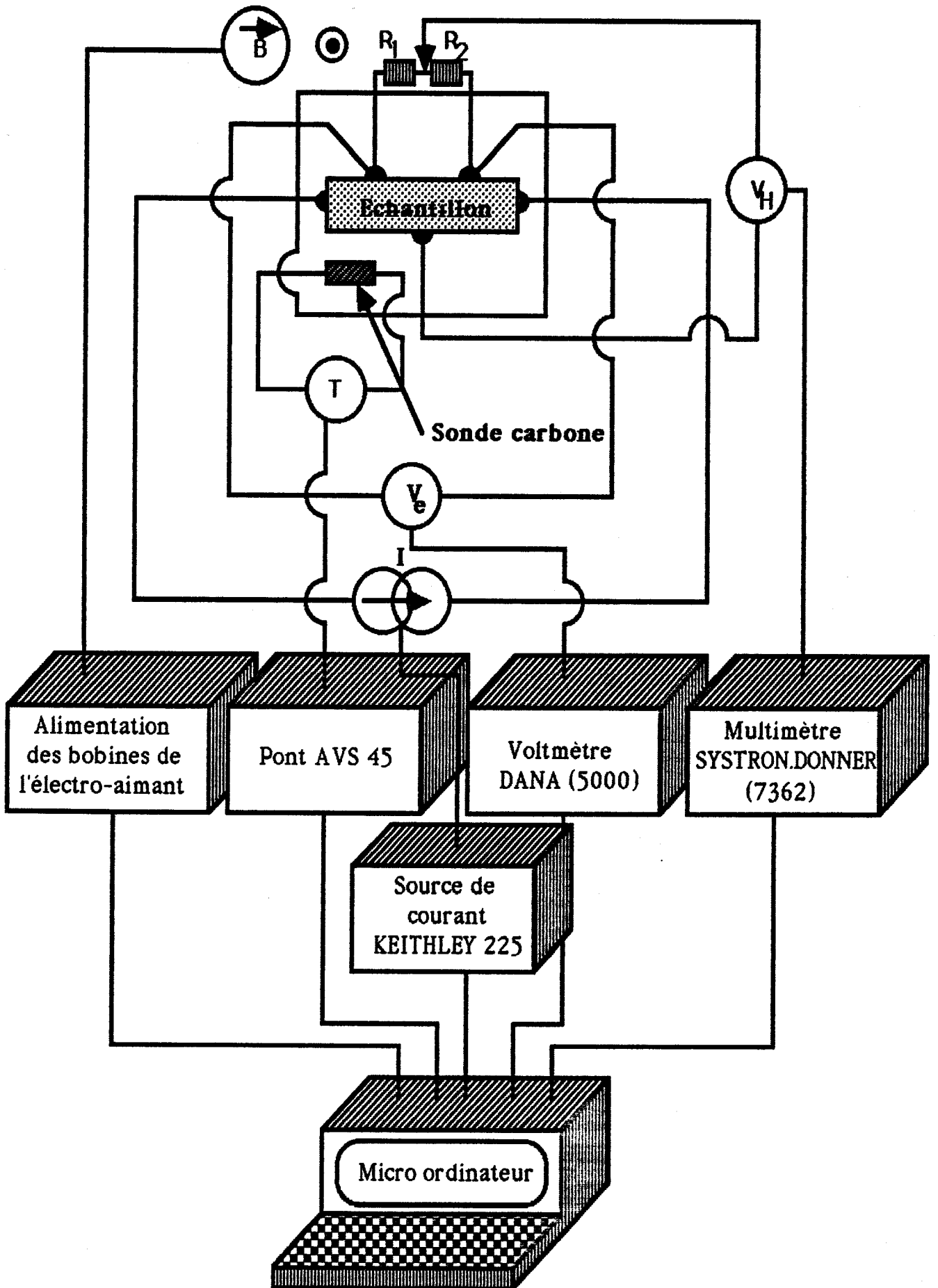


Figure (II-5) : Schéma du banc de mesure automatique.

Chaque valeur de la tension de Hall est déterminée à partir de quatre mesures. Elles sont effectuées en inversant successivement les sens du courant et du champ magnétique pour annuler les tensions de désalignement et autres parasites.

Le montage permettant d'éliminer ce désalignement est représenté par la figure [II-4-a]. Il n'est cependant utilisable que dans le cas où la résistance de l'échantillon est au moins cent fois plus faible que les résistances R_1 et R_2 .

Ces conditions ont pu être respectées pour des températures supérieures à 4,2 K et des champs magnétiques allant jusqu'à 1,5 Tesla.

La concentration de porteurs est donnée par l'expression : $n = (1/R_H e)$, avec $n = N_D - N_A$ où N_D et N_A sont respectivement les concentrations de donneurs et d'accepteurs.

b) - Basses températures ($T < 4.2$ K) :

Dans cette gamme de température, le dispositif précédent ne permet plus de détecter l'effet Hall. Ceci est en partie dû au fait que la résistance des échantillons devient très grande, et l'élimination des tensions de désalignement très élevées n'est plus possible.

Pour éviter l'influence de la résistance des fils d'argent, dans lesquels circule le courant polarisant l'échantillon, nous avons réalisé un dispositif dit à quatre fils décrit sur la figure (II-4-b).

Dans ce cas la température n'est plus fixée par une régulation électronique. On règle la tension de vapeur saturante de l'hélium dans lequel baigne l'échantillon au moyen d'un pressostat. La température est mesurée par une sonde de carbone étalonnée, située dans le même plan que l'échantillon.

II-3 Mesures d'effet Hall - Classification.

Les mesures d'effet Hall nous ont permis de déterminer la concentration de nos échantillons à température ambiante. Les résultats regroupés dans le tableau (II-2) ci-dessous tiennent compte de l'orientation cristallographique des échantillons par rapport à la direction du champ électrique polarisant.

ECHANTILLON	ORIENTATION DU CHAMP ELECTRIQUE	CONCENTRATION (en cm^{-3}) (à T = 290 K)
S1	$\vec{E} \perp \langle 110 \rangle$	$1,6 \cdot 10^{17}$
S4	$\vec{E} \perp \langle 001 \rangle$	$2,5 \cdot 10^{17}$
S6	$\vec{E} \perp \langle 001 \rangle$	$3,4 \cdot 10^{17}$
S52	$\vec{E} \perp \langle 110 \rangle$	$6,53 \cdot 10^{16}$
S61	$\vec{E} \perp \langle \bar{1}10 \rangle$	$8,8 \cdot 10^{16}$

TABLEAU (II-2)

II-4 Concentration critique de Mott - Rayon effectif de Bohr.

La concentration critique de Mott [3] qui détermine la transition métal-isolant est définie par :

$$n_c^{1/3} a_H = 0,26 \pm 0,05 \quad (\text{II-4-1})$$

où a_H représente le rayon effectif de Bohr. Etant donné le caractère anisotrope du CdAs_2 , la masse effective isotrope de densité d'état considérée est donnée par :

$$m^* = (m_t^2 m_l) = 0,37 m_0 \quad (\text{II-4-2})$$

où m_t et m_l sont respectivement les masses effectives transverse, et longitudinale. D'où le rayon effectif de Bohr :

$$a_H = \frac{\kappa m_0}{m^*} a_0 \approx 26 \text{ \AA} \quad (\text{II-4-3})$$

avec a_0 le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène, et $\kappa \approx 18$ la constante diélectrique du CdAs_2 . Le critère de Mott appliqué au CdAs_2 , situe la concentration critique n_c entre $1,6 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$ et $5,2 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$. On constate d'après la classification précédente - tableau (II-2) - que tous nos échantillons sont situés du côté isolant de la transition métal-non-métal.

CHAPITRE III
ETUDE DES MECANISMES
DE CONDUCTION

III-1 Variation de la constante de Hall et de la mobilité - Conduction dans la bande d'impuretés.

L'expérience du laboratoire dans l'analyse des mécanismes de conduction a permis d'étudier la variation de la constante de Hall avec la température [15] sur un large domaine de concentration, s'étendant de part et d'autre de la transition métal-isolant.

Les résultats obtenus pour nos échantillons situés du côté isolant de la transition apparaissent sur la figure [III-1].

On observe dans tous les cas un maximum de la constante de Hall R_H pour des températures comprises entre 10 K et 20 K. Ce phénomène a été également observé dans le cas de l'InP [15]. Ce maximum est généralement associé à l'apparition de phénomènes de conduction dans la bande d'impuretés.

Le domaine correspondant à la croissance de R_H est associé au régime de conduction par ϵ_1 sur les courbes de résistivité (Figure [III-2]).

La partie décroissante de R_H serait par contre associée à l'apparition du processus de conduction par ϵ_2 dans la bande d'impuretés.

A plus basse température la constante de Hall R_H devient très difficilement mesurable. On observe néanmoins (figure [III-1]) dans certains cas une très faible variation de celle-ci. Ce comportement constant correspondrait à un régime de conduction par saut dans la bande d'impuretés sur les courbes de résistivité (Figure [III-2]).

Cette variation de R_H avec la température peut être utilisée comme critère pour la détermination des zones de température où les différents processus de conduction par ϵ_1 , ϵ_2 et par saut sont dominants.

On note également que sur les courbes représentant la variation de R_H en fonction de $(1/T)$ (Figure [III-1]), la hauteur du maximum est d'autant plus importante que la concentration en impuretés diminue. Nous ne possédons cependant aucune interprétation physique de ce phénomène.

Les courbes représentant la variation de la mobilité (figure [III-3]) en fonction de $\text{Log}(T)$ pour les différents échantillons, montrent que les comportements sont similaires. En effet celle-ci augmente dans un premier

temps jusqu'à atteindre un maximum pour des températures comprises entre 10 K et 20 K.

Au fur et à mesure que la température diminue la mobilité décroît ensuite très rapidement vers de très faibles valeurs. Mott et al [16] puis Kamimura et al [17] ont interprété certains de ces résultats en supposant qu'à température élevée la mobilité était due à des électrons excités vers le front de mobilité, tandis qu'aux températures plus basses la conduction se faisait par saut auquel cas l'effet Hall était faible ou nul, d'où une chute progressive de la mobilité.

III-2 Détermination de la compensation K, du nombre de donneurs N_D et d'accepteurs N_A .

La connaissance du nombre de porteurs n'étant pas suffisante pour l'étude des mécanismes de conduction à basses températures., il est donc nécessaire de connaître la compensation K des échantillons étudiés. On la définit par le rapport du nombre d'accepteurs sur celui des donneurs ($K=N_A/N_D$).

Il existe plusieurs méthodes permettant de déterminer la compensation, cependant il s'avère qu'elles ne peuvent s'appliquer indifféremment les unes des autres pour tous les types d'échantillons, de plus celles-ci ne donnent qu'une estimation plus ou moins précise de K.

Nous allons exposer dans ce paragraphe les différents modèles étudiés et déterminer la valeur de K la plus précise possible.

III-2-1 Modèle de Brooks-Herring.

Dans le processus de diffusion par les impuretés ionisées et pour un matériau non dégénéré la mobilité est donnée par la formule de Brooks-Herring [18]. Celle-ci s'applique dans le domaine de température où la mobilité est proportionnelle à $T^{3/2}$.

Pour cela nous avons représenté la courbe donnant la variation de la mobilité en fonction de la température sur une échelle logarithmique (Figure [III-3]). La région où la mobilité varie en $T^{3/2}$ étant très réduite, se situe à des températures comprises entre 10 K et 30 K pour chaque échantillon.

La formule classique de Brooks-Herring [18] donnant la variation de la mobilité en fonction de la température s'écrit :

$$\mu = \frac{2^{7/2} \kappa^2 (k_B T)^{3/2}}{\pi^{3/2} m^{*1/2} e^3 N_i} \frac{1}{F(x)} \quad (\text{III-2-1})$$

$$F(x) = \text{Log}(1+x) - \frac{1}{1+x} \quad (\text{III-2-2})$$

$$x = \frac{6 \kappa m^* k_B^2 T^2}{\pi n \hbar^2 e^2} \quad (\text{III-2-3})$$

où N_i représente la densité d'impuretés ionisées, n le nombre d'électrons déterminé par la constante de Hall.

Les autres paramètres sont donnés dans le système d'unités c.g.s, u.e.s.

- $\kappa = 18$ (Constante diélectrique relative)
- $k_B = 1,3807 \cdot 10^{-16}$ erg.K⁻¹ (Constante de Boltzman)
- $m^* = 3,3705 \cdot 10^{-28}$ g (Masse effective)
- $e = 4,8032 \cdot 10^{-10}$ ues (Charge de l'électron)
- $h = 1,05459 \cdot 10^{-27}$ erg.s (Constante de Planck)

Le calcul de Brooks-Herring basé sur l'approximation de Born est correct pour des valeurs du paramètre x assez grandes. Néanmoins son application au cas du CdAs₂ ne permet pas d'obtenir des valeurs cohérentes de la compensation K .

Afin de surmonter cette difficulté nous avons calculé la compensation grâce à la résolution de l'équation de neutralité établie par De Boer [19] dans le cas d'un semiconducteur non dégénéré.

III-2-2 Résolution de l'équation de De Boer.

Connaisant la relation entre la concentration d'électrons et la température dans la région extrinsèque [19] d'un semiconducteur non dégénéré :

$$\frac{n(N_A+n)}{N_D-N_A-n} = \left[\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \exp\left[-\frac{E_D}{k_B T}\right] \quad (\text{III-2-4})$$

où les paramètres suivants sont à déterminer:

E_D : l'énergie d'ionisation des donneurs.

N_A : la concentration des accepteurs.

N_D : la concentration des donneurs.

On développe l'équation (III-2-4) qui se met sous la forme suivante :

$$n^2 + An + B = 0 \quad (\text{III-2-5})$$

$$\text{où } A = N_A + \left[\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \exp\left[-\frac{E_D}{k_B T}\right] \quad (\text{III-2-6})$$

$$\text{et } B = -(N_D - N_A) + \left[\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \exp\left[-\frac{E_D}{k_B T}\right] \quad (\text{III-2-7})$$

On suppose qu'à température ambiante tous les donneurs sont ionisés. Dans ce cas la concentration de porteurs déterminée par l'effet Hall à 290 K est donnée par : $n_{\text{amb}} = N_D - N_A$.

La racine réelle positive de l'équation (III-2-5) est donnée par l'expression :

$$n = \frac{-A + \sqrt{A^2 - 4B}}{2} \quad (\text{III-2-8})$$

On pose ensuite : $K = N_A/N_D$

$$\text{et } f(T) = \left[\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \exp\left[-\frac{E_D}{k_B T}\right]$$

$$\text{soit } f(T) = 5,42 \cdot 10^{14} T^{3/2} \exp\left[-\frac{E_D}{k_B T}\right] \quad (\text{III-2-9})$$

L'équation (III-2-8) s'écrit alors :

$$n = \frac{1}{2} \left[\left(f(T) + KN_D \right) + \sqrt{\left(f(T) + KN_D \right)^2 + 4N_D(1-K)f(T)} \right] \quad (\text{III-2-10})$$

Compte tenu du fait que : $n_{amb} = N_D - N_A = N_D(1-K)$

$$\text{soit } N_D = \frac{n_{amb}}{1-K} \quad (\text{III-2-11})$$

l'expression (III-2-10) donnant la variation de la concentration avec la température se réduit à une équation à deux paramètres K et E_D :

$$n = \frac{1}{2} \left[\left(f(T) + \frac{Kn_{amb}}{1-K} \right) + \sqrt{\left(f(T) + \frac{Kn_{amb}}{1-K} \right)^2 + 4Kn_{amb}f(T)} \right] \quad (\text{III-2-12})$$

La courbe donnant la variation de la concentration mesurée avec la température (Figure [III-4]) est alors ajustée par cette expression.

On détermine ensuite la compensation en calculant à chaque fois le pourcentage de déviation entre l'expression (III-2-12) et les valeurs de la concentration mesurée pour chaque température.

On fait varier pour cela la compensation de 0 à 1 par pas de 0,01 et l'énergie d'ionisation des donneurs E_D de 0 à 20 meV par pas de 0,1 meV.

L'expression du pourcentage de déviation est donnée par :

$$\%Dev = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{100}{n_{i\text{ mes}}} \left(n_{i\text{ cal}} - n_{i\text{ mes}} \right) \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-2-13})$$

où $n_{i\text{ mes}}$ et $n_{i\text{ cal}}$ représentent respectivement la valeur mesurée et la valeur calculée de la concentration par l'expression (III-2-12) à la température T_i .

Le meilleur ajustement est obtenu en choisissant le pourcentage de déviation minimal correspondant au plus faible écart entre les valeurs expérimentales et celles calculées par l'expression (III-2-12).

Les résultats de ce calcul appliqué à chaque échantillon, sont regroupés dans le tableau (III-1). Nous pouvons ainsi donner une estimation correcte de la compensation et de l'énergie d'ionisation des donneurs.

Echantillon	$N_{amb} - N_D - N_A$ (cm^{-3})	N_D (cm^{-3})	K	E_D (meV)
S1	$1,6 \cdot 10^{17}$	$1,9 \cdot 10^{17}$	0,15	8,1
S4	$2,5 \cdot 10^{17}$	non calculable par cette méthode		
S6	$3,4 \cdot 10^{17}$			
S52	$6,53 \cdot 10^{16}$	$9,9 \cdot 10^{16}$	0,34	9,0
S61	$8,1 \cdot 10^{16}$	$1,07 \cdot 10^{17}$	0,24	9,0

TABLEAU (III-1)

L'ajustement des courbes donnant la variation du logarithme de la concentration en fonction de l'inverse de la température (figure [III-5]) avec les valeurs de K et E_D calculées montre qu'il y a une très bonne adéquation entre la théorie - expression (III-2-12) - et l'expérience. Le pourcentage d'erreur atteint des valeurs de 4% pour des ordres de grandeur de 10^{17} cm^{-3} .

Lors d'un travail précédent [20] (voir annexe 1) la compensation a été calculée plus simplement en résolvant l'équation de neutralité d'un semiconducteur non dégénéré faiblement compensé. Les valeurs de la compensation obtenues en annexe sont proches de celles déduites de la formule de De Boer qui donne une meilleure précision dans notre cas.

III-3 Détermination des énergies d'ionisation des donneurs.

Il existe plusieurs façons permettant la détermination de l'énergie d'ionisation des donneurs. Ces méthodes plus ou moins précises seront développées dans ce paragraphe.

III-3-1 Etude de la résistivité à haute température - Energie d'ionisation des donneurs.

Les courbes (figure [III-6]) représentant le comportement de la résistivité en fonction de l'inverse de la température, montrent que celle-ci varie suivant une loi du type :

$$\rho = \rho_0 \exp \left(\frac{\epsilon_1}{k_B T} \right)$$

à température élevée. Les valeurs des énergies d'ionisation des donneurs E_1 déterminées par un ajustement sont données dans le tableau (III-2) ci-dessous :

ECHANTILLON	ϵ_1 (meV)
S1	8,9
S4	7,8
S6	6,1
S52	11,2
S61	12,4

TABLEAU (III-2)

III-3-2 Modèle hydrogénoïde de Bohr - Masse effective de densité d'état.

La théorie de Bohr de l'atome d'hydrogène peut être facilement modifiée pour tenir compte de la constante diélectrique du milieu et de la masse effective d'un électron dans le potentiel du cristal. L'énergie de liaison de l'hydrogène atomique est $[-m_0 e^4 / (2h^2)]$. Dans le semiconducteur nous remplaçons e^2 par (e^2/κ) et m_0 par la masse effective de densité d'états m^* .

Les surfaces d'énergie constante de la bande de conduction du CdAs₂ monovallée sont des ellipsoïdes de révolution orientées suivant k_z . Pour se ramener au cas d'une surface d'énergie sphérique il suffit d'effectuer un changement de variable. Ainsi la masse effective de densité d'états [21] s'écrit en fonction de m_t et m_l : $m^* = (m_t^2 m_l)^{1/3}$

L'énergie d'ionisation E_I devient :

$$E_I = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \kappa^2} \quad (\text{III-3-1})$$

où $m^* = 0,37 m_0$ et $\kappa = 18$.

Ce qui conduit à la valeur unique de l'énergie d'ionisation hydrogénoïde des donneurs : $E_I = 15,5 \text{ meV}$.

III-3-3 Méthode variationnelle.

L'énergie d'ionisation des donneurs peut être déterminée par la résolution de l'équation de Schrödinger appliquée à des fonctions d'ondes hydrogénoïdes avec des masses effectives anisotropes.

Plusieurs auteurs [22], [23], [24] ont mené un calcul analogue pour le Silicium et le Germanium dont les masses effectives longitudinales sont supérieures aux masses effectives transverses. Dans ce cas les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution allongées. Ces surfaces isoénergétiques sont par contre des ellipsoïdes aplatis dans CdAs_2 .

Dans ce paragraphe nous allons calculer l'énergie d'ionisation des donneurs du CdAs_2 par la méthode variationnelle. Les fonctions d'ondes considérées sont du type hydrogénoïde, soit :

$$\Psi(x,y,z) = \left[\frac{a b^2}{\pi r_0^3} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ - \frac{1}{r_0} \left[a^2 x^2 + b^2 (y^2 + z^2) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (\text{III-3-2})$$

où $r_0 = [(\kappa\hbar^2)/(me^2)]$ et a, b des paramètres à déterminer.

Cette fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger :

$$H \Psi = E \Psi \quad (\text{III-3-3})$$

$$\text{soit : } -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\alpha_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \Psi + V(r) \Psi = E \Psi \quad (\text{III-3-4})$$

$V(r)$ est le potentiel de Coulomb d'un électron dans le champ d'un atome donneur soit :

$$V(r) = -\frac{e^2}{\kappa r} \quad (\text{III-3-5})$$

où κ est la constante diélectrique, $m_1 = \alpha_1 m_0$ et $m_t = \alpha_2 m_0$.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, on multiplie l'équation (III-3-4) par l'expression conjuguée Ψ^* de Ψ et on intègre sur tout l'espace, d'où :

$$\int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = E \int_{\tau} \Psi^* \Psi d\tau \quad (\text{III-3-6})$$

Les fonctions d'ondes hydrogénoïdes étant normalisées, on a :

$$\int_{\tau} \Psi^* \Psi d\tau = 1 \quad (\text{III-3-7})$$

Après un calcul effectué en annexe, l'énergie E solution de l'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$E = \int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = -\left(\frac{me^4}{2\kappa^2\hbar^2}\right) \left\{ a \frac{\text{Log}\left|\frac{1+\rho}{1-\rho}\right|}{\rho} - \frac{a^2}{3\alpha_1} - \frac{2b^2}{3\alpha_2} \right\} \quad (\text{III-3-23})$$

avec: $\rho = [1 - (a^2/b^2)]^{1/2}$

$$\alpha_1 = 0,15$$

$$\alpha_2 = 0,58$$

Pour déterminer l'énergie d'ionisation des donneurs, on minimise E par rapport aux paramètres a et b . On doit avoir :

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0$$

La résolution de ces équations en annexe conduit à l'expression :

$$\frac{\alpha_2}{2\alpha_1} \left\{ \frac{2\rho - (1-\rho^2) \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|}{2\rho - \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|} \right\} + \frac{1}{(1-\rho^2)} = 0 \quad (\text{III-3-28})$$

La résolution de cette équation permet de déterminer les paramètres a et b. La solution est trouvée grâce à la représentation graphique de la fonction définie par l'expression (III-3-28). Le point d'intersection de cette courbe avec l'axe des abscisses (voir figure [III-7] ci-dessous) constitue la racine réelle positive recherchée.

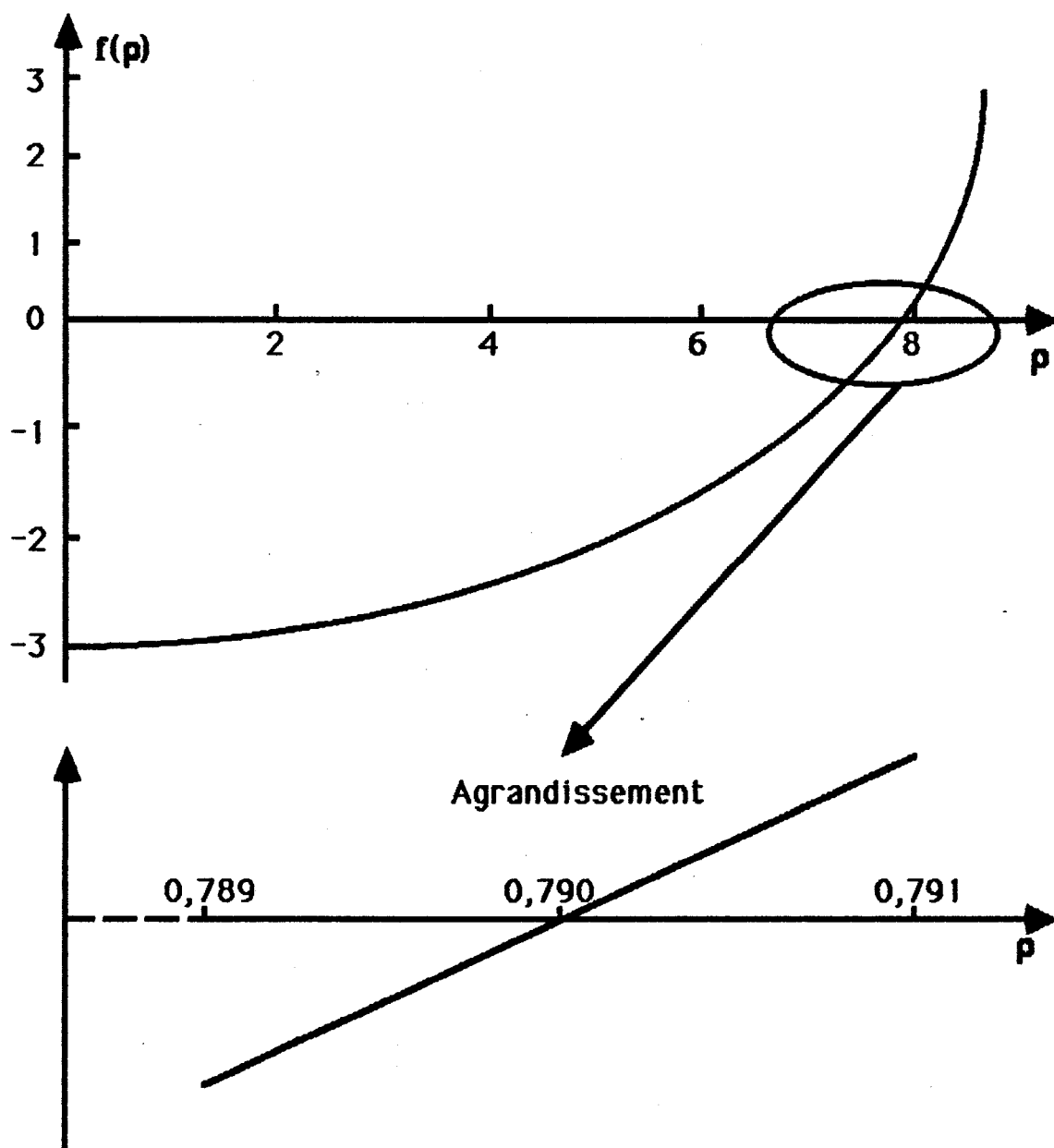


Figure [III-7]

La valeur de $\rho=0,79$ ainsi trouvée est ensuite remplacée dans les équations (III-3-25) et (III-3-27) pour obtenir enfin les paramètres recherchés suivants : $a = 0,256$; $b = 0,4189$

L'énergie d'ionisation des donneurs déduite de l'expression (III-3-26) est alors : $E_I = 14,6$ meV.

Cette énergie est sensiblement supérieure à celles déduites précédemment. Les auteurs ([22], [23] et [24]) ayant mené un calcul similaire dans le cas du Germanium et du Silicium ont trouvé des valeurs théoriques inférieures à celles mesurées avec des écarts de l'ordre de 25% à 30%.

Ces écarts seraient probablement dus aux approximations effectuées précédemment, notamment en considérant des fonctions d'ondes de type hydrogénoïdes.

III-3-4 Ajustement des courbes de conductivité.

Une autre méthode permettant la détermination de l'énergie d'activation, consiste à réaliser un ajustement non linéaire des courbes de conductivité par une expression prenant en compte les différents mécanismes de conduction possibles. Soit :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp\left(-\frac{\epsilon_1}{k_B T}\right) + \sigma_{03} \exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/n}\right] \quad (\text{III-3-29})$$

où: $n=1$ correspond au régime (ϵ_3) de conduction par saut au plus proche voisin.

$n=2$ correspond au régime de conduction par saut à distance variable associé aux interactions de Coulomb.

$n=4$ correspond au régime de conduction par saut a distance variable suivant une loi de Mott.

Ces trois cas ont été étudiés (Figure [III-8-a, b et c]), et l'on remarque que l'énergie d'ionisation ϵ_1 dépend peu du type de conduction par saut considéré. Nous avons regroupé dans le tableau (III-3), les différentes énergies calculées en fonction du coefficient n .

ECHANTILLON	$\epsilon_1(n=1)$ (meV)	$\epsilon_1(n=2)$ (meV)	$\epsilon_1(n=4)$ (meV)
S1	10,01	10,75	11,09
S4	7,63	8,15	8,47
S6	4,39	5,08	5,92
S52	12,42	13,05	13,4
S61	12,66	13,74	14,4

TABLEAU (III-3)

Echantillon	énergie déduite des courbes de résistivité. (meV)	énergie déduite de la formule de De Boer. (meV)	énergie déduite par la méthode variationnelle. (meV)	énergie déduite du modèle de l'atome de Bohr. (meV)
S1	8,9	8,1	14,6	15,5
S4	7,5	NON CALCULABLE		
S6	6,1			
S52	11,2	9,0		
S61	12,4	9,0		

TABLEAU (III-4)

Nous constatons effectivement que pour $n=1, 2$ ou 3 , l'énergie ϵ_1 varie peu. Ceci est du au fait que la conductivité du CdAs_2 à haute température, varie sur plusieurs ordres de grandeur. Dans ce cas le processus de conduction dominant est celui associé à l'ionisation des donneurs, d'où la faible influence du second terme décrivant la conduction par saut.

En conclusion des calculs effectués dans ce paragraphe, on constate qu'il existe plusieurs méthodes permettant la détermination des énergies d'ionisation des donneurs. On notera cependant que les valeurs calculées dans le cas d'un modèle hydrogénoïde sont indépendantes de la concentration et sensiblement supérieures aux valeurs déduites de l'expérience. L'ensemble de ces résultats est résumé dans le tableau (III-4).

III-4 Détermination de l'énergie d'activation ϵ_3 dans un régime de conduction par saut au plus proche voisin.

Les mesures de résistivité (Figure [III-2]) montrent clairement l'existence d'un second processus de saut à basse température. Le caractère linéaire de cette dépendance serait associé à une conduction par saut au plus proche voisin, dont la théorie a été initialement développé par Miller et Abrahams [25].

Une première analyse des courbes de résistivité (Figure [III-8-a]) montre que cette énergie d'activation décroît lorsque la concentration de donneurs augmente et la conductivité totale peut s'écrire sous la forme d'une somme de deux termes :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp \left(- \frac{\epsilon_1}{k_B T} \right) + \sigma_{03} \exp \left(- \frac{\epsilon_3}{k_B T} \right) \quad (\text{III} - 4 - 1)$$

Le premier terme correspond à l'excitation des électrons dans la bande de conduction. Le second associé à la conduction par saut au plus proche voisin dans la bande d'impuretés possède une énergie d'activation plus faible ($\epsilon_3 < \epsilon_1$).

Durant le processus de saut, l'électron émet ou absorbe des phonons. Il en résulte une variation exponentielle de la conductivité avec la température.

Lorsque la concentration en impuretés augmente, l'énergie ϵ_3 varie. Ce phénomène est associé à la croissance du potentiel aléatoire de Coulomb crée par les impuretés chargées. Il en résulte un recouvrement des fonctions

d'ondes plus important lorsque la concentration en impuretés augmente, d'où une diminution de l'énergie de saut ϵ_3 .

Un effet imporant à prendre en compte, est la dépendance du facteur préexponentiel ρ_{03} (obtenu par extrapolation à $1/T=0$), avec la concentration. Selon Shklovskii [9] cette variation étant très importante, ρ_3 se met sous la forme:

$$\rho_3 = \rho_{03} \exp [f (N_D)] \quad (III - 4 - 2)$$

avec N_D la concentration de donneurs.

L'interprétation de cette dépendance est associée au fait que la probabilité de saut entre deux impuretés est liée au recouvrement des fonctions d'ondes.

Lorsque la distance inter-impuretés est largement supérieure au rayon de Bohr, la fonction d'onde et l'intégrale de recouvrement décroissent exponentiellement. En conclusion la diminution de la concentration a pour conséquence une augmentation de la probabilité de saut, associée à une décroissance rapide de la conductivité.

Nous allons développer dans le paragraphe suivant le premier modèle théorique permettant l'interprétation de ce phénomène. Il a été proposé par Miller et Abrahams [25] en 1960.

III-4-1 Modèle de Miller et Abrahams.

Le principe de calcul est le suivant.

- _ On considère la fonction d'onde des électrons localisés sur des donneurs.
- _ On calcule la probabilité de saut de l'électron du site i au site j . Cette transition s'accompagne de l'absorption ou de l'émission d'un phonon.
- _ On détermine le nombre de transitions $i \rightarrow j$ par unité de temps.

En l'absence de champ électrique un nombre égal de transitions directes et inverses se produit. Lorsqu'un champ électrique faible est appliqué, les transitions directes et inverses ne s'équilibrent plus. Il en résulte la création

d'un courant proportionnel au champ. L'évaluation de ce courant permet de mettre en évidence une résistance R_{ij} de la transition.

Le problème se résume alors au calcul de la conductivité électrique d'un réseau de résistances aléatoires.

a) - Détermination de la probabilité de transition.

On considère 2 sites i et j d'énergies respectives E_i et E_j , séparés d'une distance $r_{ij} = |r_i - r_j|$. ϕ_i , ϕ_j sont les fonctions d'ondes hydrogénoïdes des centres i et j considérés séparément.

La fonction d'onde d'un électron sur le site i et j s'écrit :

$$\Psi_i = a_i \phi_i + a_j \phi_j \quad (\text{III - 4 - 3})$$

Cette combinaison linéaire de Ψ_i est réalisée par un calcul variationnel avec l'hamiltonien suivant :

$$H = T + V_a - \frac{e^2}{\kappa r_i} - \frac{e^2}{\kappa r_j} \quad (\text{III - 4 - 4})$$

où : T est l'opérateur énergie cinétique.

V_a est le potentiel du aux accepteurs ionisés.

L'énergie de résonance entre ces deux sites est donnée par:

$$I_{ij} = L - S J \quad \text{où} \quad L = - \left\langle \phi_i \left| \frac{e^2}{\kappa r_i} \right| \phi_j \right\rangle$$

$$J = - \left\langle \phi_i \left| \frac{e^2}{\kappa r_j} \right| \phi_i \right\rangle$$

$$S = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \quad (\text{III-4-5})$$

Dans le cas hydrogénoïde l'intégrale de résonance s'exprime par :

$$I_{ij} = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\kappa a} \right) \left(\frac{r_{ij}}{a} \right) \exp \left(- \frac{r_{ij}}{a} \right) \quad (\text{III - 4 - 6})$$

On pose : $\Delta = E_i - E_j$.

Par suite du faible recouvrement des fonctions d'ondes, l'énergie de résonance I_{ij} est faible devant Δ , et la transition d'un électron s'accompagne de l'émission ou de l'absorption d'un phonon.

Dans l'approximation du potentiel de déformation, la probabilité de transition s'écrit dans le cas où un phonon de vecteur d'onde q est absorbé ($\Delta < 0$) :

$$U_{ij} = \left[\frac{E_1^2}{\pi d s^5 \hbar^4} \right] I_{ij}^2 |\Delta| n_q \quad (\text{III-4-7})$$

soit : $U_{ij} = A n_q$

- avec :
- n_q : le nombre de phonon de vecteur d'onde q .
 - E_1 : le potentiel de déformation.
 - d : la densité du cristal.
 - s : la vitesse du son.
 - I_{ij} : l'énergie de résonance.

Lorsque $\Delta > 0$, un phonon est émis et la probabilité de transition par unité de temps s'écrit :

$$U_{ij} = A (n_q + 1) \quad (\text{III-4-8})$$

En se limitant au développement du premier ordre, dans le cas de fonctions d'ondes hydrogénoïdes [26], la probabilité de transition par unité de temps s'écrit

$$U_{ij} = \begin{cases} v_0 \exp\left(-\frac{2 r_{ij}}{a}\right) n_q \\ v_0 \exp\left(-\frac{2 r_{ij}}{a}\right) (n_q + 1) \end{cases} \quad (\text{III-4-9})$$

$$\text{où } v_0 = \left(\frac{E_1^2}{\pi d s^5 \hbar^4} \right) \left(\frac{2 e^2}{3 \kappa a} \right) \left(\frac{r_{ij}}{a} \right)^2 \quad (\text{III-4-10})$$

$$\text{et } n_q = \left[\exp\left(\frac{\Delta}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (\text{III-4-11})$$

A basses températures lorsque $\Delta \gg k_B T$, la probabilité de transition s'écrit alors

$$U_{ij} = \begin{cases} v_0 \exp \left(-\frac{2 r_{ij}}{a} - \frac{\Delta}{k_B T} \right) & \text{si } \Delta > 0 \\ v_0 \exp \left(-\frac{2 r_{ij}}{a} \right) & \text{si } \Delta < 0 \end{cases} \quad (\text{III - 4 - 12})$$

b) Détermination du flux moyen.

Le nombre d'électrons effectuant cette transition par unité de temps est donné par :

$$\Gamma_{ij} = \langle U_{ij} n_i (1 - n_j) \rangle \quad (\text{III - 4 - 12})$$

où n_i et n_j sont les nombres d'occupation, et les crochets représentent la valeur moyenne au cours du temps.

On considère l'approximation où les nombres d'occupation des différents sites, à l'équilibre thermique, sont statistiquement indépendants. Dans le cas où les énergies E_i et E_j sont très grandes devant $k_B T$, le flux moyen de charges entre les deux sites i et j s'écrit alors :

$$\Gamma_{ij} = v_0 \exp \left(-\frac{2 r_{ij}}{a} \right) \exp \left(-\frac{|E_i| + |E_j| + |E_i - E_j|}{2 k_B T} \right) \quad (\text{III - 4 - 13})$$

En présence d'un champ électrique externe \vec{E} , le flux moyen de charges entre les sites i et j est donné par :

$$\Gamma_{ij}(\vec{E}) - \Gamma_{ji}(\vec{E}) = \Gamma_{ij}^0 \left\{ \frac{e \vec{E} \vec{r}_{ij} + \Delta\mu_i - \Delta\mu_j}{k_B T} \right\} \quad (\text{III - 4 - 14})$$

$$\text{où } \frac{\Delta\mu_i}{k_B T} \approx \frac{\Delta n_i}{n_i^0} \text{ et } \frac{\Delta\mu_j}{k_B T} \approx \frac{\Delta n_j}{n_j^0}$$

Δn_i et Δn_j sont les variations des nombres d'occupation dues au champ électrique \vec{E} . Le courant qui s'établit entre les sites i et j a pour intensité moyenne :

$$I_{ij} = \Gamma_{ij}^0 \frac{e}{k_B T} \left\{ e \vec{E} \vec{r}_{ij} + \Delta \mu_i - \Delta \mu_j \right\} \quad (\text{III - 4 - 15})$$

$$\text{soit} \quad I_{ij} = \Gamma_{ij}^0 \frac{e}{k_B T} V_{ij} = G_{ij} V_{ij} \quad (\text{III - 4 - 16})$$

$$\text{où} \quad G_{ij} = \frac{e^2}{k_B T} \Gamma_{ij}(R_{ij}, E_i, E_j)$$

G_{ij} représente la conductance entre les sites i et j .

Ce résultat permet en fait de considérer le système comme un réseau dont les nœuds répartis de façon aléatoire constituent des sites pièges reliés les uns aux autres par les conductances G_{ij} .

De manière générale tout site du réseau sera relié à ses proches voisins par une grande conductance et les liaisons les plus "solides" apparaissent pour les paires de sites au voisinage du niveau de Fermi.

c) Expression de la conductivité de Miller et Abrahams.

La méthode utilisée consiste à décomposer le réseau d'impédances aléatoires en chaînes pointant dans la direction du champ électrique appliqué.

Ces chaînes sont constituées par les plus petites résistances. Elles sont traitées comme un ensemble de résistances parallèles de même valeur, étant donné le grand nombre d'éléments nécessaires pour constituer une chaîne.

Dans le cas d'un semiconducteur de type n , faiblement compensé, la distance moyenne entre les donneurs est donnée par :

$$r_D = \left(\frac{3}{4 \pi N_D} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{III - 4 - 17})$$

et la résistivité calculée par Miller et Abrahams [25] s'écrit :

$$\rho(T) = c(T) \left(\frac{r_d}{a} \right) \left[1 + 18,2 \left(\frac{a}{r_d} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \exp \left[1,09 \left(\frac{r_d}{a} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{(\epsilon_3 - \epsilon_e)}{k_B T} \right] \quad (\text{III-4-18})$$

$$\text{où } c(T) = 4,55 \cdot 10^2 i_e(T) \left(\frac{\alpha}{8} \right)^{\frac{1}{2}} K^2 v \rho_0 s^5 h^4 \frac{a^3}{e^6 E_1^2} (\Omega \text{cm}) \quad (\text{III-4-19})$$

Les paramètres i_e et ϵ_e sont des facteurs tenant compte des états excités, et v représente le nombre de minimums de la bande de conduction.

La conductivité s'écrit alors sous une forme plus simple :

$$\sigma(T) = \sigma_0(N_D) \exp \left(- \frac{\epsilon_3}{k_B T} \right) \quad (\text{III-4-20})$$

et l'expression de l'énergie d'activation ϵ_3 est donnée par :

$$\epsilon_3 = 1,6 \frac{e^2 N_D^{\frac{1}{3}}}{\kappa} \left(1 - 1,35 K^{\frac{1}{3}} \right) \quad (\text{III-4-21})$$

III-4-2 Résultats et discussion.

Pour confronter ce résultat à nos mesures, nous avons représenté la variation de ϵ_3 déduite des courbes de résistivité, avec la concentration de donneurs [20] (Figure III-9) (voir publication en annexe), et ce dans le cas où la compensation $K=0$ ou $0,2$. Le désaccord entre ce modèle et l'expérience est très net.

Ce désaccord a déjà été observé dans le cas du Germanium[27], du GaAs[28], et du CdMnSe[29]. En effet au lieu d'observer une variation monotone, l'énergie ϵ_3 tend à diminuer au delà d'une certaine valeur N'_D .

Shklovskii [30] a proposé une autre expression de l'énergie ϵ_3 dans le cas où la compensation est très faible ($K \ll 1$).

$$\epsilon_3 = 0,99 \frac{e^2 N_D^{\frac{1}{3}}}{\kappa} \left(1 - 0,3 K^{\frac{1}{4}} \right) \quad (\text{III-4-22})$$

Pour des concentrations inférieures à une concentration critique N'_D , cette expression théorique de ϵ_3 est en meilleur accord avec l'expérience, dans

le cas du Germanium [31]. Néanmoins cette expression (III-4-22) ne peut s'appliquer lorsque la valeur de N_D augmente.

La comparaison de nos mesures avec l'expression (III-4-22) a été réalisée pour deux valeurs de la compensation $K=0$ et $0,2$. Il en résulte le même désaccord qu'avec le modèle de Miller et Abrahams.

Ce phénomène est interprété [30] en considérant que pour de faibles valeurs de la compensation, les niveaux donneurs sont peu perturbés et leurs énergies sont voisines. Le recouvrement des fonctions d'ondes provoque la création d'une bande d'impuretés de largeur Ω qui croît exponentiellement avec N_D .

Les états du haut de la bande de d'impuretés, dominants dans la conduction, sont caractérisés par une mobilité élevée. Lorsque N_D augmente, la largeur Ω augmente également. Ceci conduit à une diminution de l'énergie ϵ_3 (Figure [III-10] ci-dessous).

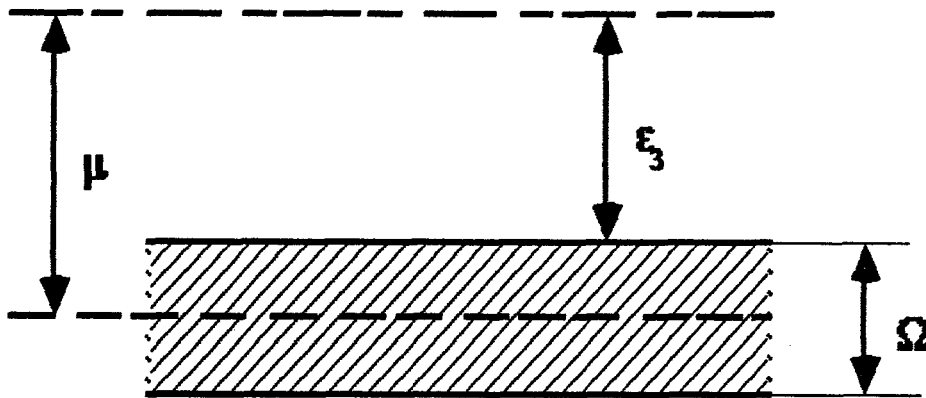


Figure [III-10]

De plus, étant donné le net désaccord entre la théorie et l'expérience, une des raisons possibles pourrait dépendre du type de mécanisme de conduction considéré. En effet cette différence très nette suggérerait, dans notre cas, un processus de conduction par saut à distance variable plutôt qu'une conduction par saut au plus proche voisin. Ce problème sera abordé plus en détail au chapitre suivant.

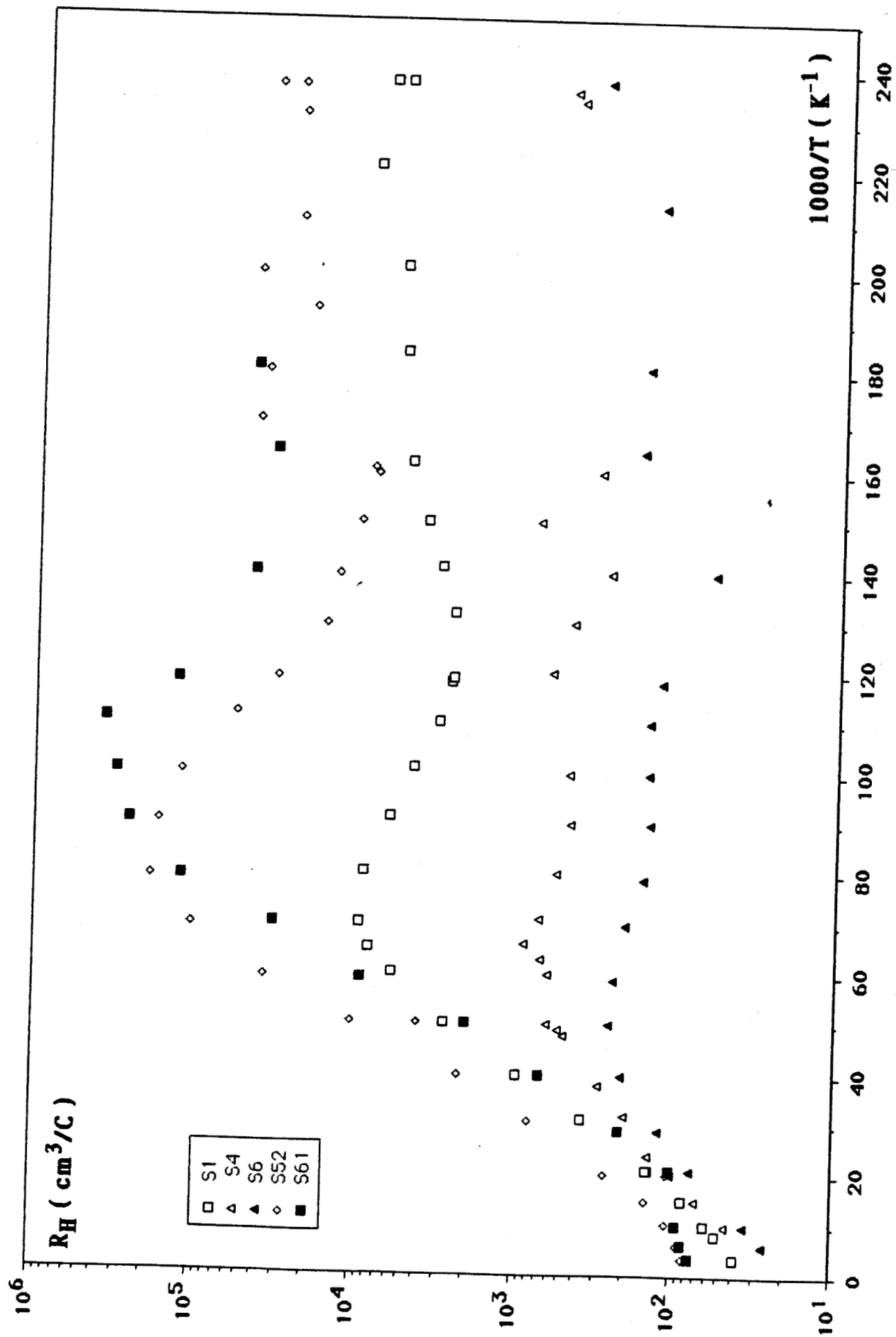


FIGURE [III-1] : Variation de la constante de Hall en fonction de l'inverse de la température.

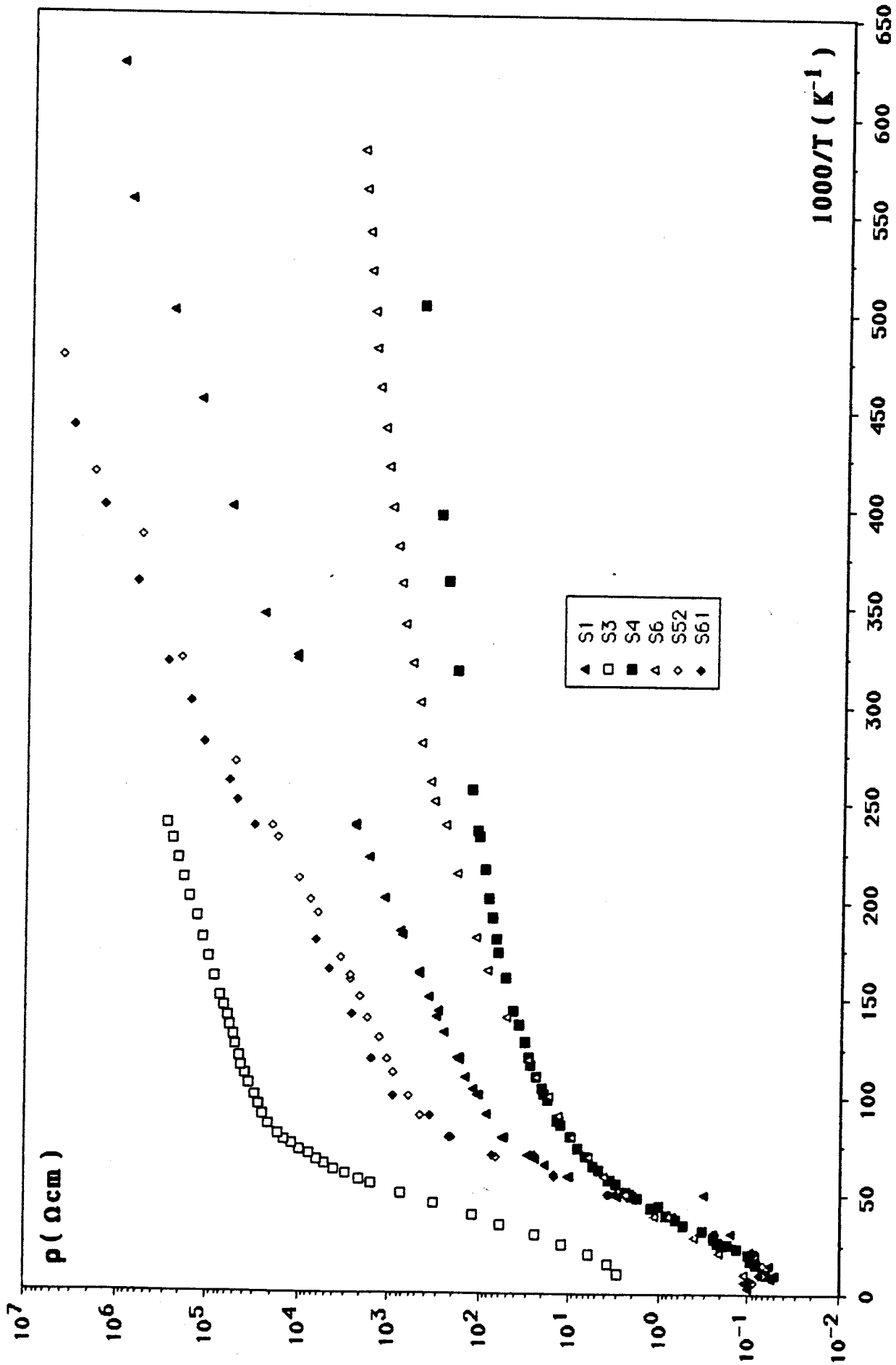


FIGURE [III-2] : Variation de la résistivité en fonction de l'inverse de la température.

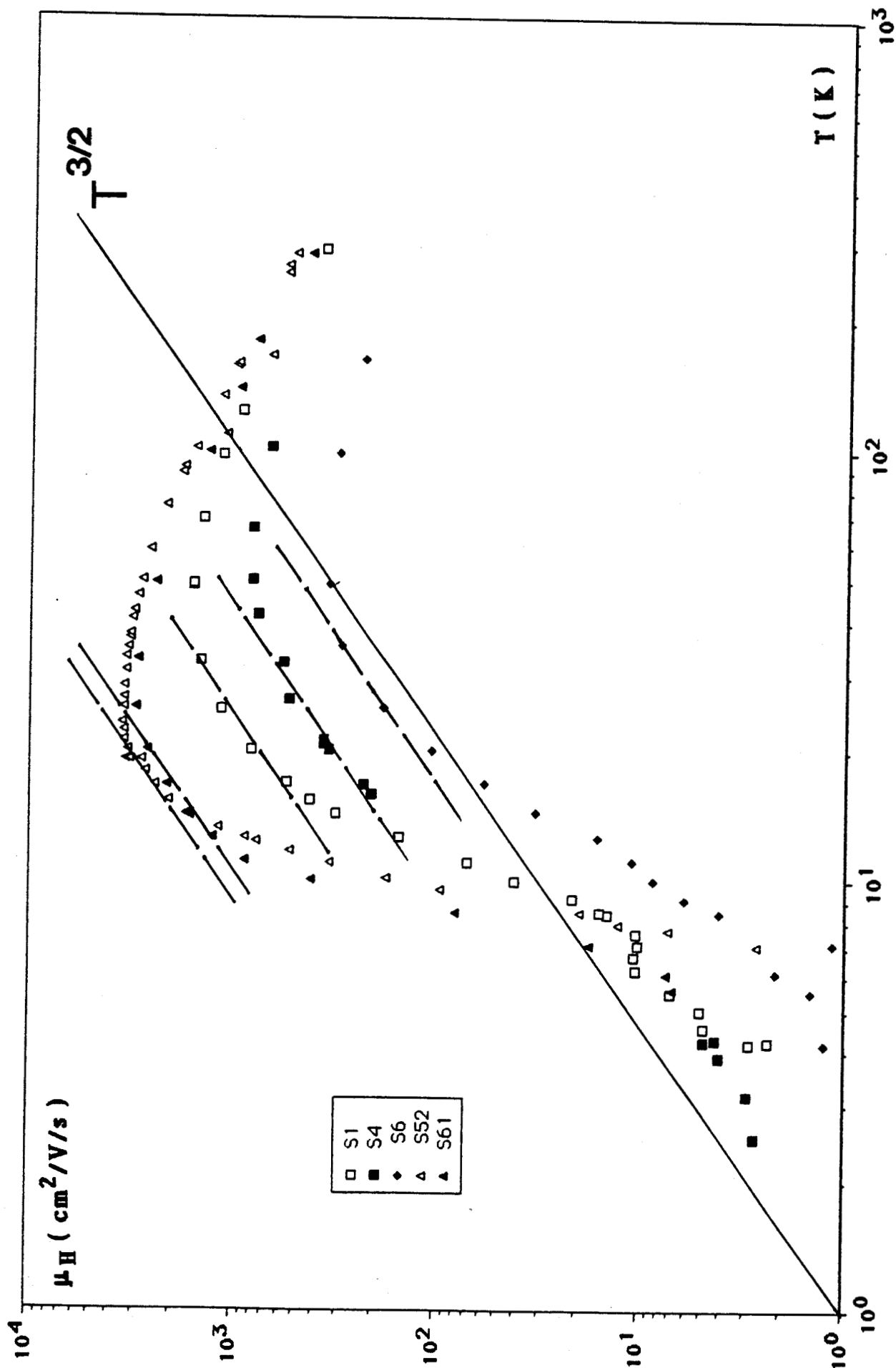


FIGURE [III-3] : Variation de la mobilité en fonction de la température.

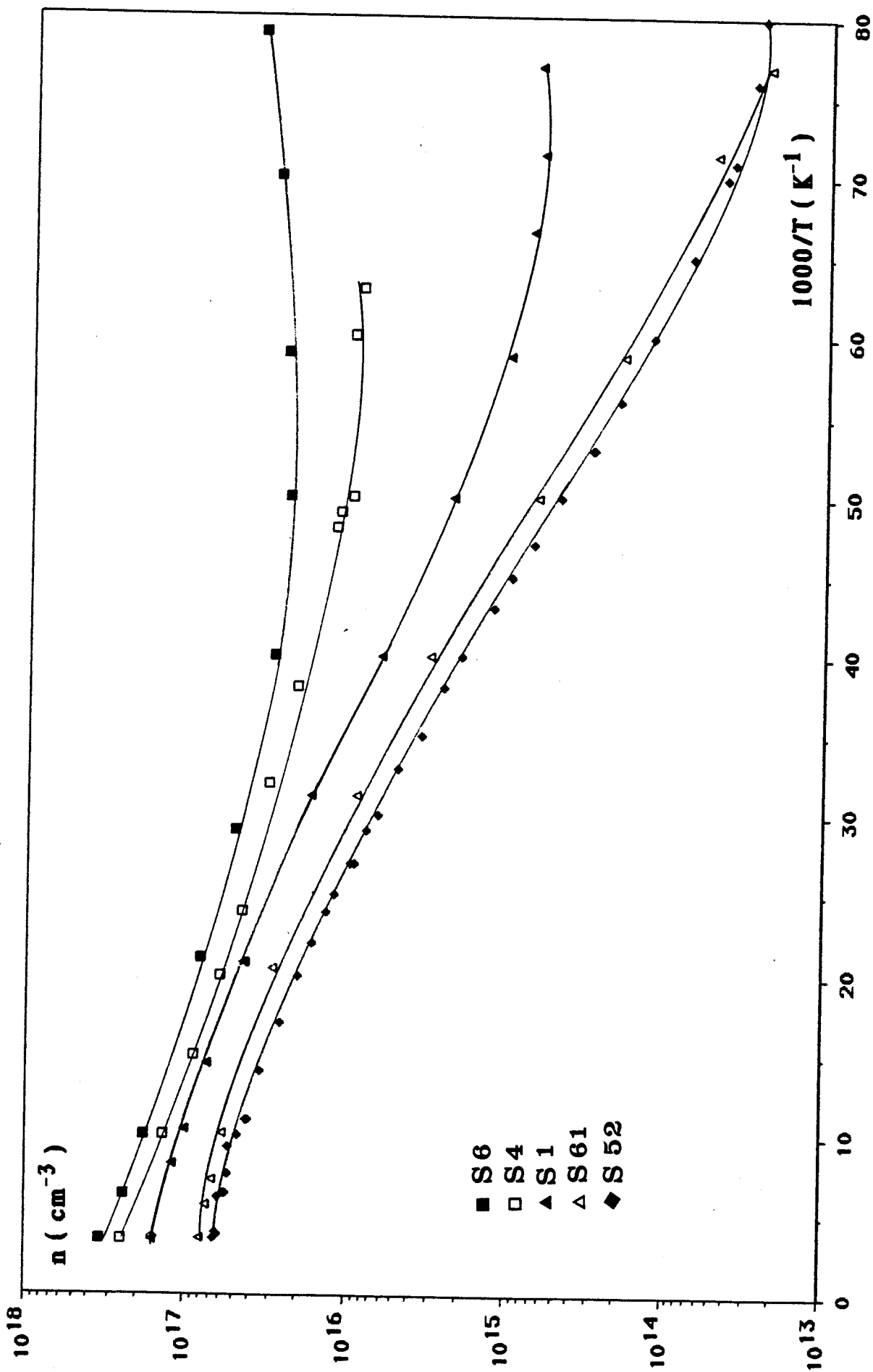


FIGURE [III-4] : Variation de la concentration en fonction de l'inverse de la température.

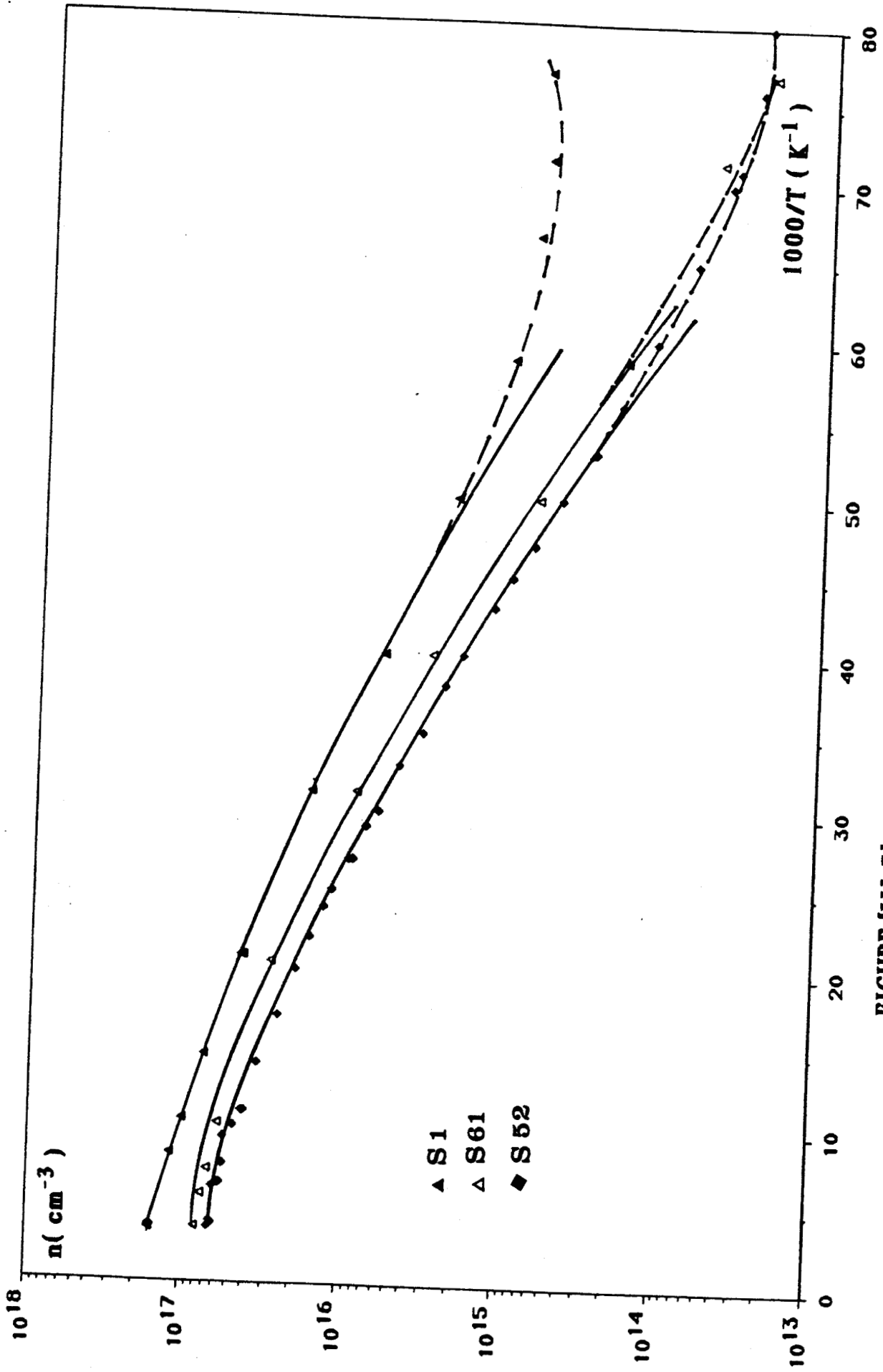


FIGURE [III-5] : Ajustement de la concentration à l'aide de la formule de De Boer.

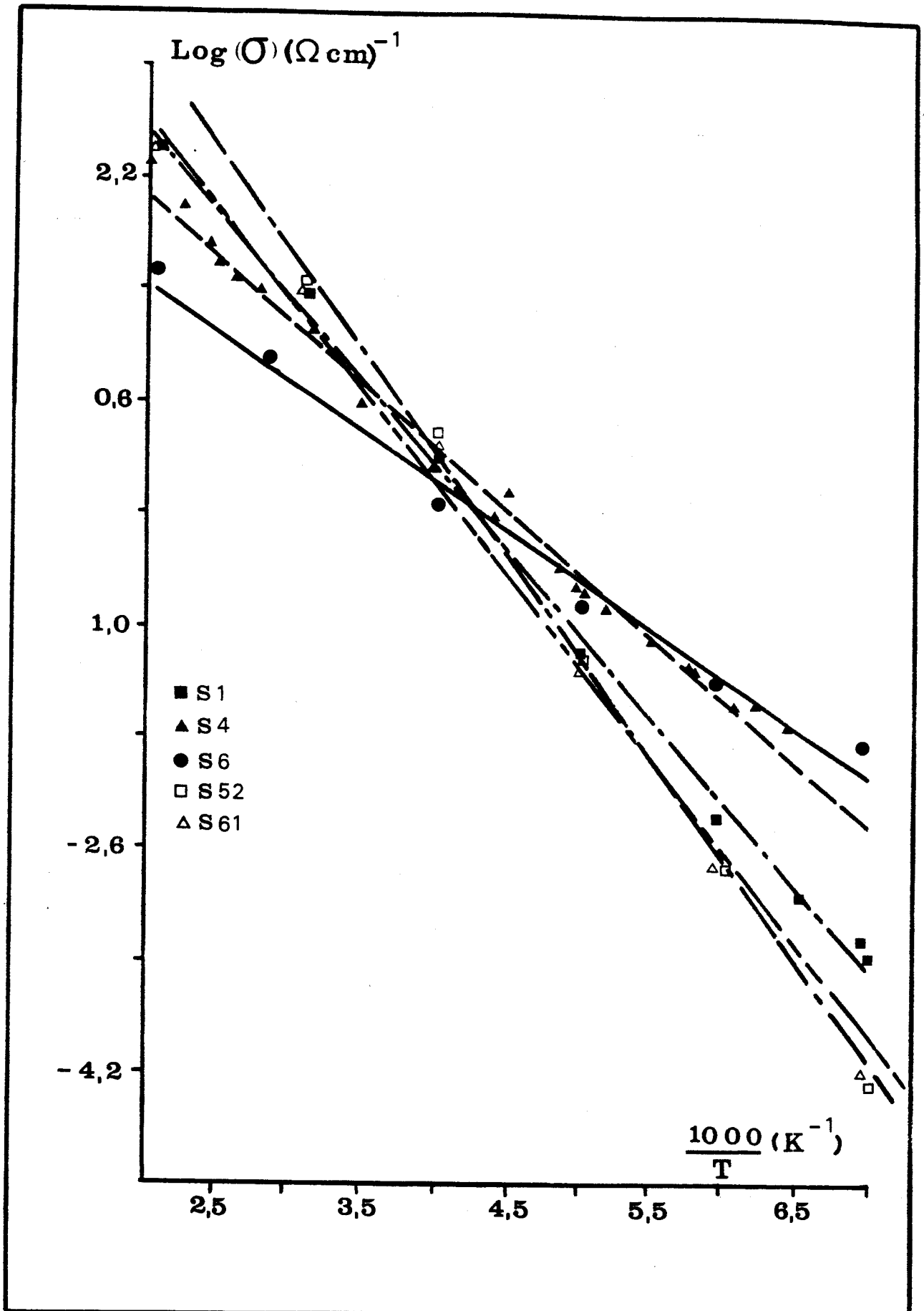


FIGURE [III-6] : Variation du logarithme de la conductivité à haute température et ajustement selon une loi :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp(-\epsilon_1/k_B T).$$

■ S4
 ● S6
 ▽ S1
 □ S52
 ○ S61

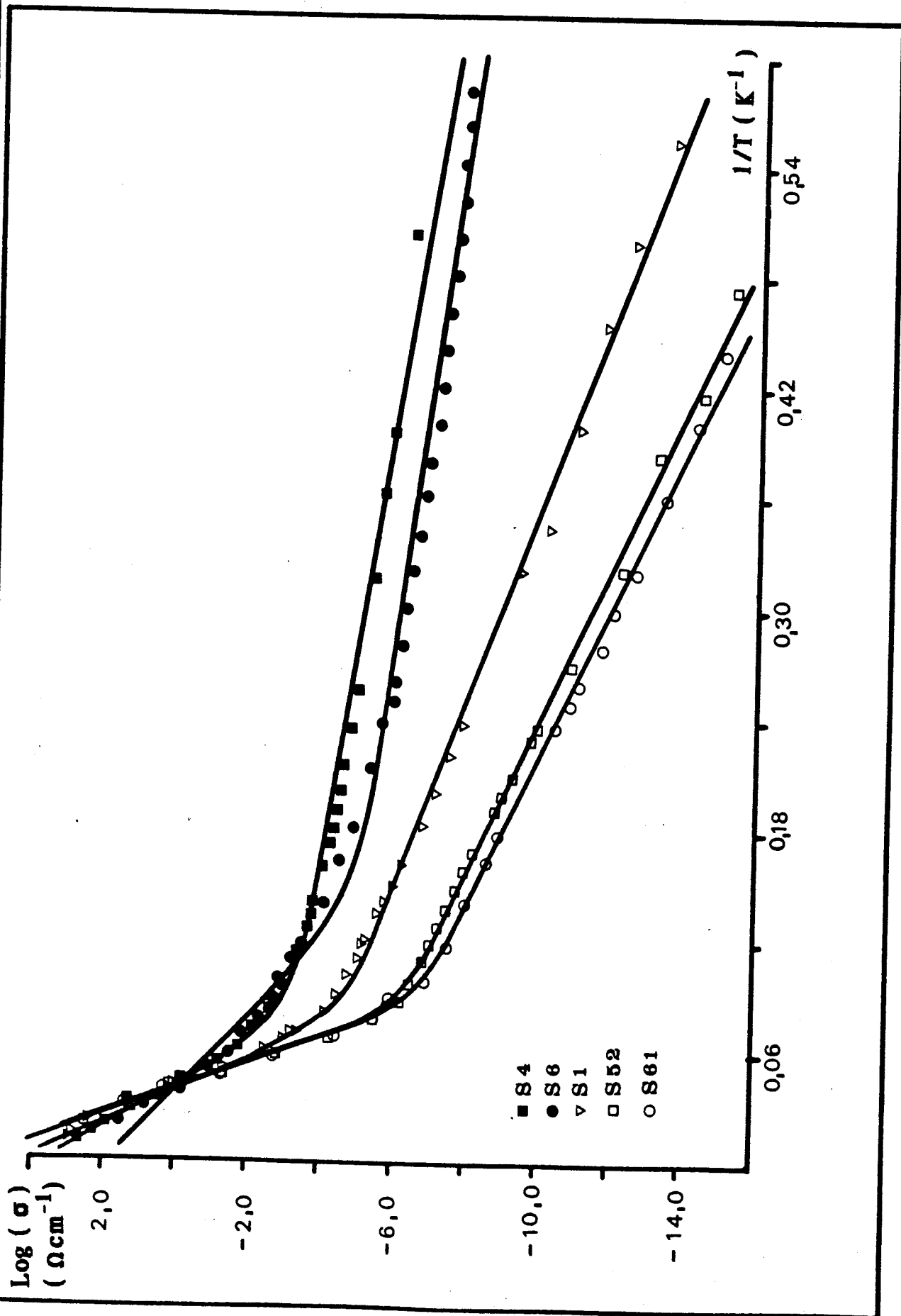


FIGURE [III-8-a] : Variation du logarithme de la conductivité et ajustement selon une loi :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp(-\epsilon_1/k_B T) + \sigma_{03} \exp(-\epsilon_3/k_B T)$$

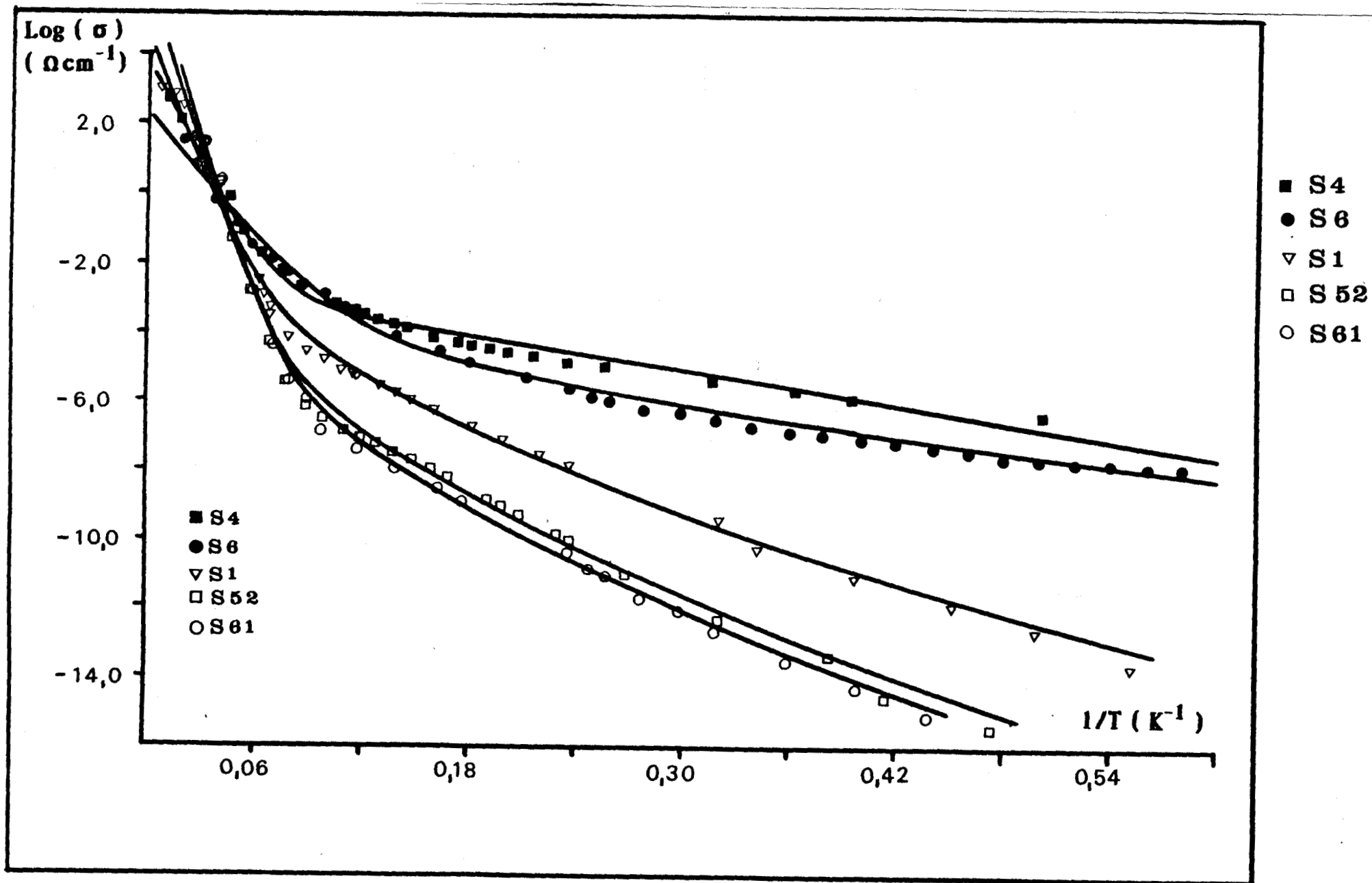


FIGURE [III-8-b] : Variation du logarithme de la conductivité et ajustement selon une loi :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp(-\epsilon_1/k_B T) + \sigma_{03} \exp(-(T_0/T)^{1/2})$$

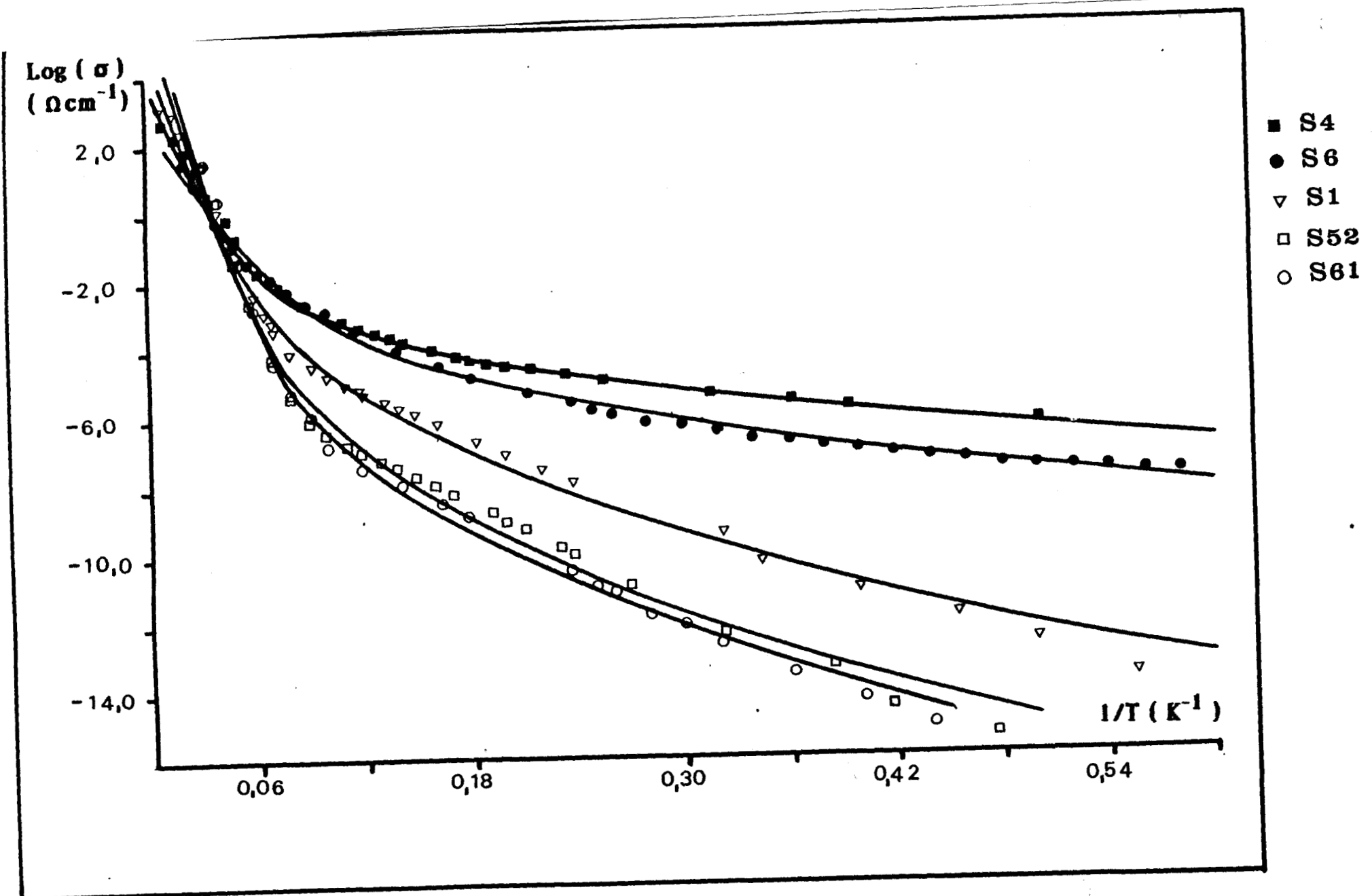


FIGURE [III-8-c] : Variation du logarithme de la conductivité et ajustement selon une loi :

$$\sigma = \sigma_{01} \exp(-\epsilon_1/k_B T) + \sigma_{03} \exp(-(T_0/T)^{1/4})$$

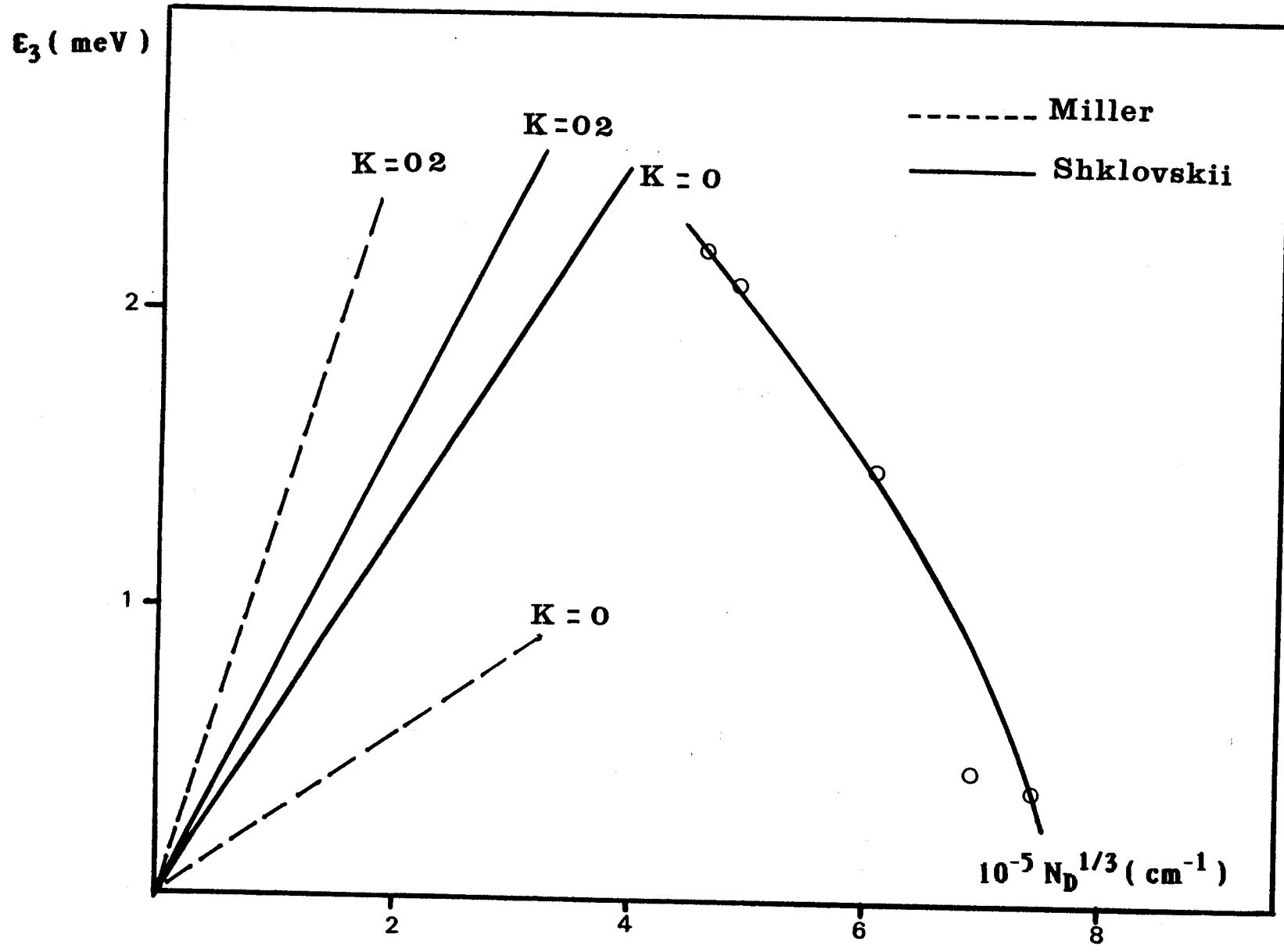


FIGURE [III-9] : Variation de l'énergie d'activation E_3 en fonction de la concentration des donneurs.

CHAPITRE IV
ETUDE DE LA
MAGNETORESISTANCE
NEGATIVE

L'étude de la magnétorésistance négative, du côté métallique de la transition métal-isolant, a fait l'objet de plusieurs travaux. Il existe jusqu'à présent plusieurs théories permettant son interprétation.

L'observation de ce phénomène du côté isolant de la transition, a permis de mettre au point différents modèles. Néanmoins très peu d'entre eux rendent vraiment compte de l'expérience. Les meilleurs résultats ont été initialement obtenus grâce à des formules empiriques.

L'objet de ce chapitre sera d'exposer tous ces modèles et de les comparer à nos résultats expérimentaux. On notera également que l'étude de la magnétorésistance négative ne peut être envisagée sans prendre en considération la composante positive de la magnétorésistance totale.

En effet les mesures effectuées au laboratoire nous ont permis d'observer une magnétorésistance totale (Figure [IV-1-a, b et c]) des échantillons S1, S52 et S61. Celle-ci est en fait constituée par la superposition de deux composantes. L'une positive dont nous allons exposer brièvement l'origine et en donner l'expression. La seconde négative sera analysée avec plus de détails dans ce chapitre.

IV-1 Magnétorésistance positive dans le régime de conduction par saut.

Une des premières caractéristiques des mécanismes de conduction par saut fut l'observation d'une magnétorésistance positive croissant exponentiellement avec le champ magnétique, dans le cas de l'InSb [32], de l'InP [33], du GaAs [34] et du Ge [35]. Cette dépendance exponentielle de la résistivité est également fonction de l'intensité du champ magnétique extérieur appliqué.

Les expressions donnant la variation de de la résistivité en fonction du champ magnétique [36], [37], [38] ont été déterminées grâce à la théorie des percolations. Elles s'écrivent :

1) Cas des champs faibles ($\lambda \gg \xi$):

$$\rho_3(B) = \rho_3(0) \exp \left(t \frac{a_H e^2}{N_D c^2 h^2} B^2 \right) \quad (\text{IV-1-1})$$

où : $t = 0,036$ (ξ est la longueur de localisation)

2) Cas des champs forts ($\lambda \ll \xi$):

$$\rho_3(B) = \rho_3(0) \exp \left[q \left(\lambda^2 a_H N_D \right)^{-1/2} \right] \quad (\text{IV-1-2})$$

où : $q = 0,92$

Plusieurs auteurs ont comparé ce modèle avec l'expérience. Les valeurs des paramètres t et q ainsi trouvés sont regroupées dans le tableau (IV-1) ci-dessous.

AUTEURS	t	q
Emelyanenko (InP) [39]	0,04 - 0,06	
Kahlert et al (GaAs) [40]	0,03 - 0,06	0,68
Chroboczek (n Ge) [41]	0,048	
Shklovskii [9]	0,036	0,92
Biskupski (InP) [15]	0,048 - 0,066	0,746 - 0,914
Movaghar [42]	0,034	0,93

TABLEAU (IV-1)

Les résultats ainsi obtenus par expérience sont en bon accord avec les modèles théoriques de percolation [9] et celui basé sur des méthodes analytiques [42]. L'analyse des figures [IV-1-a, b et c] montre que la magnétorésistance positive, à haute température, est proportionnelle au carré du champ magnétique B^2 , comme dans le cas des électrons libres.

A plus basse température la magnétorésistance est négative à champs faibles. Celle-ci passe par un minimum pour ensuite croître et devenir positive lorsque le champ magnétique augmente.

Etant donné les faibles valeurs (1,5 Tesla) atteintes par le champ magnétique, la composante positive de la magnétorésistance considérée est celle déduite de l'expression (IV-1-2) pour les champs faibles. Elle s'écrit sous la forme simple suivante :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^+ = \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-1-3})$$

Dans la suite de ce travail, nous allons tenir compte de cette expression pour l'interprétation de la magnétorésistance négative dans un régime de conduction par saut. Les valeurs numériques du coefficient exponentiel donné par : $\beta = (t a_H e^2)/(N_D c^2 h^2)$, seront calculées pour chaque modèle.

Cette expression de la magnétorésistance positive interviendra chaque fois que la conductivité sera donnée par une loi du type :

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left[-\left|\frac{T_0}{T}\right|^{\frac{1}{n}}\right] \quad (\text{IV-1-4})$$

avec: n=2 ou 4 dans le cas d'une conduction par saut à distance variable.
 n=1 dans un régime de conduction par saut au plus proche voisin.

IV-2 Magnétorésistance négative.

IV-2-1 Modèle empirique de la magnétorésistance négative.

L'observation d'une magnétorésistance négative du côté isolant de la transition métal-isolant a suscité l'intérêt de plusieurs chercheurs. Ce phénomène souvent observé dans un régime de conduction métallique a fait l'objet de plusieurs travaux, d'où l'existence de différents modèles permettant son interprétation de ce côté de la transition.

Khosla et al [43] ayant observé ce phénomène du côté isolant sur des échantillons de CdS ont analysé cette magnétorésistance à l'aide d'une expression empirique. La magnétorésistance totale s'écrit dans ce cas :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^- + \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^+ \quad (\text{IV-2-1})$$

$$\text{avec} \quad \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^- = -aB^b \text{ et } \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^+ = cB^2 \quad (\text{IV-2-2})$$

où a, b et c sont des coefficients positifs. Le premier terme de l'expression (IV-2-2) correspond à la composante négative, et le second à la composante positive de la magnétorésistance totale.

L'ajustement des courbes expérimentales avec cette expression montre qu'il y a un très bon accord. L'exposant b proche de 0,5 suggère une variation en $B^{1/2}$ à champs faibles. Les coefficients a et c dépendent eux de la température et de la concentration. L'ensemble des valeurs calculées pour l'échantillon S1 sont regroupées dans le tableau (IV-2) ci-dessous.

T (K)	a (T ^{-b})	b	c (T ⁻²)
1,6	0,0981	0,690	0,0464
1,8	0,0948	0,707	0,0464
2,2	0,0768	0,645	0,0240
3,1	0,0610	0,627	0,0118
4,2	0,0534	0,696	0,0113
5,44	0,0397	0,599	0,0031
6,14	0,0412	0,729	0,0098
6,95	0,0349	0,723	0,0076
8,33	0,0278	0,697	0,0048
9,93	0,0246	0,735	0,0057

TABLEAU (IV-2)

Malgré le bon accord entre ce modèle et l'expérience, il n'existe pas d'interprétation physique associée à l'expression empirique de la composante négative de la magnétorésistance.

Les résultats obtenus montrent que le coefficient c de la composante positive de la magnétorésistance est très faible devant 1 ($c \ll 1$), d'où l'approximation :

$$cB^2 \approx \exp(cB^2) - 1 \text{ si } c \ll 1$$

Cette expression est en fait analogue à celle donnée par (IV-1-1). Nous avons donc calculé pour chaque échantillon le coefficient t dans l'expression (IV-1-1) à partir des valeurs de c trouvées avec $a_H \approx 26 \text{ \AA}$. Les résultats sont résumés dans le tableau (IV-3) ci-dessous.

ECHANTILLON	t
S1	0,098 - 1,39
S52	0,071 - 0,33
S61	0,017 - 0,32

TABLEAU (IV-3)

On constate que le paramètre t varie pour chaque échantillon et sa valeur minimale est proche de celles prévues par la théorie [9] des percolations

L'un des premiers modèles s'appuyant sur des considérations physiques et permettant l'interprétation de la magnétorésistance négative a été mis au point par Toyozawa [44]. Cet auteur suggère l'existence de moments magnétiques localisés qui seraient responsables de l'apparition d'une M.R.N. L'étude de ce modèle fera l'objet du paragraphe suivant.

IV-2-2 Modèle des moments magnétiques de Toyozawa.

L'interprétation de la magnétorésistance négative du CdAs_2 de type n à l'aide du modèle de Toyozawa a fait l'objet d'une publication [45] (voir annexe).

L'échantillon étudié (S1) possède une concentration de $1,6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Les mesures de magnétorésistance ont été effectuées à des températures

comprises entre 11 K et 1,6 K, et des champs magnétiques atteignant 1,5 Tesla.

Nous avons interprété nos résultats en utilisant la théorie de Toyozawa [44] selon laquelle un processus de diffusion supplémentaire par des moments magnétiques localisés doit être pris en compte. Nous nous sommes limités à l'étude de la magnéto-résistance transverse (MRT) dont le comportement est analogue à celui de la magnéto-résistance longitudinale.

La MRT ainsi traitée aurait le comportement d'un système de spins para-magnétiques. Nous allons montrer que la variation de la magnéto-résistance négative (MRN) avec le champ magnétique est décrite par une fonction de Langevin de moment magnétique effectif $\mu^* = 8\mu_B$; où μ_B est le magnéton de Bohr.

Une analyse de ce comportement, à l'aide de ce modèle, a été réalisée par différents auteurs [44], [46], [47], [48] sur des semiconducteurs métalliques et isolants. Selon Toyozawa [44] les électrons de conduction sont diffusés par les moments magnétiques des impuretés. L'application d'un champ magnétique extérieur a pour effet d'ordonner ces moments magnétiques et de réduire les phénomènes de diffusion créant ainsi une décroissance de la résistivité.

Dans un modèle plus classique, l'action d'un champ magnétique a pour effet d'accroître la résistivité grâce à la force de Lorentz [49] s'exerçant sur les porteurs se déplaçant dans le cristal. Dans ce travail, nous avons analysé nos mesures expérimentales avec l'hypothèse que la MRN soit créée par un système magnétique. La méthode permettant de déterminer le nombre effectif de moments magnétiques sera exposée.

La compensation de l'échantillon (S1) calculée au chapitre III vaut $K \approx 0,2$. Nous avons représenté sur la même figure [IV-3] la variation de la résistivité ρ , de la mobilité μ et de la constante de Hall R_H en fonction de l'inverse de la température. Le comportement observé est caractéristique d'une conduction dans la bande d'impuretés au dessous de 14 K.

La courbe donnant la variation de R_H présente un maximum qui a été analysé par Mott et al [50]. Ce maximum est associé à l'existence d'une bande d'impuretés séparée de la bande de conduction par une énergie $\epsilon_1 \approx 10$ meV.

La conduction dans cette bande d'impuretés s'effectuant par saut à distance variable.

Pour étudier les propriétés magnétiques du CdAs₂, nous avons représenté sur la figure [IV-4] la variation de la composante négative de la MRT en fonction du champ magnétique B, à des températures comprises entre 11,03 K et 4,2 K. A plus hautes températures la magnétorésistance est positive avec un comportement analogue à celui des électrons libres. La courbe représentant la variation de $|\Delta\rho/\rho|_t^{-1/2}$ avec la température montre que la magnétorésistance (Figure [IV-5]) peut être décrite par la relation :

$$\left| \frac{\Delta\rho}{\rho} \right|_t^{-1/2} = K_1 \left(\frac{T + \Theta}{B} \right) + K_2 \quad (\text{IV-2-3})$$

où B est le champ magnétique et Θ une température considérée comme le point de Curie d'un système de spins paramagnétiques. S'il existe des moments magnétiques, la magnétorésistance est alors proportionnelle au carré de l'aimantation M des impuretés selon Yosida [51], soit :

$$\left| \frac{\Delta\rho}{\rho} \right|_t \propto M^2 \propto \left(\frac{B}{T} \right)^2 \quad (\text{IV-2-4})$$

L'aimantation M décrite par une fonction de Brillouin B_j s'écrit :

$$M = N_m g J B_j \left(\frac{\mu^* B}{k_B T} \right) \quad (\text{IV-2-5})$$

où : μ^* représente le moment magnétique des centres diffuseurs.

N_m la concentration de dipôles magnétiques.

J le moment total des électrons localisés.

Dans le cas où le nombre de moments magnétiques est relativement élevé, la fonction de Brillouin peut être remplacée par une fonction de Langevin L(x) s'écrivant :

$$L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \quad (\text{IV-2-6})$$

Outre le processus de diffusion par les moments magnétiques, il existe d'autres mécanismes de conduction. En effet ceci se traduit par le fait que la

magnétorésistance transverse totale est en fait constituée de la somme de deux termes :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t = \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t^+ + \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t^- \quad (\text{IV-2-7})$$

Le premier décrivant la magnétorésistance positive [9] donnée par l'expression (IV-1-2) :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t^+ = \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-2-8})$$

et le second décrivant la composante négative se met sous la forme :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t^- = -\lambda L^2 \left(\frac{\mu^* B}{k_B (T + \Theta)} \right) \quad (\text{IV-2-9})$$

D'où l'expression de la magnétorésistance totale :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t = -\lambda L^2 \left(\frac{\mu^* B}{k_B (T + \Theta)} \right) + \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-2-10})$$

La valeur absolue de la racine carrée de la MRN qui nous intéresse est déterminée par :

$$\left| \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t - \exp(\beta B^2) + 1 \right|^{1/2} = \delta L \left(\frac{\mu^* B}{k_B (T + \Theta)} \right) \quad (\text{IV-2-11})$$

où δ , μ^* , Θ et β sont des paramètres ajustables par des moindres carrés. L'ensemble de tous les points représentant la magnétorésistance strictement négative, à chaque température, se superposent sur une seule courbe décrite par une fonction quadratique de Langevin $L^2(x)$.

Le meilleur ajustement est ensuite obtenu par le calcul de l'écart quadratique moyen réduit (%Dev) déterminé par :

$$\%Dev = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{100}{\bar{y}_{i\text{mes}}} (y_{i\text{cal}} - y_{i\text{mes}}) \right\}^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV-2-12})$$

où Y_{mes} et Y_{cal} représentent la composante strictement négative de la magnétorésistance et sa valeur calculée. Leurs expressions sont respectivement données par le premier et le second membre de l'équation (IV-2-11).

La figure [IV-6] représente la variation de la racine carrée de la magnétorésistance strictement négative en fonction de $B/(T+\Theta)$. On constate effectivement que tous les points expérimentaux se superposent sur une seule et même courbe dont l'équation est celle d'une fonction de Langevin $L(x)$, de variable $x=\mu^*B/(T+\Theta)$ et de moment magnétique effectif $\mu^*=8\mu_B$. Ce résultat intéressant constitue un argument favorable pour l'interprétation de la M.R.N par le modèle des moments magnétiques.

IV-2-3 Discussion.

L'analyse des résultats expérimentaux montre que dans le cas du $CdAs_2$ la dépendance de la MRN est associée à une loi de Curie-Weiss dont la température de Curie est négligeable ($\Theta \approx 0$ K).

La figure [IV-6] représentant la variation de $|\Delta\rho/\rho|^{-1/2}$ en fonction de $B/(T+\Theta)$, pour différentes valeurs de B et T (avec $\Theta \approx 0$ K), montre que la magnétorésistance se comporte comme un système de spins paramagnétiques. Cette dépendance est décrite par une fonction de Langevin $L(x)$ où : $x=\mu^*B/k_B T$, et $\mu^*=8\mu_B$ représente le moment magnétique effectif.

Cette valeur relativement élevée de μ^* est interprétée par Toyozawa comme étant le résultat d'une distribution statistique due à la nature collective des moments magnétiques de spins localisés. Les valeurs de μ^* comprises entre 5 et $10\mu_B$ seraient causées par des électrons arrivant et quittant constamment ces sites magnétiques. D'autre part selon ce même auteur les sites non magnétiques créeraient une contribution supplémentaire à ces moments.

La décroissance de la résistivité serait due selon Toyozawa à une augmentation de la mobilité résultant d'une diminution de la diffusion des porteurs de charge par des moments magnétiques localisés. La valeur de $8\mu_B$ trouvée est en bon accord avec le modèle présenté; cependant quelques réserves sont à émettre quand à l'existence de moments aussi élevés dans un matériau non magnétique.

Des valeurs du moment magnétique effectif μ^* très élevées ont été obtenues dans InAs [52]. Ces valeurs seraient associées à un facteur de dégénérescence g très élevé de l'ordre de 40 pour les électrons de conduction.

En conclusion les résultats de nos mesures et de nos calculs indiquent que la dépendance de la MRN du CdAs_2 avec le champ et la température pourrait être gouvernée par une loi de Curie-Weiss assurant une diffusion des électrons par des spins localisés.

Cependant ce modèle relativement ancien reste assez controversé. En effet il est difficile d'assurer avec certitude sa validité étant donné notre ignorance totale quand à la présence d'impuretés magnétiques susceptibles de créer des moments $\mu^* = 8\mu_B$ aussi élevés dans notre échantillon.

D'où la nécessité d'étudier cette MRN à l'aide d'un modèle plus récent tenant compte de "l'effet Zeeman" et de l'action du champ magnétique sur le front de mobilité E_C .

IV-2-4 Magnétorésistance négative due à l'effet Zeeman et à l'action du champ magnétique sur le front de mobilité E_C .

Une interprétation de la MRN dans un régime de conduction par saut dans les états localisés de Anderson a été proposée par Fukuyama et Yosida [53]. Ce modèle serait particulièrement adapté près de la transition métal-isolant.

La fonction d'onde des états localisés de Anderson et d'énergie E s'écrit :

$$\Psi_E(R) \propto \exp(-\alpha R) \quad (\text{IV-2-13})$$

$$\text{et } \alpha(E) \propto (E_C - E)^\beta \quad (\text{IV-2-14})$$

où β est un coefficient proche de l'unité.

La conductivité à champ nul dans un régime de conduction par saut à distance variable s'écrit :

$$\sigma = C \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/n} \right] \quad (\text{IV-2-15})$$

L'application d'un champ magnétique extérieur provoque un dédoublement des niveaux d'énergie dans la bande d'impuretés. Ceux-ci se repeuplent en fonction de l'orientation des spins (effet Zeeman). Selon Fukuyama et Yosida [53], les porteurs majoritaires se trouveraient sur les niveaux supérieurs offrant ainsi un meilleur recouvrement des fonctions d'ondes à l'origine de la magnétorésistance négative.

Cet effet a été cependant ignoré lorsque le niveau de Fermi E_F était très proche du front de mobilité E_C . Dans ce cas la conductivité varie selon une loi de Mott (en $T^{-1/4}$). Lorsque $(E_C - E_F)$ augmente, Yosida et Fukuyama [53], [54], proposent l'expression suivante donnant la variation du front de mobilité avec le champ magnétique :

$$E_C(B) = E_C(0) + AB^2 \quad (\text{IV-2-16})$$

où A est un coefficient déterminant le sens de déplacement du front de mobilité E_C . Il est positif dans ce cas.

L'action du champ magnétique étant d'aligner les spins de façon parallèle ou antiparallèle, la fonction d'onde des états de Anderson dépend alors de leur orientation. Ceci se traduit par la nouvelle expression de la conductivité associée à cet effet :

$$\sigma = \frac{C}{2} \sum_{\sigma = \pm 1} \exp \left[- \left(\frac{T_\sigma}{T} \right)^{1/n} \right] \quad (\text{IV-2-17})$$

$$\text{où } T_\sigma \propto \left[E_C(B) - (E_F + \sigma \mu_B B) \right]^{\beta d} \quad (\text{IV-2-18})$$

d représente la dimension du système étudié et β un exposant proche de l'unité ($\beta \approx 1$). β dépend de la décroissance de la fonction d'onde.

On remplace $E_C(B)$ par son expression dans (IV-2-18), d'où :

$$T_\sigma \propto \left[E_C(0) + AB^2 - (E_F + \sigma \mu_B B) \right]^{\beta d}$$

$$\text{soit: } T_{\sigma} \propto \left[1 + \frac{AB^2 - \sigma \mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]^{\beta d} (E_C(0) - E_F)^{\beta d}$$

$$\text{d'où } T_{\sigma} = T_0 \left[1 + \frac{AB^2 - \sigma \mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]^{\beta d} \quad (\text{IV-2-19})$$

On remplace ensuite T_{σ} par son expression dans (IV-2-17), d'où :

$$\begin{aligned} \sigma(B) = & \frac{C}{2} \left\{ \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/n} \left[1 + \frac{AB^2 - \sigma \mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]^{\frac{\beta d}{n}} \right] \right\} \\ & + \frac{C}{2} \left\{ \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/n} \left[1 + \frac{AB^2 + \sigma \mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]^{\frac{\beta d}{n}} \right] \right\} \quad (\text{IV-2-20}) \end{aligned}$$

Dans le cas où la conduction par saut à distance variable est associée à l'existence d'un "gap" de Coulomb dans la bande d'impuretés, l'exposant n dans l'expression de la conductivité (IV-2-17) vaut : $n=2$.

Pour un système tridimensionnel ($d=3$), la valeur admise de $\beta d/n$ est très proche de l'unité ($\beta d/n \approx 1$), d'où l'expression de la conductivité :

$$\begin{aligned} \sigma(B) = & \frac{C}{2} \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \right] \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{AB^2}{(E_C(0) - E_F)} \right] \\ & \times \left\{ \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right] + \exp \left[\left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right] \right\} = \rho^{-1}(B) \quad (\text{IV-2-21}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{d'où } \sigma(B) = & C \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \right] \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{AB^2}{(E_C(0) - E_F)} \right] \\ & \times \cosh \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right] = \rho^{-1}(B) \quad (\text{IV-2-22}) \end{aligned}$$

Compte tenu de l'expression (IV-2-15), la conductivité s'écrit :

$$\sigma(B) = \sigma_0(0) \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{AB^2}{(E_C(0) - E_F)} \right] \cosh \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right] \quad (\text{IV-2-23})$$

D'où l'expression de la résistivité :

$$\rho(B) = \rho_0(0) \frac{\exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{AB^2}{(E_C(0) - E_F)} \right]}{\cosh \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]} \quad (\text{IV-2-24})$$

La magnétorésistance ainsi déduite s'écrit :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right) = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{\exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{AB^2}{(E_C(0) - E_F)} \right]}{\cosh \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)} \right]} - 1 \quad (\text{IV-2-25})$$

Pour des températures comprises entre 1,6 K et 11,03 K, à des champs magnétiques atteignant 1,5 Tesla, on observe une MRN variant de 0 à - 6% pour l'échantillon (S1). Nous avons donc réalisé un ajustement des mesures expérimentales avec l'expression (IV-2-25). L'analyse des résultats obtenus montre (voir tableau [IV-4]) que ce modèle ne concorde pas avec l'expérience (Figure [IV-7]). Ceci est en partie dû au fait que Yosida et Fukuyama prévoient une variation quadratique de la MRN à champs faibles, or ceci n'a pu être observé dans CdAs₂.

On notera cependant le bon accord entre ce modèle théorique et l'expérience d'un point de vue strictement qualitatif. En effet, il nous permet de montrer que la MRN peut être en partie due à l'effet Zeeman et l'on constate bien que celle-ci est négative à champs faibles et passe par un minimum pour ensuite croître et devenir positive à champs plus élevés.

Le coefficient T_0 est déduit de la courbe donnant la variation de la résistivité (Figure [IV-8]) en fonction de l'inverse de la température. Sa valeur est donnée par $T_0=429$ K.

T (K)	T_0 (K)	$(E_C(0) - E_F)$ (meV)
1,6	429	0,864
1,8		0,829
3,1		0,714
4,2		0,687
6,95		0,613
9,93		0,571
11,03		0,563

TABLEAU (IV-4)

On notera également que les valeurs de $(E_C - E_F)$ obtenues sont comprises entre 0,56 meV à 0,84 meV. Ces énergies sont en fait associées à une conduction par excitation des électrons au front de mobilité. Néanmoins ces résultats sont incompatibles avec la réalité physique car les énergies d'activation calculées $(E_C - E_F)$ seraient inférieures aux énergies de saut déduites précédemment (voir figure [III-8-a, b, c]).

La valeur de A déterminant le sens de variation du front de mobilité avec le champ magnétique est comprise entre $9 \cdot 10^{-3}$ et $6 \cdot 10^{-3}$ meV.T⁻². Ce qui suggère un déplacement de E_C vers E_F suivant une loi quadratique.

Compte tenu de ces résultats insuffisants, ce modèle nécessiterait certaines améliorations qui tiendraient compte des contraintes physiques. Un modèle plus récent proposé par Khmel'nitski [55] suggère qu'au voisinage de la transition, le déplacement du front de mobilité est régi par une loi d'échelle.

$$E_C(B) = E_C(0) + E_C(0) A B^{\frac{1}{2\nu}} \quad (\text{IV-2-26})$$

où ν est un exposant critique proche de 1 ou de 0,5 [56]. On remplace ensuite cette loi dans l'expression (IV-2-25) qui devient :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = \frac{\exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \frac{AB^{1/2\nu}}{(E_C(0) - E_F)}\right]}{\cosh\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)}\right]} - 1 \quad (\text{IV-2-27})$$

L'ajustement de la MRN (Figure [IV-9]) avec le paramètre supplémentaire ν n'apporte aucune amélioration sensible au modèle et le coefficient $(1/2\nu)$ est toujours proche de 2.

Il est cependant important de noter que la magnétorésistance positive dont nous n'avons pas tenu compte est généralement décrite par l'expression suivante :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t^+ = \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-2-8})$$

En considérant ce terme supplémentaire, la magnétorésistance transverse devient :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t = \frac{\exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \frac{AB^{1/2\nu}}{(E_C(0) - E_F)}\right]}{\cosh\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \frac{\mu_B B}{(E_C(0) - E_F)}\right]} + \exp(\beta B^2) - 2 \quad (\text{IV-2-28})$$

L'ajustement des courbes expérimentales (Figure [IV-10]) avec cette nouvelle expression (IV-2-28) montre que ce terme supplémentaire n'apporte aucune amélioration sensible au résultat final.

IV-2-5 Discussion.

Il est important de noter que ce modèle ne s'applique que lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable. Afin de déterminer avec certitude la valeur de l'exposant "s" dans l'expression de la conductivité à champ nul, nous avons réalisé un ajustement des mesures de conductivités obtenues pour l'échantillon (S1) par l'expression :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^s \right] \quad (\text{IV-2-29})$$

où s est un paramètre variant de 0 à 1 par pas de 0,01. On a ensuite calculé l'écart quadratique moyen réduit (%Dev) :

$$\%Dev = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{100}{\sigma_{i \text{ mes}}} \left(\left| \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^s \right] \right|_i - \sigma_{i \text{ mes}} \right) \right\}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV-2-30})$$

La valeur minimale correspondant au meilleur ajustement est trouvée pour $s=0,55$ (Figure [IV-11]), confirmant ainsi le processus de conduction en $T^{-1/2}$ avec la valeur suivante de T_0 : $T_0=429$ K.

Le modèle développé par Yosida et Fukuyama [53], [54] propose une dépendance positive et quadratique de E_C avec le champ magnétique; ce qui ne correspond pas aux résultats trouvés par Khmel'nitskii. En effet cet auteur [55] suggère une loi d'échelle où le sens de déplacement du front de mobilité, déterminé par le coefficient A dans l'expression (IV-2-26), ne peut être prévu par la théorie.

Cette loi d'échelle prévoit une variation en $B^{1/2\nu}$ avec $\nu=0,5$ ou 1, selon les cas étudiés [57] (Ref in). Afin d'obtenir le meilleur ajustement possible de la magnétorésistance avec ce modèle, nous avons déterminé l'exposant $\zeta=(1/2\nu)$ donnant la variation du front de mobilité avec le champ magnétique dans l'expression :

$$E_C(B) = E_C(0) + A E_C(0) B^\zeta \quad (\text{IV-2-31})$$

Il en résulte une valeur de ζ comprise dans l'intervalle [2.31-2.35]. Ce résultat est en fait proche de la valeur proposée par Yosida et al [53], [54] où $E_C(B) \propto B^2$. Le principal intérêt de ce modèle est essentiellement fondé sur le bon accord qualitatif entre la théorie et l'expérience. Cependant, il est nécessaire de tenir compte de certains effets supplémentaires non négligeables liés aux interférences quantiques créées lors du processus de conduction par saut. L'interprétation de ces effets fera l'objet du paragraphe suivant.

IV-3 Magnétorésistance due à l'effet orbital - Interférences quantiques.

IV-3-1 Interférences quantiques dans un régime de conduction par saut à distance variable.

Schirmacher [58] a étudié l'influence des effets d'interférences sur la magnétorésistance dans un régime de conduction par saut à distance variable. Il s'agit de déterminer la contribution du champ magnétique à la probabilité de saut assistée par les phonons. Cette contribution supplémentaire résulte des interférences entre les amplitudes d'une transition directe et d'une transition indirecte par l'intermédiaire d'un troisième site. On détermine ensuite la conductivité tenant compte de cet effet supplémentaire.

Afin d'estimer le nombre de sites intermédiaires entre chaque saut, on détermine d'abord la distance moyenne entre les donneurs $r_D = (3/4\pi N_D)^{1/3}$. Compte-tenu de la condition $(r_D/a_H) > 4$ (a_H représente le rayon effectif de Bohr) pour laquelle il y a conduction par saut à distance variable (selon un loi de Mott), cette distance moyenne de saut est donnée par Schirmacher [58] :

$$R_M = \frac{a_H}{2} \left| \frac{T_0}{T} \right|^{\frac{1}{4+1}} \quad (\text{IV-3-1})$$

Dans le cas où la conduction par saut à distance variable est associée à l'ouverture d'un "gap" de Coulomb, il n'existe pas d'expression explicite donnant la distance moyenne de saut R_M .

Zhao et al [59] ont proposé très récemment l'expression suivante de R_M pour les deux types de mécanismes de conduction par saut à distance variable, à la constante α près :

$$R_M = \alpha \xi \left| \frac{T_0}{T} \right|^{\frac{1}{n}} \quad (\text{IV-3-2}) \quad \text{avec } n = 2 \text{ ou } 4$$

ξ représente la longueur de localisation définie par :

$$\xi = a_H \left| \frac{n}{n_C} - 1 \right|^{-\nu} \quad (\text{IV-3-3})$$

où : ν est un exposant critique proche de l'unité : $\nu \approx 1$.
 n_C est la concentration critique de Mott.

La constante α a été calculée au paragraphe (IV-5); sa valeur est proche de 0,4 en accord avec les résultats de Zhao et al [59]. Le calcul de ξ nous donne la valeur suivante : $\xi = 31 \text{ \AA}$ qui est voisine de $a_H = 26 \text{ \AA}$. La température T_0 déduite de la courbe donnant la variation de la résistivité (Figure [IV-8]) en fonction de $T^{-1/2}$ est : $T_0 = 429 \text{ K}$. D'où la distance moyenne de saut :

$$R_M \approx 5,6 \xi \approx 6,6 a_H \approx 173 \text{ \AA}.$$

et la distance moyenne entre les donneurs vaut :

$$r_D = (3/4\pi N_D)^{1/3} \approx 107 \text{ \AA} \approx 4 a_H.$$

Au vu de ce résultat la distance moyenne de saut R_M est à peine 1,5 fois supérieure à la distance moyenne entre impuretés r_D . Ce résultat semble intéressant car le modèle de Schirmacher [58], établi grâce à la théorie développée par Holstein [60], ne considère que le seul cas où la conduction par saut à distance variable s'effectue par à un seul site intermédiaire.

Pour calculer la probabilité de saut W_{ij} , on considère l'hamiltonien :

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (\text{IV} - 3 - 4)$$

où H_{e-ph} représente l'interaction électron-phonon, H_{ph} l'hamiltonien décrivant les phonons et H_e l'hamiltonien électronique. Les états électroniques sont déterminés par la théorie des perturbations. Afin de prendre en considération le processus d'interférences triangulaires, on tient compte des termes du second ordre des intégrales de recouvrement. La probabilité de saut s'écrit alors sous forme réduite :

$$W_{ij}^{(n)} = W_{ij}^{(0)} g_{ij}^{(n)} \quad (\text{IV} - 3 - 5)$$

où $W_{ij}^{(0)}$ correspond à la probabilité de saut de Miller et Abrahams [19] et $g_{ij}^{(n)}$ le terme décrivant les effets d'interférences. Ce facteur est supérieur à 1 dans le cas où les interférences sont constructives et inférieur à 1 dans le cas destructif.

Movaghar et al [61], [62] ont développé une théorie de la conduction par saut dans les semiconducteurs désordonnés. En se limitant aux effets d'interférences, l'expression de la magnétoconductivité s'écrit :

$$\left\langle \frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right\rangle = \frac{\sigma(B) - \sigma(0)}{\sigma(0)} = \Delta\langle\eta\rangle(B) \quad (\text{IV-3-6})$$

Schimacher [58] a calculé l'expression de $\Delta\langle\eta\rangle(B)$ qui est donné par :

$$\Delta\langle\eta\rangle(B) = -2\pi \int_{|E| > E_0} dE N(E) \int_{-\infty}^{+\infty} d^d r_n \left[|\phi(r, r_n) W(r, r_n)| \delta(E - W(r, r_n)) \right] \quad (\text{IV-3-7})$$

où $E = E_n - E_F$; $E_0 = 2 k_B T (r/a_H)$; et $\phi(r, r_n)$ représente le flux magnétique à travers le triangle (i,j,n) (Figure [IV-12]) qui s'écrit :

$$\phi(r, r_n) = \frac{e}{\hbar} B_z \frac{1}{2} r y \quad (\text{IV-3-8})$$

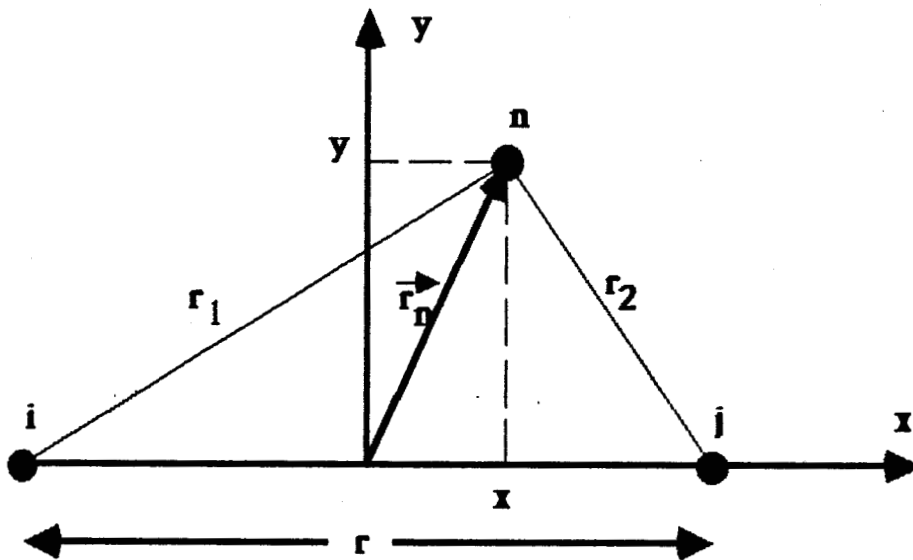


FIGURE [IV-12]

La magnétoconductivité s'écrit dans le cas tridimensionnel :

$$\left\langle \frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right\rangle = \frac{\pi e}{2\hbar} |B| r^3 a_H (r a_H)^{1/2} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE N(E) W_E^{1/2} P \left(\frac{W_E a_H}{r} \right) \quad (\text{IV-3-9})$$

$$\text{et } W_E = -\text{Log} \left| \frac{E}{E_1} \right| \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} E_{\min} = \begin{cases} -E_1 \text{ si } V(r) < 0 \\ +E_0 \text{ si } V(r) > 0 \end{cases} \\ E_{\max} = \begin{cases} -E_0 \text{ si } V(r) < 0 \\ +E_1 \text{ si } V(r) > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (\text{IV-3-10})$$

$$\text{où } P(x) = \left[1 + \frac{x}{2} \right]^{1/2} \left[\frac{3}{4} + 2x + x^2 \right] \quad (\text{IV-3-11})$$

Le résultat obtenu pour $(\Delta\sigma/\sigma)$ montre que la magnétoconductivité ne dépend pas de la direction du champ magnétique alors que dans le cas bidimensionnel $(\Delta\sigma/\sigma)$ est proportionnelle à la composante B_z .

Finalement dans un régime de conduction par saut à distance variable, la variation de la magnétoconductivité avec le champ magnétique et la température, calculée par Schirmacher [58] peut se mettre sous la forme simple suivante :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right) \propto T^{-7/8} B \quad (\text{V-1-12})$$

IV-3-2 Résultats et discussion.

Afin d'étudier la validité de ce modèle, nous avons appliqué ce résultat au cas du CdAs_2 (échantillon S1). Les mesures expérimentales (Figure [IV-13]) de magnétorésistance sont alors ajustées selon la nouvelle expression :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right) = a(T) B + \left[\exp(\beta B^2) - 1 \right] \quad (\text{IV-3-13})$$

où $a(T)$ est un coefficient vérifiant $a(T) \propto T^{-7/8}$ et le second terme entre accolades désignant la magnétorésistance positive usuelle.

Une première analyse de la magnétorésistance expérimentale montre que sa variation en champ faible est régie par une loi en B^x où $0 < x < 1$. En effet un ajustement selon l'expression (IV-3-13) montre (Figure [IV-13]) que ce modèle est en meilleur accord que celui développé par Yosida et al [53], [54]. Qiu Ye et al [63] ont également observé une variation linéaire de la MRN avec des champ magnétiques faibles sur des couches de GaAs dopées au Silicium. Ce résultat confirme ainsi les prédictions de Schirmacher [58] dans le modèle simple où il y'a diffusion par un seul site intermédiaire entre chaque saut à distance variable.

Dans ce modèle l'état final possède une fonction d'onde Ψ constituée par la somme de deux contributions, l'une due à la transition directe Ψ_1 du site 1 au site final 2, et l'autre $\Psi_2 e^{(i\Phi)}$ due à la transition indirecte après diffusion par le site intermédiaire 3. Cette fonction d'onde s'écrira :

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \exp(i\Phi) \quad (\text{IV-3-14})$$

Le terme $e^{(i\Phi)}$ représente le facteur orbital et Φ constitue la phase magnétique donnée par :

$$\Phi = \frac{BS \cos \theta}{\Phi_0} \quad (\text{IV-3-15})$$

où Φ_0 est le quantum de flux donné par, $\Phi_0 = hc/e \cdot 4,13 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2\text{T}$ et S la surface renfermant les sites 1, 2 et 3 estimée à :

$$S = R_M^{3/2} a_H^{1/2} \quad (\text{IV-3-16})$$

avec R_M la distance moyenne de saut entre les sites 1 et 2. θ indique l'angle entre la direction du champ magnétique et la normale à la surface S .

Afin d'analyser la variation de la MRN en fonction de la température, et compte tenu de sa linéarité avec le champ magnétique, nous avons représenté la courbe (Figure [IV-14]) donnant le comportement de la pente $\gamma = \partial(\Delta\rho/\rho)/\partial B$ avec la température sur une échelle logarithmique. Le résultat obtenu donne un exposant $\gamma=0,78$, alors que celui-ci vaut $\gamma=0,8$ selon l'expression précédente (IV-3-12), soit :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right) \propto T^{-0,8} B \quad (\text{IV-3-17})$$

D'où une confirmation du bon accord entre ce modèle et l'expérience. On notera également que la variation en $T^{-0,8}$ de la magnétorésistance est associée au mécanisme de conduction par saut à distance variable suivant une loi de Mott (en $T^{-1/4}$), alors que dans notre cas il s'agit d'une loi en $T^{-1/2}$ liée à la présence d'un "gap" de Coulomb. Ce résultat suggère donc une variation de la magnétorésistance en $T^{-0,8}$ indépendante du type de mécanisme de conduction par saut à distance variable ($T^{-1/2}$ ou $T^{-1/4}$).

On notera également que seule la diffusion par un site intermédiaire à l'intérieur d'une surface ellipsoïdale allongée de longueur R_M , la distance moyenne de saut, et de largeur $(R_M a_H)^{1/2}$, est prise en compte dans ce mécanisme de conduction.

Etant donné les résultats obtenus, ce modèle est particulièrement bien adapté au cas du $CdAs_2$ où la distance moyenne de saut est de 1,5 fois supérieure à celle entre les sites donneurs. Ce bon accord entre la théorie et l'expérience constitue un argument favorable dans la confirmation du lien entre la magnétorésistance négative et les interférences quantiques.

Nguyen et al [64] ont obtenu un résultat similaire à celui de Schirmacher [58] grâce à un modèle théorique tenant compte de la diffusion par plusieurs sites entre chaque saut. Il s'agit en fait d'une simulation numérique dans un réseau cubique simple.

Dans ce cas les mécanismes de diffusion entre les sauts se manifestent par l'apport d'une correction " $\Delta\xi$ " à la longueur de localisation " ξ " qui est fonction de la concentration de donneurs. Cette correction " $\Delta\xi$ " a pour origine le calcul de la valeur moyenne du logarithme de l'intégrale de résonance qui varie exponentiellement. Cette valeur moyenne étant proportionnelle à la magnétoconductivité permet de déterminer le signe et la variation de la magnétorésistance ($\Delta\rho/\rho$).

Le modèle de Nguyen et al [64] est établi grâce à la simulation d'une situation dans laquelle un cube constitué de $(25 \times 25 \times 25)$ sites est immergé dans un champ magnétique uniforme et perpendiculaire au vecteur r_{12} joignant les sites 1 et 2 distants de r et situés en deux coins opposés du cube. En l'absence de diffusion, le résultat montre que la magnétorésistance positive obtenue est proportionnelle à B^2 et r^3 dans le cas des champs magnétiques faibles, et à $B^{2/3}$ et r pour les champs élevés.

La présence de diffusion modifie ce résultat et entraîne l'apparition d'une magnétorésistance dont la composante négative est largement supérieure à la composante positive. Cette magnétorésistance négative ainsi obtenue varie linéairement avec le champ magnétique B et la distance de saut r . Elle s'écrit :

$$\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right) \propto r B$$

Ce résultat en accord avec celui de Schirmacher suggère l'existence de processus de diffusion par plusieurs centres à l'intérieur d'une région ellipsoïdale dont la longueur r est celle séparant le site initial du site final, et de largeur $(r\xi)^{1/2}$. Etant donné les sauts à grandes distances contribuant à la conduction par saut à distance variable, la diffusion par des impuretés intermédiaires, d'après Nguyen et al, est très importante.

Ainsi certains centres diffuseurs peuvent changer le signe de l'onde diffusée avec pour conséquences des interférences destructives par des sauts directs et indirects entre l'état final et l'état initial. Ce qui revient à dire que la région de longueur r correspondant à la distance optimale de saut est en fait la région de cohérence dans laquelle l'électron perd complètement sa phase en effectuant un saut de l'état initial à l'état final. On notera également l'absence d'interférences entre deux sauts successifs dans ce modèle.

Plus récemment un modèle tenant compte de la nature orbitale de la magnétorésistance négative a été proposé par Sivan et al [65], [66]. Il fera l'objet du paragraphe suivant.

IV-3-3 Modèle de Sivan et al [SEI] de la magnétorésistance due à l'effet orbital.

Sivan et al [65], [66] ont étudié la magnétorésistance associée à l'effet orbital dans un régime de conduction par saut à distance variable. Le modèle développé tient compte des interférences créées par des chemins aléatoires durant le processus de saut.

Dans ce modèle mis au point par la théorie des percolations, la magnétoconductivité varie de façon quadratique avec les champs magnétiques faibles, alors que celui de Nguyen et al [64] prévoit une variation linéaire. Une des raisons pour lesquelles ces résultats diffèrent serait associée au fait que Nguyen et al ont calculé la moyenne logarithmique de l'intégrale de recouvrement.

Dans le cas où la conductivité vérifie une loi de Mott :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \quad (\text{IV-3-18})$$

la distance moyenne de saut R_M est très grande devant la longueur de localisation ξ et la variation de la magnétoconductivité avec le champ magnétique est caractérisée selon Sivan et al par le flux magnétique :

$$\Phi_M \propto R_M (R_M \xi)^{1/2} B \quad (\text{IV-3-19})$$

à travers une surface ellipsoïdale allongée de longueur R_M et de largeur $(R_M \xi)^{1/2}$. Le calcul des intégrales de recouvrement en présence d'un champ magnétique est effectué à l'aide de la théorie des percolations [67]. Les expressions de la magnétoconductivité en fonction de l'amplitude du champ magnétique sont :

a) Cas des champs très faibles.

Dans le cas où la conductivité à champ nul est donnée par :

$$\sigma_C(0) = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/d+1} \right] \quad (\text{IV-3-20})$$

La magnétoconductivité calculée par Sivan et al est déterminée à partir d'une fonction de distribution de Bessel :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right) \propto \frac{b^2}{\left(\text{Log} \left| \frac{\sigma_0}{\sigma_C(0)} \right| \right)^{2d+1}} \int_{\frac{\sigma_C(0)}{\sigma_0}}^{\infty} dz e^{-z^{1/2}} \left(z^{-3/2} - z^{-1/2} \right) \left(\text{Log} \left| \frac{z \sigma_0}{\sigma_C(0)} \right| \right)^{2d+1} \quad (\text{IV-3-21})$$

$$\text{où } b \propto \frac{\Phi_M}{\Phi_0} \quad \text{avec la condition } \frac{b^2 \sigma_0}{\sigma_C(0)} \ll 1$$

Comme b est une fonction linéaire de B à champs faibles, ce résultat suggère une variation quadratique de la magnétoconductivité. Le signe de cette magnétoconductivité est gouverné par la différence $(z^{-3/2} - z^{-1/2})$

Pour des valeurs de $(\sigma_C(0)/\sigma_0) > (\sigma_1/\sigma_0) \approx 10^{-4}$, la magnétoconductivité est négative (Figure [IV-15-a]).

Pour des valeurs plus faibles de $(\sigma_C(0)/\sigma_0)$, la magnétoconductivité est positive et son expression est donnée par :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right) \approx b^2 \frac{\left|\frac{\sigma_0}{\sigma_C(0)}\right|}{\left(\text{Log}\left|\frac{\sigma_0}{\sigma_C(0)}\right|\right)^{2d+1}} \quad (\text{IV-3-22})$$

b) Cas des champs magnétiques intermédiaires.

L'expression de la magnétoconductivité calculée par Sivan et al dans le cas bidimensionnel, s'écrit :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right) \approx \frac{b}{\left(\text{Log}\left|\frac{\sigma_0}{\sigma_C(0)}\right|\right)^{2d+1}} (A^5 + 2(5)A^4 + 2^2(5)4A^3 + 2^3(5)4(3)A^2 + 2^2(5!)A + 2^5(5!)) \quad (\text{IV-3-23})$$

avec $A = \text{Log}\left(\frac{b\sigma_0}{\sigma_C(0)}\right)$ et la condition $\frac{\sigma_C(0)}{\sigma_0} < b^2 \ll 1$

Dans ce régime la magnétoconductivité est proportionnelle à b qui est une fonction linéaire du champ magnétique B avec cependant quelques corrections logarithmiques supplémentaires.

c) Cas des champs élevés.

Cette situation est réalisée si $b^2 \geq 1/2$. Dans ce cas le flux à travers la surface $S = R_M^{3/2} \xi^{1/2}$ est largement supérieur au quantum de flux $\Phi_0 = hc/e$ et la magnétoconductivité se sature.

Sivan et al [65] ont représenté (Figure [IV-15-a, b et c] ci-dessous) le comportement de la magnétoconductivité théorique en fonction du terme suivant : $\Phi_M/\Phi_0 = (R_M^{3/2} \xi^{1/2} B)/(hc/e)$ pour trois valeurs de $(\sigma_C(0)/\sigma_0)$ correspondant aux trois cas que nous venons d'exposer.

FIGURES DE : O. ENTIN-WOHLMAN, Y. IMRY, AND U. SIVAN

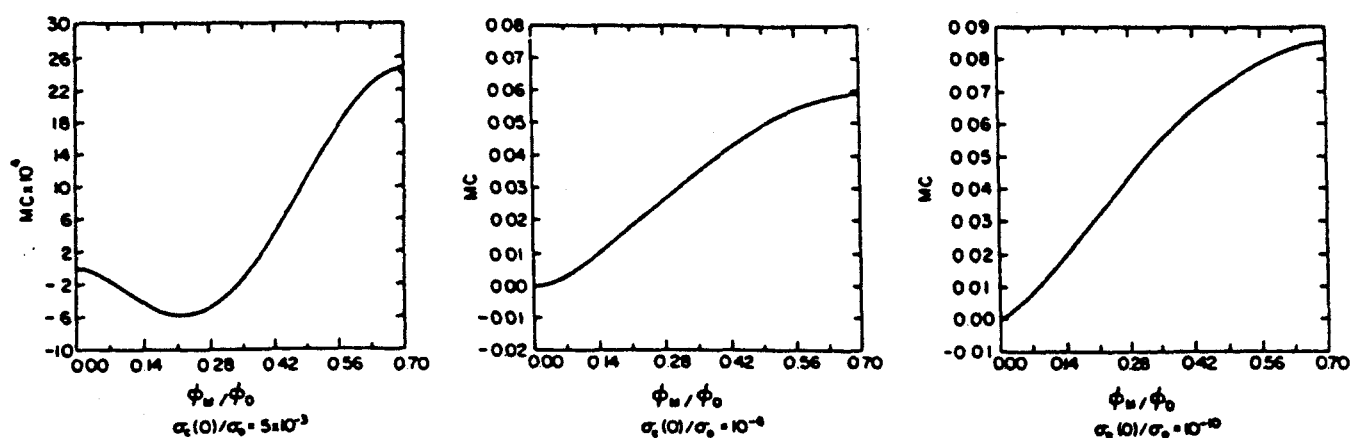


FIGURE [IV-15]

IV-3-4 Résultats et discussion.

Afin de comparer ce modèle à nos résultats expérimentaux nous avons recherché dans un premier temps $\sigma_c(0)$ et σ_0 pour l'échantillon (S1) tel que $(\sigma_c(0)/\sigma_0)$ ait une valeur proche de celles permettant la représentation de la figure [IV-15].

Dans le cas de l'échantillon considéré, la conduction par saut à distance variable est associée à l'existence d'un "gap" de Coulomb. Les valeurs numériques des paramètres $\sigma_c(0)$ et σ_0 ont été déterminées précédemment (voir paragraphe (IV-2-5)) par un calcul d'écart quadratique moyen réduit.

Pour déterminer notre position par rapport à la figure [IV-15], il faut trouver les températures pour lesquelles $(\sigma_c(0)/\sigma_0)$ prend les valeurs suivantes : $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-6} et 10^{-10} . Ce calcul conduit aux températures respectives suivantes : 15.3 K, 2.25 K et 0.8 K.

Le résultat de nos mesures fait apparaître une MRN à partir de 12 K environ et la température minimale atteinte est de 1,6 K. Nous nous sommes donc intéressés à la MRN mesurée à $T=2,2$ K très proche de 2,25 K et correspondant à : $(\sigma_c(0)/\sigma_0) = 10^{-6}$ (voir figure [IV-15-b]).

Cette courbe donne la variation de la magnétoconductivité en fonction de ϕ_M/ϕ_0 alors que nous avons toujours représenté la variation de la

magnétorésistance avec le champ magnétique. Il est par conséquent nécessaire de déterminer les relations entre ces paramètres. En effet comme :

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right) = \frac{\sigma(B) - \sigma(0)}{\sigma(0)} = \frac{\sigma(B)}{\sigma(0)} - 1 \quad \text{d'où} \quad \frac{\sigma(B)}{\sigma(0)} = \frac{\rho(0)}{\rho(B)} = 1 + \left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right)$$

$$\text{on aura} \quad \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right)} - 1$$

D'où l'expression de la magnétorésistance en fonction de la magnéto-conductivité :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right)}{\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma}\right) + 1} \quad (\text{IV-3-24})$$

Pour déterminer (Φ_M/Φ_0) , on sait que :

$$\Phi_M = R_M^{3/2} \xi^{1/2} B \quad (\text{IV-3-25})$$

Il s'agira ensuite d'estimer R_M et ξ .

La valeur de R_M et de ξ ont été déterminées au paragraphe (IV-3-1), soit: $\xi \approx 31 \text{ \AA}$; $R_M \approx 5,6 \xi \approx 6,6 a_H \approx 173 \text{ \AA}$ et la distance moyenne entre donneurs $r_D = (3/4\pi N_D)^{1/3} \approx 4 a_H \approx 107 \text{ \AA}$.

Comme la distance moyenne de saut est à peine supérieure à la distance entre les impuretés, nous avons considéré en plus de ce cas la situation où R_M serait 2, 3, 4 ou 5 plus grande que r_D .

Pour étudier le comportement de la MRN avec le champ nous avons calculé le rapport (Φ_M/Φ_0) en fonction B, soit :

$$\Phi_M = 1,26 \cdot 10^{-16} B \quad \text{et} \quad \Phi_0 = \frac{hc}{e} = 4,13 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2\text{T}$$

$$\text{d'où} \quad \frac{\Phi_M}{\Phi_0} = 0,18 B \quad \text{pour} \quad R_M = 173 \text{ \AA}$$

L'agrandissement de la figure [IV-15-b] (Figure [IV-16]) permet d'extraire les composantes de $(\Delta\sigma/\sigma)$ et de (Φ_M/Φ_0) converties respectivement en magnétorésistance et en champ magnétique.

La composante associée à l'effet orbital ainsi obtenue sera notée $(\Delta\rho/\rho)_{orb}$. Comme la magnétorésistance totale est la somme d'une composante négative que venons de calculer et d'une seconde positive, son expression s'écrira :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t = \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{orb} + \exp(\beta B^2) - 1 \quad (IV-3-26)$$

L'ajustement de la magnétorésistance expérimentale à $T=2,2$ K avec l'expression (IV-3-26) n'est pas adapté étant donné l'amplitude trop faible de la composante négative. Le modèle développé par Sivan et al sous cette forme ne constitue pas un modèle correctement adapté à l'expérience. Dans l'idée d'apporter une amélioration, nous avons introduit une correction supplémentaire qui tiendrait compte de l'effet Zeeman proposé par Yosida et Fukuyama [68]. La magnétorésistance totale s'écrirait :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_t = \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{orb} + \exp(\beta B^2) - 1 + \frac{\exp(aB^2)}{\cosh(bB)} - 1 \quad (IV-3-27)$$

L'ajustement réalisé avec cette nouvelle expression n'apporte aucune amélioration sensible au modèle (Figure [IV-17]).

Comme la distance moyenne de saut R_M est du même ordre de grandeur que la distance entre donneurs r_D , nous avons par conséquent multiplié R_M par 8 et 10 afin d'analyser la validité du modèle pour des distances de sauts plus usuelles. D'où de nouvelles valeurs de $(\Delta\rho/\rho)_{orb}$ et du champ magnétique B .

L'ajustement de la magnétorésistance expérimentale avec l'expression (IV-3-27) pour ces nouvelles valeurs de $(\Delta\rho/\rho)_{orb}$ (Figure [IV-18]) montre que la concordance est meilleure lorsque la distance de saut augmente. Néanmoins les écarts entre les deux courbes théorique et expérimentale restent toujours importants.

Le modèle présenté n'est pas adapté au cas du $CdAs_2$ car la variation de la MRN à champs faibles n'est pas quadratique, sauf peut être pour des

valeurs extrêmement faibles du champ dans un domaine trop étroit pour être significatif.

Les résultats obtenus pour ce modèle sont en moins bon accord que celui développé par Nguyen et al malgré la même origine physique du phénomène associé à l'effet orbital. Cette différence serait due au calcul de la moyenne logarithmique de l'intégrale de recouvrement permettant de déterminer la probabilité de saut.

Afin d'obtenir un modèle rendant vraiment compte de nos mesures nous avons conservé à l'esprit l'origine quantique de la magnétorésistance et l'action du champ magnétique sur le front de mobilité E_C . Un modèle prenant en considération ces effets a été proposé par Al'tshuler [69].

IV-4 Magnétorésistance négative associée aux interférences quantiques et au déplacement du front de mobilité.

Al'tshuler et al [69] ont développé un modèle permettant l'interprétation de la magnétorésistance négative dans un régime de conduction par saut à distance variable en considérant l'action du champ magnétique B sur la longueur de localisation ξ et sur le front de mobilité E_C .

Dans ce modèle l'application d'un champ magnétique a pour effet d'accroître la longueur de localisation ξ et de diminuer la résistivité. Dans ce cas les fonctions d'ondes électroniques dépendent des interactions avec les différents centres. La probabilité de saut est alors fonction de la longueur de localisation ξ , qui dépend de la position du front de mobilité E_C par rapport au niveau de fermi E_F .

Près de la transition, du côté isolant, la longueur de localisation varie selon une loi d'échelle et celle-ci diverge lorsque E_C se rapproche de E_F [57]. En effet il s'agit de la loi :

$$\xi = a_H \left| \frac{n}{n_C} - 1 \right|^{-\nu} \quad (\text{IV-4-1})$$

où ν est un exposant critique.

Il est important de noter que dans un régime de conduction par saut à distance variable, la longueur de localisation ξ est très grande par rapport au

rayon effectif de Bohr a_H lorsqu'on se rapproche de la transition métal-isolant. Mott [70] a établi l'expression de la conductivité dans ce régime de conduction qui s'écrit :

$$\sigma_C(0) = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\frac{1}{d+1}} \right] \quad (\text{IV-3-20})$$

Cependant les études de résistivité du CdAs_2 ont permis de mettre en évidence (Figure [IV-8]) une conduction par saut à distance variable associée à l'existence d'un "gap" de coulomb [9] dans la bande d'impuretés.

L'ouverture de ce "gap" due aux interactions électron-électron s'accompagne d'une décroissance rapide de la densité d'états au niveau de Fermi. Elle est donnée par l'expression:

$$g(E) = \frac{\kappa^3}{e^6} (E - E_F)^2 \quad (\text{IV-4-2})$$

où κ représente la constante diélectrique.

D'où l'expression de la conductivité associée à cet effet :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\frac{1}{p}} \right] \quad \text{avec} \quad T_0 \propto \xi^{1-p} \quad [69] \quad \text{et} \quad p=2 \quad (\text{IV-4-3})$$

Khmel'nitskii [55] a proposé l'expression donnant la variation du front de mobilité avec le champ magnétique qui s'écrit :

$$E_C(B) = E_C(0) + E_C(0) A_1 \left(\frac{eB}{hc} n^{-2/3} \right)^{1/2v} \quad (\text{IV-4-4})$$

Dans le cas d'un semiconducteur anisotrope tel que le CdAs_2 , ce déplacement dépend également de l'orientation du champ magnétique par rapport aux axes principaux des ellipsoïdes dont les coefficients de diffusion sont à déterminer. Zdanowicz [71] a calculé le coefficient de diffusion isotrope qui vaut : $D_c/D_a = 1,28$. On remplace ensuite dans l'expression (IV-4-4) le champ magnétique B par $(D_c/D_a) B$.

Compte tenu des expressions (IV-4-1, 3 et 4) ainsi que de la valeur de D_c/D_a , Al'tshuler [69] a déduit l'expression suivante de la résistivité avec $[n_c(0)-n_c(B)]/n_c(0) \ll 1$:

$$\text{Log} \left(\frac{\rho(T, B)}{\rho(T, 0)} \right) = -A_1 v \frac{1-p}{p} \left(\frac{D_c e B}{D_a h c} n^{-2/3} \right)^{1/2v} \text{Log} \left(\frac{\rho(T)}{\rho(0)} \right) \quad (\text{IV-4-5})$$

D'où la magnétorésistance :

$$\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right) = \exp \left\{ -A_1 v \frac{1-p}{p} \left(\frac{D_c e B}{D_a h c} n^{-2/3} \right)^{1/2v} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/p} \right\} - 1 \quad (\text{IV-4-6})$$

Cette expression constitue en fait la composante négative de la magnétorésistance totale et le coefficient A_1 détermine le sens de déplacement du front de mobilité E_c par rapport à E_f .

T (K)	A_1	v
1,6	0,055	0,999
1,8	0,059	0,959
3,1	0,064	0,927
4,2	0,065	0,892
6,95	0,050	0,924
9,93	0,041	0,932
11,03	0,038	0,936

Tableau (IV-5)

La confrontation de ce modèle à nos résultats expérimentaux pour des champs magnétiques allant jusqu'à 1,2 Tesla, où la composante négative de la magnétorésistance est dominante, montre que l'accord entre la théorie et l'expérience est très bon (Figure [IV-19]). L'ensemble des résultats

numériques sont regroupés dans le tableau (IV-5) où l'on constate que l'exposant critique ν est très proche de 1. Une analyse du comportement critique sur SiAu [72] a montré que l'exposant ν était très proche de 1 en accord avec les prédictions de AALR [3].

Lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable, le temps t mis par l'électron pour effectuer un saut, varie selon $t \propto \exp[(T_0/T)^{1/2}]$. Outre ces sauts variables, l'électron a la possibilité d'effectuer des sauts aux plus proches voisins avec une probabilité w :

$$W \propto \exp\left(\frac{1}{\xi n^{1/3}}\right) \quad (\text{IV-4-7})$$

Selon Al'tshuler[69], la M.R.N existe s'il se produit au moins un saut par unité de temps. Lors de la conduction par saut à distance variable, une partie des électrons effectuant des sauts aux plus proches voisins reviennent à leur état initial créant ainsi des interférences. La combinaison de ces interférences avec le champ coulombien contribuent à la création de la longueur de localisation ξ . L'action du champ magnétique a pour effet de détruire ces interférences lorsque le flux à travers la surface renfermée par un chemin "aller-retour" est comparable au quantum de flux $\Phi_0 = hc/e$. Dans ce cas la condition suivante doit être vérifiée.

$$\frac{eB}{hc} \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \xi n^{-1/3} \gg 1 \quad (\text{IV-4-8})$$

Il est important de mentionner le fait que cette condition impose une limite inférieure de champ qui nous semble surestimée étant donné la bonne adéquation de ce modèle avec l'expérience à champs faibles.

IV-4-1 Correction au modèle et discussion.

Afin de compléter cette étude de la magnétorésistance il ne faut pas oublier que celle ci croit rapidement à champs élevés. En effet comme nous l'avons mentionné précédemment, l'expression donnant la variation de la magnétorésistance positive (M.R.P) avec le champ magnétique s'écrit :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = \exp(\beta B^2) - 1$$

D'ou l'expression de la magnétorésistance totale :

$$\left| \frac{\Delta\rho}{\rho} \right| = \exp \left\{ -A_2 \nu \frac{1-p}{p} \left(\frac{D_c}{D_a} \frac{eB}{hc} n^{-2/3} \right)^{1/2\nu} \left| \frac{T_0}{T} \right|^{1/p} \right\} + \exp(\beta B^2) - 2 \quad (\text{IV-4-9})$$

Compte-tenu de cet effet nous avons réalisé un ajustement des courbes de MRN avec l'expression (IV-4-9) (Figure [IV-20]), en conservant à ν la valeur trouvée précédemment (Tableau (IV-5)). Les résultats obtenus pour les paramètres A_1 et β avec ν imposé, sont regroupés dans le tableau (IV-6).

T (K)	A_1	β	ν
1,6	0,064	0,0282	0,999
1,8	0,069	0,0290	0,959
3,1	0,068	0,0063	0,927
4,2	0,069	0,0051	0,892
6,95	0,053	0,0025	0,924
9,93	0,044	0,0018	0,932
11,03	0,041	0,0024	0,636

Tableau (IV-6)

En conservant à ν une valeur admise par de nombreux auteurs ($\nu \approx 1$), on constate (Figure [IV-20]) que l'expression de la M.R.N trouvée par Al'tshuler [69] additionnée à celle de la M.R.P [9] usuelle, constituent un modèle particulièrement intéressant pour l'interprétation de la magnétorésistance dans les isolants. On remarque également que le coefficient A_1 varie peu avec la température. Le coefficient β est relativement faible excepté à très basses température où il semble être plus important conformément à nos mesures de magnétorésistance négative. En effet après le passage par un minimum, celle-ci croit plus rapidement avec le champ pour devenir positive. Le coefficient A_1 décrivant le sens de déplacement du front de mobilité E_C avec le champ magnétique varie peu avec la température. Il est toujours positif, suggérant ainsi un déplacement de E_C vers le niveau de Fermi E_F .

La dernière étape de cette étude a consisté à réaliser une optimisation en considérant A_1 , β et ν comme des paramètres ajustables. La figure [IV-21] montre en effet que l'accord entre la théorie [expression (IV-4-9)] et l'expérience est excellent. Au vu des résultats numériques (Tableau (IV-7)), l'exposant critique ν moyen est de l'ordre de 0,7. Plusieurs auteurs dont Shafarman et al [57 (Ref in)] ont trouvé un exposant critique $\nu \approx 0,6$ lorsque la conduction s'effectue par saut à distance variable ($\rho \propto e^{(T_0/T)^{1/2}}$).

T (K)	A_1	β	ν
1,6	0,0110	0,0398	0,7457
1,8	0,0116	0,0399	0,7291
3,1	0,0092	0,0111	0,7896
4,2	0,0105	0,0105	0,7146
6,95	0,0093	0,0073	0,6886
9,93	0,0082	0,0057	0,6711
11,03	0,0068	0,0050	0,7150

Tableau (IV-7)

En conclusion ce travail nous a permis de donner une interprétation physique de la M.R.N du côté isolant de la transition métal-non-métal. Effectivement ce modèle [69] prend en compte l'effet de la destruction des interférences quantiques par un champ magnétique dans une surface fermée constituée par des sauts cohérents aux plus proches voisins.

Ces interférences étant associées à la longueur de localisation dont dépend la magnétorésistance négative. Leur destruction se produit lorsque le flux crée par le champ à travers cette surface fermée est supérieur au quantum de flux $\Phi_0 = hc/e$.

Nous avons également constaté qu'il fallait tenir compte de la magnétorésistance positive croissant de façon exponentielle avec le carré du champ magnétique B^2 .

En considérant ces deux effets nous avons pu mettre au point un modèle rendant compte de l'expérience d'une manière satisfaisante. Nous avons pu vérifier que la valeur de l'exposant critique ν était proche de celle trouvée par d'autres auteurs [57 (Ref in)].

Afin de conclure cette étude de la magnétorésistance négative un modèle très récent vient d'être proposé par Zhao et al [59]. Ce modèle se base sur la diffusion par un ou plusieurs sites intermédiaires en conservant les mêmes hypothèses données par Nguyen et al [64]. Nous allons en exposer les idées essentielles et les comparer aux résultats de nos mesures dans le paragraphe suivant.

IV-5 Analyse de Zhao, Spivak et al

Dans les échantillons bidimensionnels, la MRN est fortement anisotrope [73], [74]. Cette anisotropie est en fait fonction de la direction du champ magnétique et de celle de l'échantillon. D'où la nature orbitale de la MRN dans les isolants où la conduction a lieu par saut à distance variable.

Comme nous l'avons vu précédemment, l'amplitude de cette MRN serait due selon Nguyen et al [64] aux corrections à apporter à la longueur de localisation qui varie sous l'action du champ magnétique. Avec pour conséquence une variation exponentielle de la MRN à basses températures.

Zhao et al [59] ont réalisé des simulations numériques avec lesquelles ils montrent que la MRN possède un comportement universel indépendant des potentiels de diffusion lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable.

Dans ce type de conduction, la conductivité résulterait en fait de la compétition entre deux facteurs exponentiels. L'un étant le facteur de décroissance exponentielle avec r_{ij} dans l'expression de la probabilité de saut, et le second étant un facteur d'activation $e^{(-|\epsilon_i - \epsilon_j|/k_B T)}$ où ϵ_i et ϵ_j désignent les énergies des états i et j .

Dans un régime de conduction par saut à distance variable la conductivité s'écrit :

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/n} \right] \quad (\text{IV-1-4})$$

et la distance typique de saut qui est très grande par rapport à la distance moyenne entre impuretés près de la transition s'écrit : $r = \xi (T_0/T)^{1/n}$. Dans ce cas l'électron subit plusieurs diffusions élastiques par les impuretés au cours d'un saut et la distribution aléatoire des impuretés permet d'obtenir l'expression de la conductance σ_{ij} de Miller et al [25]. La théorie des percolations [9] permet de déterminer la magnétorésistance en effectuant la moyenne logarithmique [64] sur plusieurs réalisations de la distribution d'impuretés, soit :

$$\text{Log} \left(\frac{\sigma(B)}{\sigma(0)} \right) = \left\langle \text{Log} \left(\frac{\sigma_{ij}(B)}{\sigma_{ij}(0)} \right) \right\rangle \quad (\text{IV-5-1})$$



Zhao et al [59] ont simulé un modèle à deux dimensions où les sites i et j sont sur la même diagonale d'un réseau carré. Chaque chemin de saut est associé à une amplitude A_Γ donnée par :

$$A_\Gamma = \exp \left(i \frac{\Phi_\Gamma}{\Phi_0} \right) \prod_{k \in \Gamma} \alpha_k \quad (\text{IV-5-2})$$

où α_k est une variable indépendante associée à chaque site. Elle représente l'amplitude de diffusion par les impuretés rencontrées au cours du saut par l'électron. L'indice k est celui associé aux sites appartenant au chemin Γ . Le facteur de phase Φ_Γ est le flux à travers la surface comprise entre le chemin Γ et la diagonale. $\Phi_0 = hc/e$ est le quantum de flux.

La conductance étant proportionnelle à $|J|^2$ avec :

$$J = \sum_{\Gamma} A_\Gamma \quad (\text{IV-5-3})$$

En considérant l'hamiltonien de Anderson [75], donné par :

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k \neq l} V_{kl} a_k^\dagger a_l \quad (\text{IV-5-4})$$

et dans le cas d'une forte localisation, le terme $|V_{kl}| = V \ll |\epsilon_k - \epsilon_l|$. Pour les sites k se trouvant sur le chemin de saut allant de i vers j , la théorie des perturbations [75] permet alors d'écrire :

$$A_\Gamma = \exp\left(i \frac{\Phi_\Gamma}{\Phi_0}\right) \prod_{k \in \Gamma} \frac{V}{(\epsilon_l - \epsilon_k)} \quad (\text{IV-5-5})$$

$$\text{et donc } J = \sum_\Gamma A_\Gamma = \sum_\Gamma \exp\left(i \frac{\Phi_\Gamma}{\Phi_0}\right) \prod_{k \in \Gamma} \frac{V}{(\epsilon_l - \epsilon_k)} \quad (\text{IV-5-6})$$

Le calcul de J effectué par Zhao et al [59] permet de représenter la magnétoconductivité par :

$$L = \left\langle \text{Log} \left| \frac{\sigma_{ij}(B)}{\sigma_{ij}(0)} \right| \right\rangle = \left\langle \text{Log} \left| \frac{J(B)}{J(0)} \right|^2 \right\rangle \quad (\text{IV-5-7})$$

d'où l'expression :

$$L = \gamma \frac{R_M}{L_H} \quad (\text{IV-5-8})$$

où $L_H = (\Phi_0/B)^{1/2}$ représente la longueur magnétique, γ un coefficient estimé à $\gamma \approx 0,1$ par Zhao et al, et R_M la distance moyenne de saut.

Le résultat ainsi obtenu suggère donc une variation de la magnétoconductivité avec le champ magnétique en $B^{1/2}$, soit :

$$\left| \frac{\Delta\sigma}{\sigma} \right| \propto B^{1/2} \quad (\text{IV-5-9})$$

Medina et al [75] ont également étudié ce comportement de la magnétoconductivité. Ils constatent qu'en l'absence d'impuretés magnétiques celle-ci est positive et varie avec le champ magnétique selon $B^{1/2}$ pour des valeurs de flux élevés.

IV-5-1 Résultats et discussion.

L'origine des effets d'interférences dues au spin électronique dans la conduction par saut à distance variable a été déterminée par Spivak [76]. Il propose un modèle simple tenant compte de l'orientation des spins. Ce phénomène est interprété à l'aide de la figure [IV-22] où les cercles vides représentent des états vides et les cercles noircis des états occupés.

a) _ On considère le cas de figure suivant :

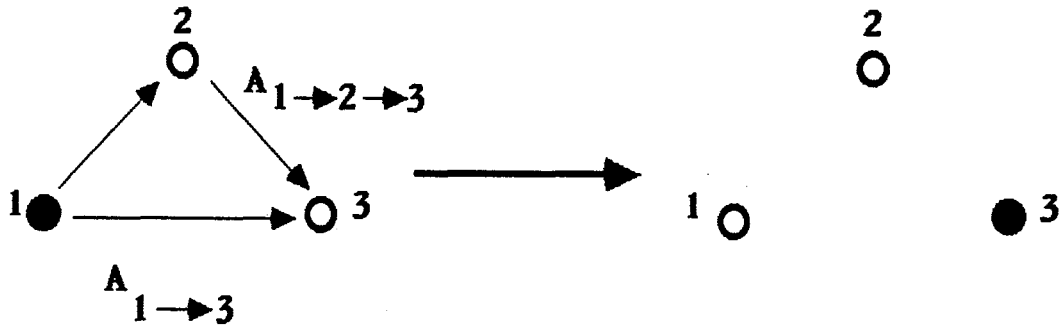


FIGURE (IV-22-a)

L'état 1 est occupé et les états 2, 3 sont vides. L'électron peut alors effectuer un saut de 1 vers 3 directement ou par l'intermédiaire du site 2. La probabilité totale W_1 pour l'électron d'effectuer un saut de 1 vers 3 s'écrit :

$$W_1 \propto |A_{1 \rightarrow 3} + A_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3}|^2 \quad (IV-5-10)$$

b) _ On considère le cas où l'état 2 est occupé et on prend en compte l'orientation des spins

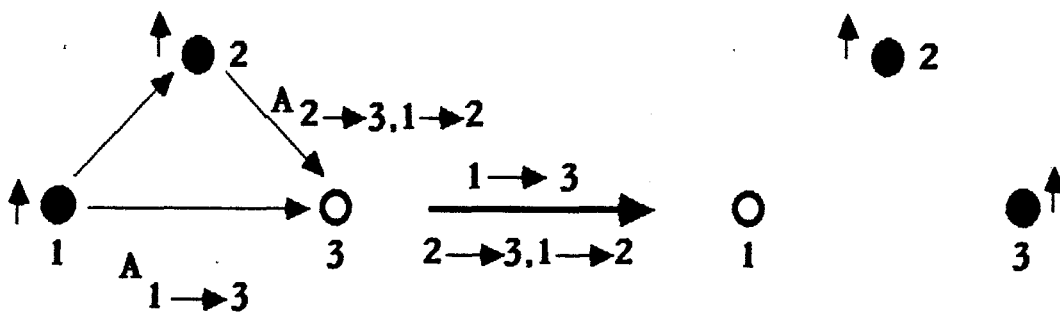


FIGURE (IV-22-b)

La probabilité de saut de 1 vers 3 dans le cas où les spins sont parallèles à l'état initial et le restent à l'état final, s'écrit de la même façon que précédemment :

$$W_1 \propto |A_{1 \rightarrow 3} + A_{2 \rightarrow 3, 1 \rightarrow 2}|^2 \quad (\text{IV-5-11})$$

c) _ Dans le cas où les spins sont anti-parallèles

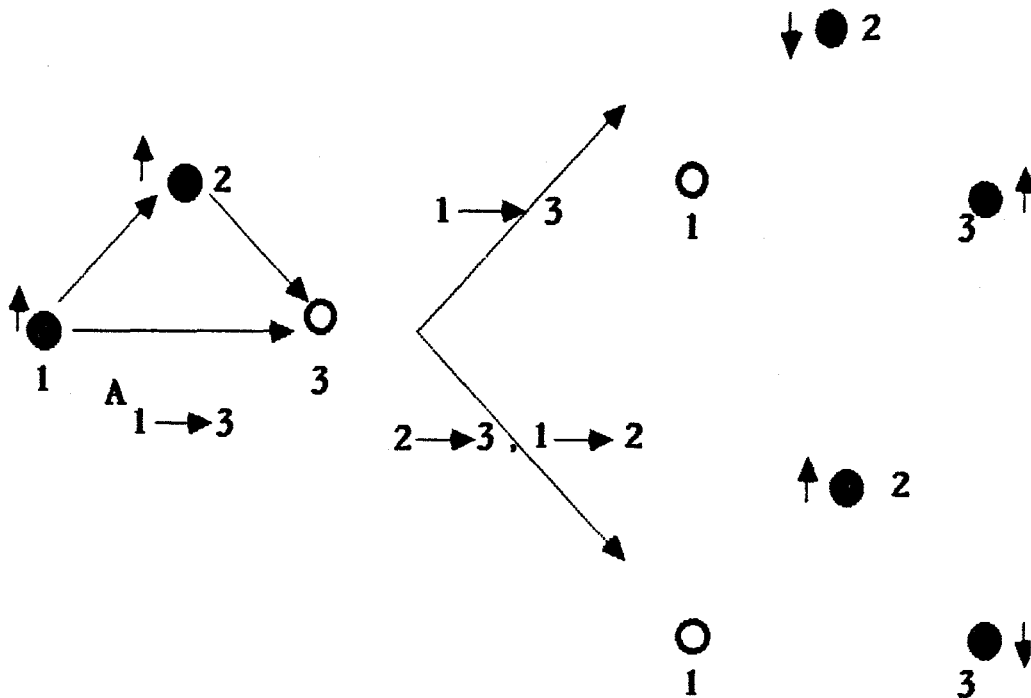


FIGURE (IV-22-c)

Les configurations finales des spins ne sont plus les mêmes pour les trajectoires $1 \rightarrow 3$ et $2 \rightarrow 3, 1 \rightarrow 2$; d'où la probabilité de saut pour les deux cas :

$$W_2 \propto |A_{1 \rightarrow 3}|^2 + |A_{2 \rightarrow 3, 1 \rightarrow 2}|^2 \quad (\text{IV-5-12})$$

La probabilité de saut dans ce cas est équivalente à une perte de cohérence de phase. En effet la probabilité W_2 diffère de W_1 d'un terme d'interférences :

$$2 A_{1 \rightarrow 3} A_{2 \rightarrow 3, 1 \rightarrow 2}^*$$

Le champ magnétique a pour effet de modifier la probabilité de saut et donc de faire varier la résistance. En l'absence de champ il n'y a pas d'interférences car tous les spins sont désordonnés. Son action est alors d'aligner ces spins et de mettre en évidence des chemins pour lesquels il y'a des interférences. Cet effet serait à l'origine de la magnétorésistance négative du côté isolant de la transition métal-isolant lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable.

Dans le but d'analyser la validité de ce modèle, nous avons réalisé un ajustement de la magnétorésistance expérimentale avec l'expression suivante tenant compte de la composante positive, soit :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = -\gamma \frac{R_M}{L_H} + \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-5-13})$$

$$\text{avec } L_H = \left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{1/2} \quad \text{et} \quad R_M = \alpha \xi \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \quad \text{où} \quad \xi = a_H \left|\frac{n}{n_C} - 1\right|^{-1} \quad (\text{IV-5-14})$$

Pour l'échantillon considéré (S1), on a : $n = 1,6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $n_C \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; $a_H \approx 26 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$; $T_0 = 429 \text{ K}$ et les températures varient de 1,6 K à 11,03 K. En remplaçant chaque paramètre par sa valeur dans l'expression (IV-5-13), celle-ci se met sous la forme :

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right) = -K_1 a B^{1/2} + \exp(\beta B^2) - 1 \quad (\text{IV-5-15})$$

$$\text{avec } K_1 = \xi \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \left(\frac{e}{\hbar c}\right)^{1/2} \quad \text{et} \quad a = \alpha \gamma$$

Les paramètres à ajuster sont a et β . Nous avons regroupé l'ensemble des résultats dans le tableau (IV-8) et calculé la valeur de a/γ pour $\alpha \approx 0,4$ (correspondant à une loi de Mott en $T^{-1/4}$). Le résultat obtenu montre que γ varie de 0,06 à 0,103 alors que Zhao et al [59] ont trouvé dans le cas d'une simulation numérique, la valeur $\gamma \approx 0,1$.

La valeur de γ ainsi obtenue est relativement proche de celle déduite par Zhao et al en considérant que la distance de saut R_M est donnée par l'expression (IV-5-14). D'où une confirmation expérimentale de ce modèle où la MRN serait due à une correction à la longueur de localisation ξ ; conférant à ce mécanisme une nature orbitale dans lequel il se produit des interférences quantiques.

T (K)	K_1 (SI)	a (SI)	β (T^{-2})	$\gamma - a/0,4$
11,03	0,73	0,0240	0,00200	0,06
9,93	0,77	0,0255	0,00133	0,063
6,95	0,92	0,0305	0,00171	0,076
4,2	1,185	0,0372	0,00330	0,093
3,1	1,379	0,0387	0,00500	0,0967
1,8	1,809	0,0416	0,0286	0,104
1,6	1,919	0,0413	0,0293	0,103

TABLEAU (IV-8)

Les courbes ainsi obtenues (Figure [IV-23]) montrent que la concordance est très bonne comparée aux modèles précédents excepté celui développé par Alt'shuler [69].

Nous avons également représenté la courbe (Figure [IV-24]) donnant la variation de γ avec la température T. Le comportement observé suggère une variation linéaire avec T, mais nous ne possédons aucune interprétation physique de ce phénomène.

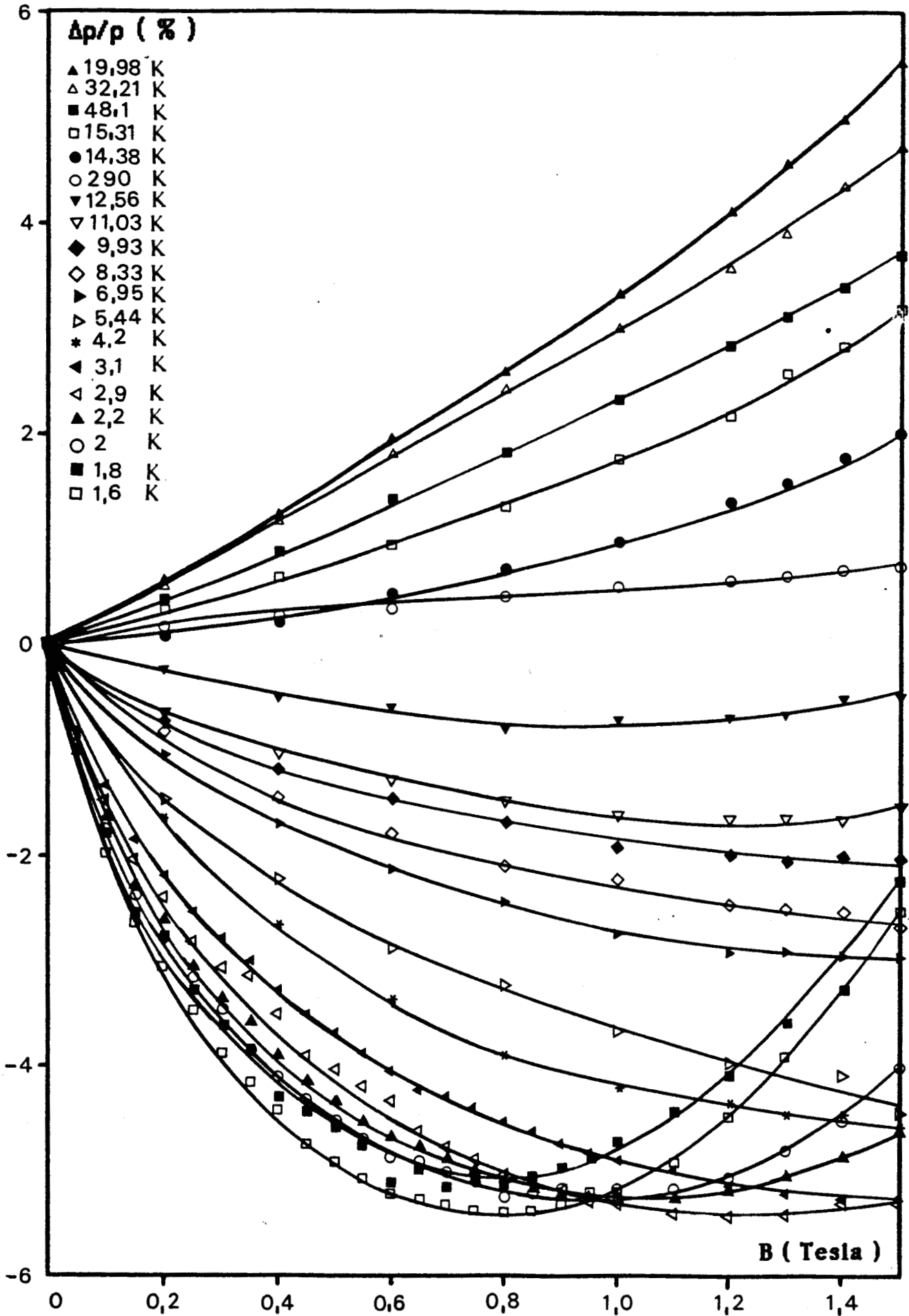


FIGURE [IV-1-a] : Variation de la magnétorésistance en fonction du champ magnétique pour l'échantillon S1.

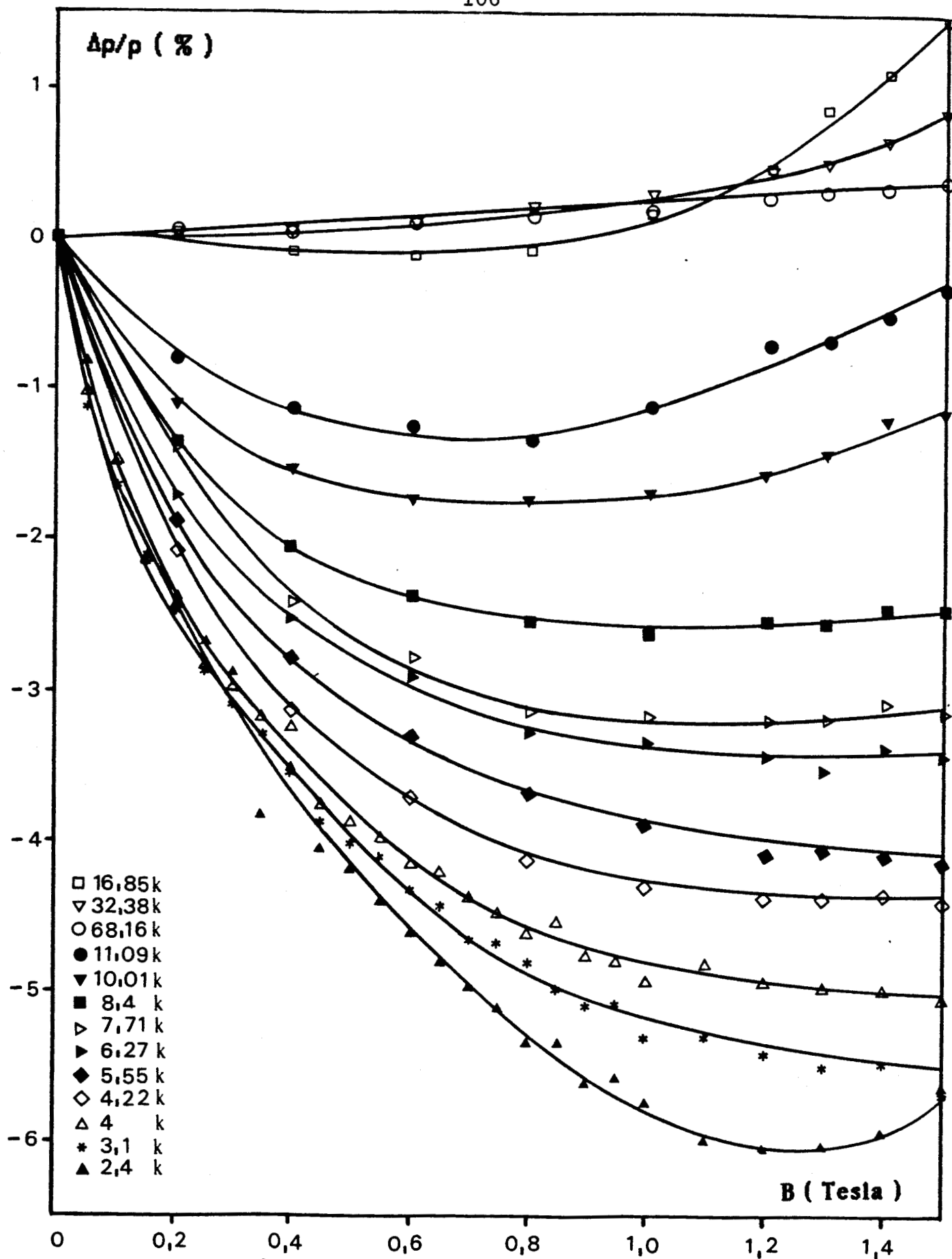


FIGURE [IV-1-b] : Variation de la magnétorésistance en fonction du champ magnétique pour l'échantillon S52.

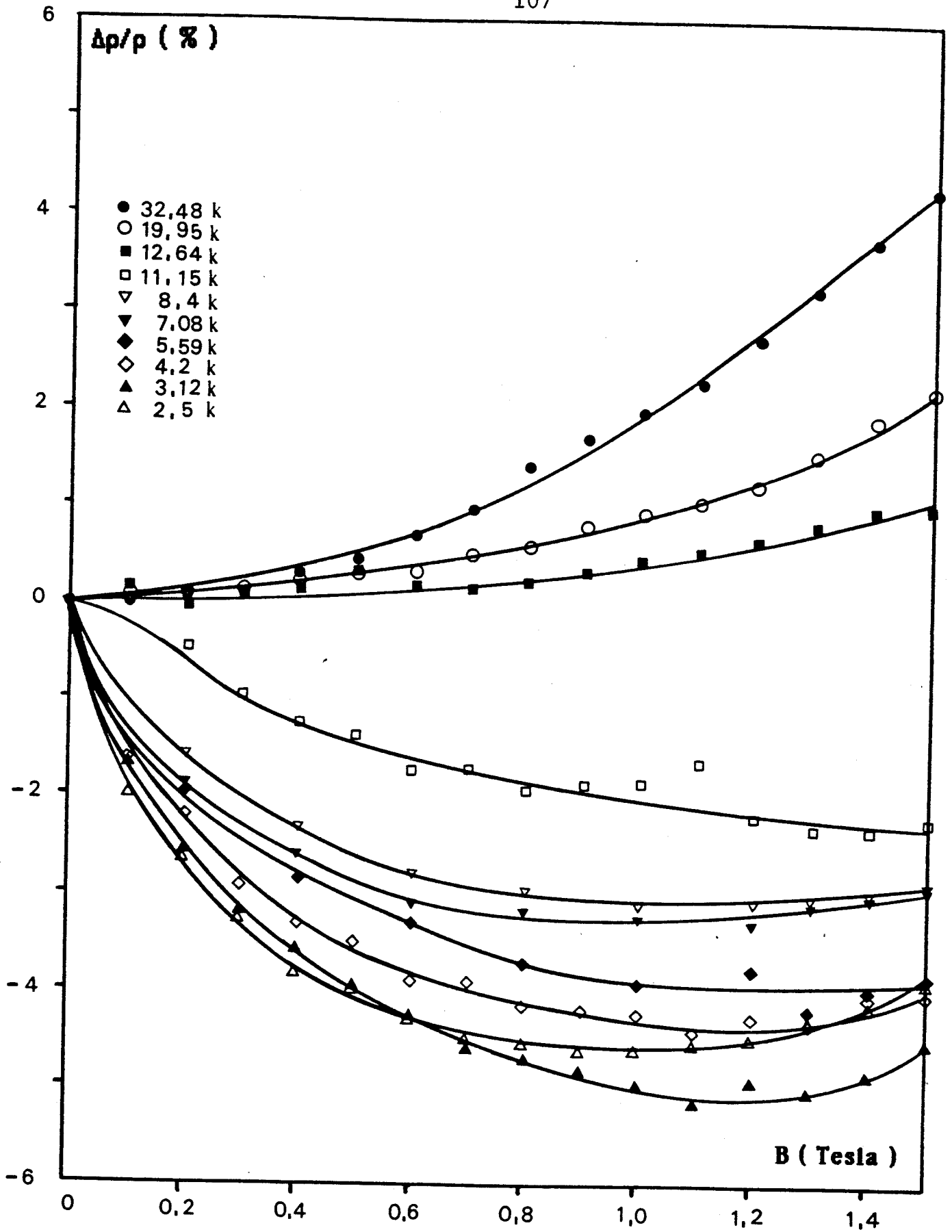


FIGURE [IV-1-c] : Variation de la magnétorésistance en fonction du champ magnétique pour l'échantillon S61.

- ▽ 12,56 K
- ▼ 11,03 K
- 9,93 K
- 8,33 K
- 6,95 K
- 5,44 K
- ▲ 4,2 K
- ◆ 3,1 K
- ◇ 2,9 K
- △ 2,2 K
- ◀ 1,8 K
- ◁ 1,6 K

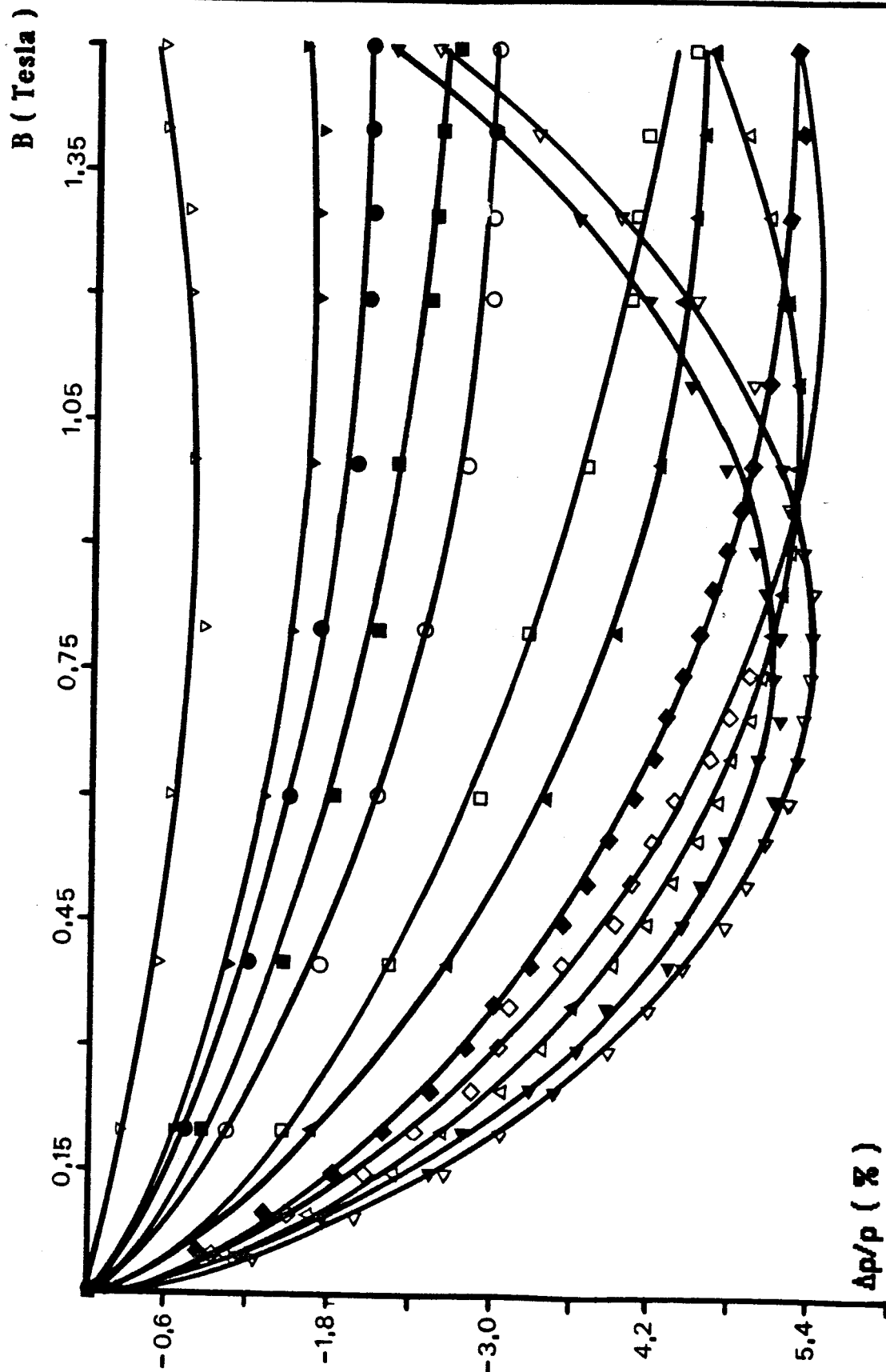


FIGURE [IV-2-a] : Ajustement de la magnéto-résistance négative de l'échantillon S1 selon la loi empirique : $(\Delta\rho/p) = a B^b + c B^2$

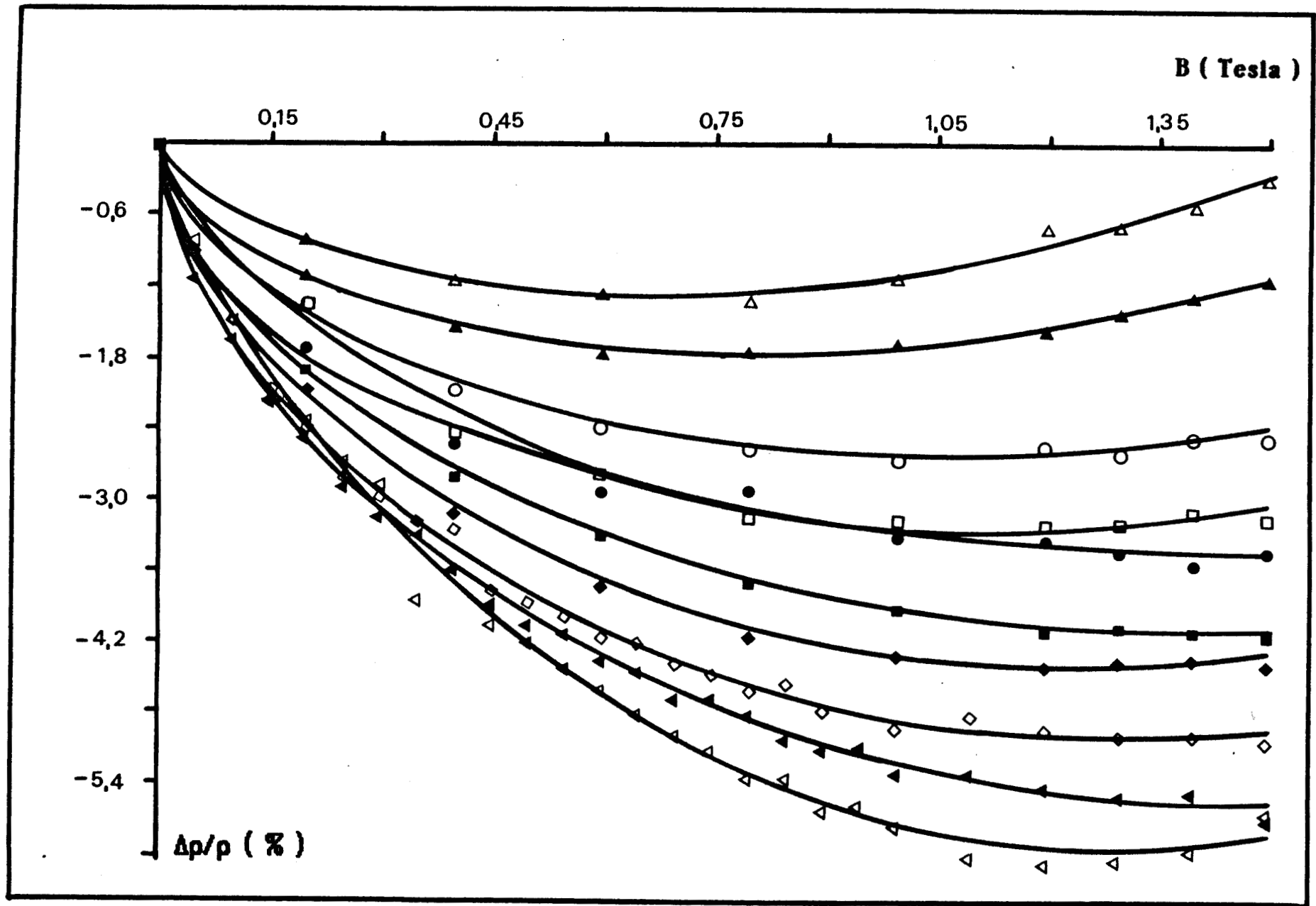


FIGURE [IV-2-b] : Ajustement de la magnétorésistance négative de l'échantillon S52 selon la loi empirique : $(\Delta\rho/\rho) = a B^b + c B^2$

- 11,15 K
- 8,4 K
- 7,08 K
- △ 5,59 K
- ◆ 4,22 K
- ▲ 4,0 K
- 3,33 K

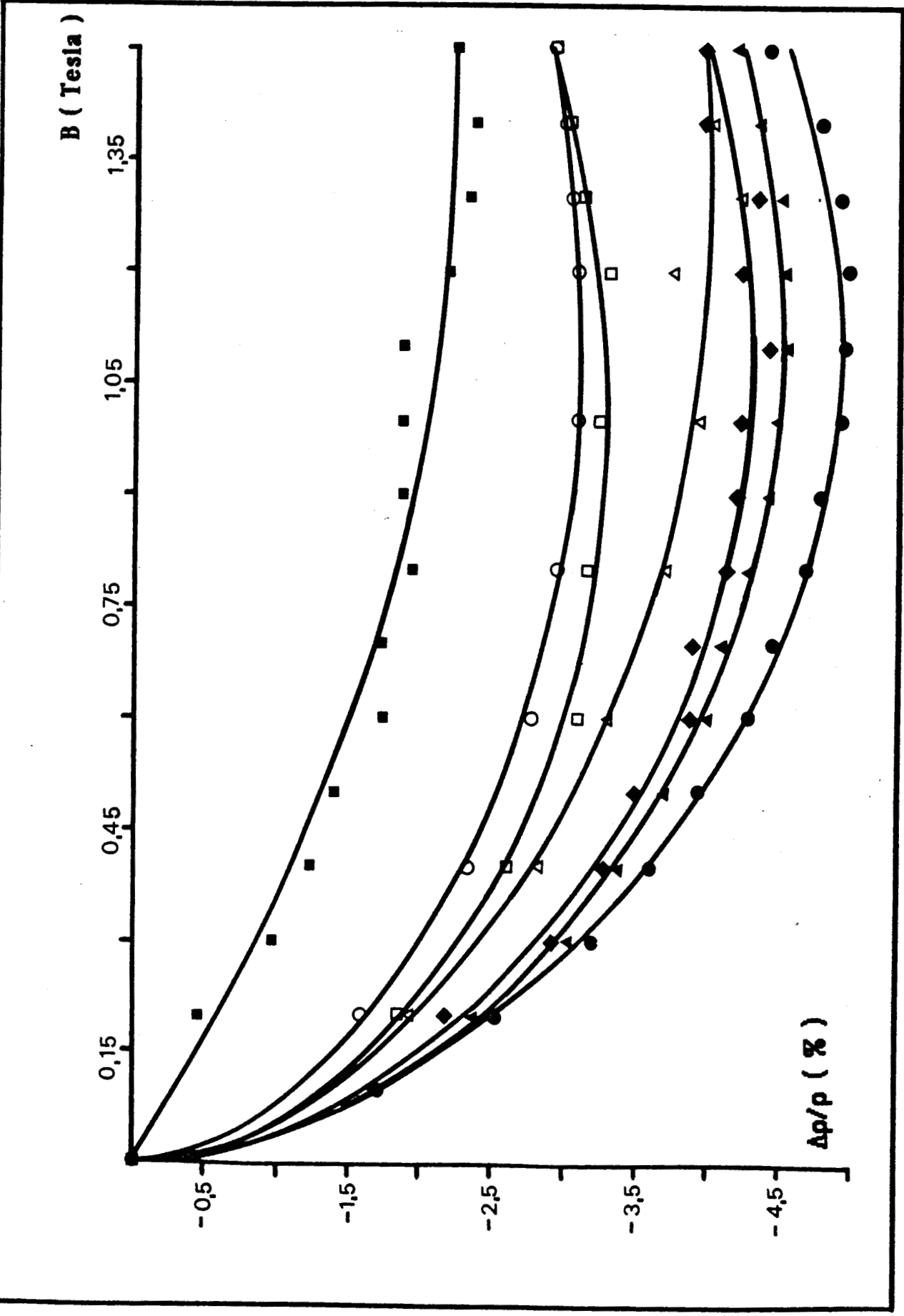


FIGURE [IV-2-c] : Ajustement de la magnéto-résistance négative de l'échantillon S61 selon la loi empirique : $(\Delta\rho/\rho) = aB^b + cB^2$

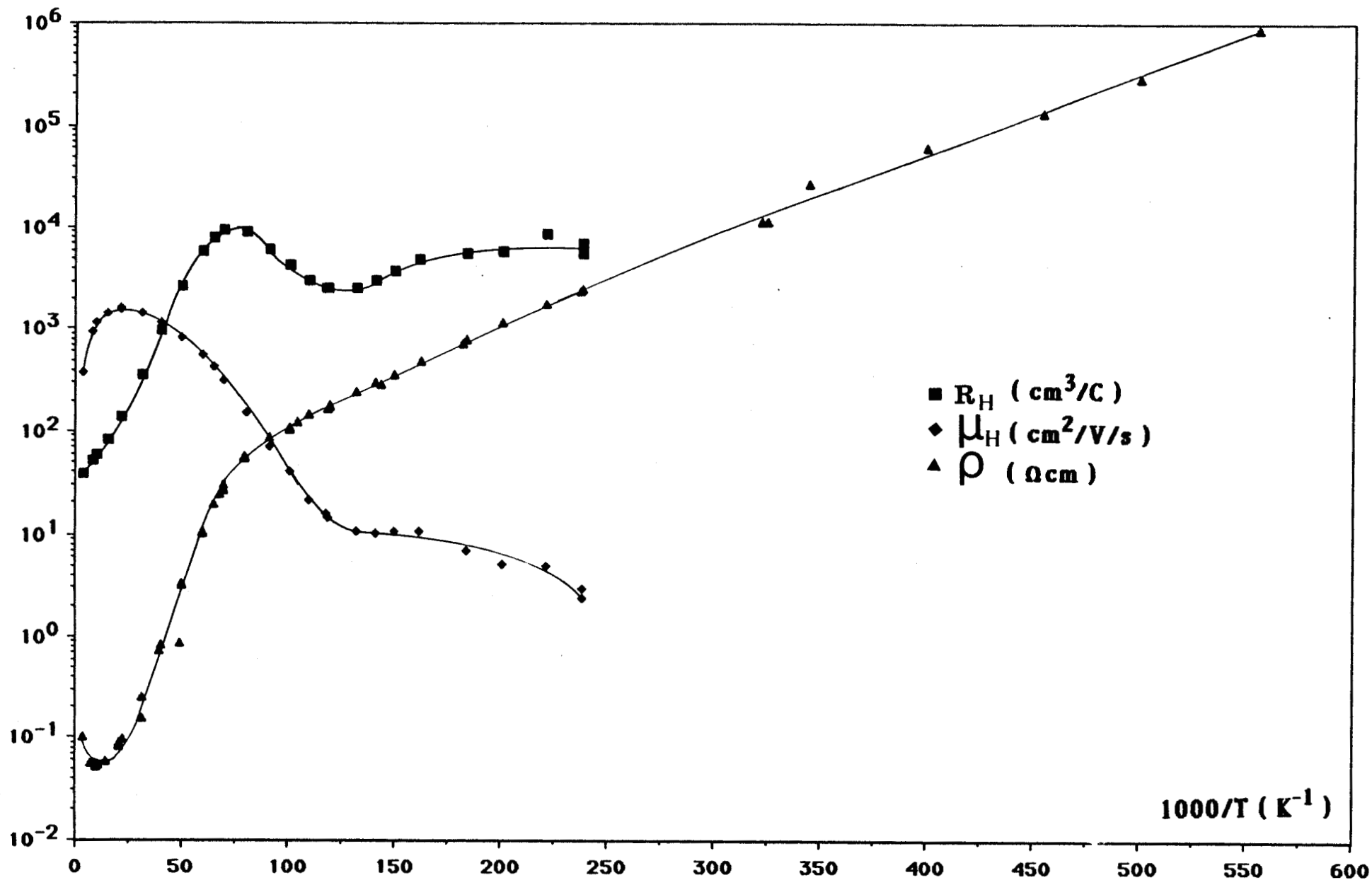


FIGURE [IV-3] : Variation de la constante de Hall, de la mobilité et de la résistivité de l'échantillon S1 en fonction de l'inverse de la température.

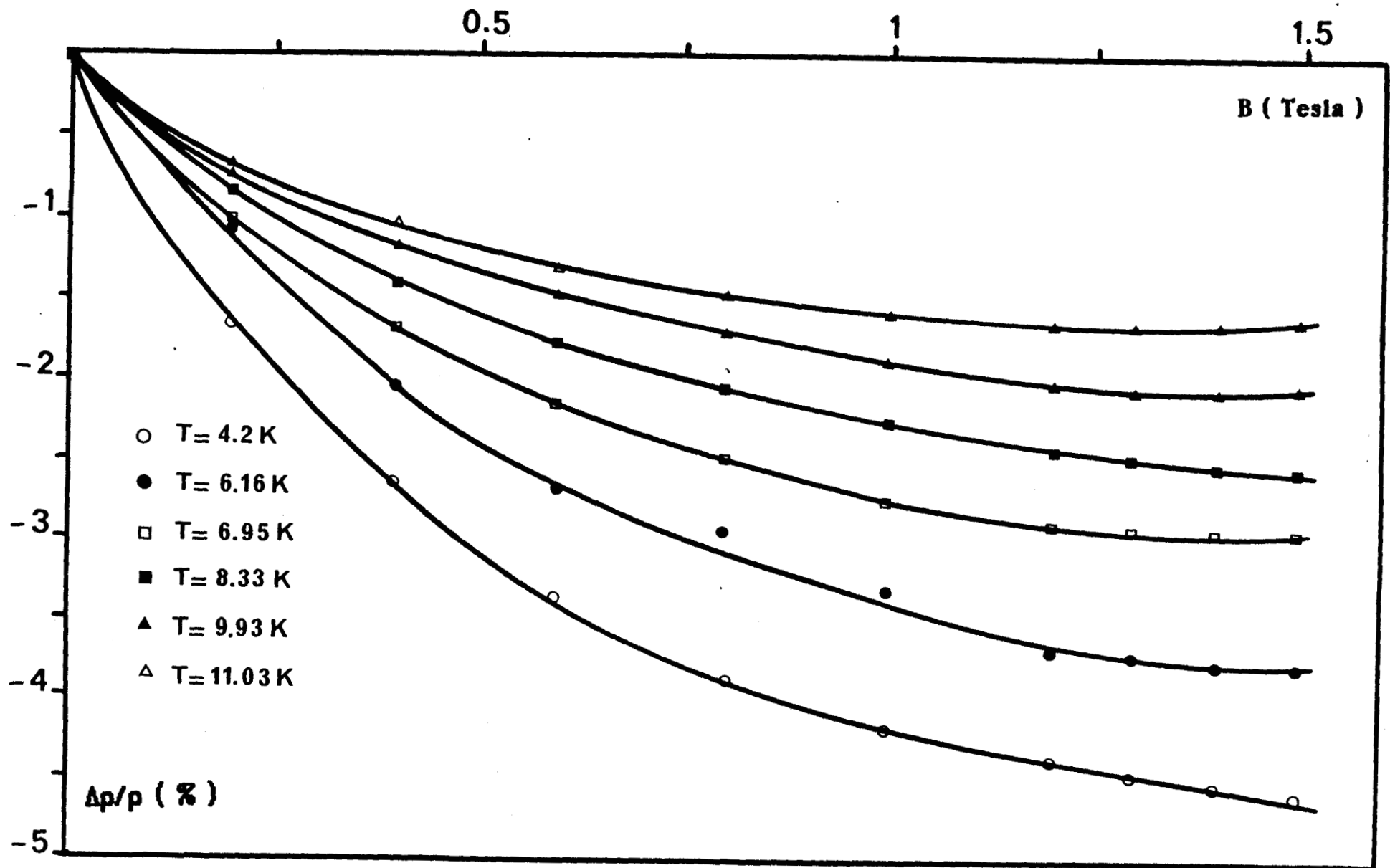


FIGURE [IV-4] : Variation de la magnétorésistance négative de l'échantillon-S1 en fonction du champ magnétique.

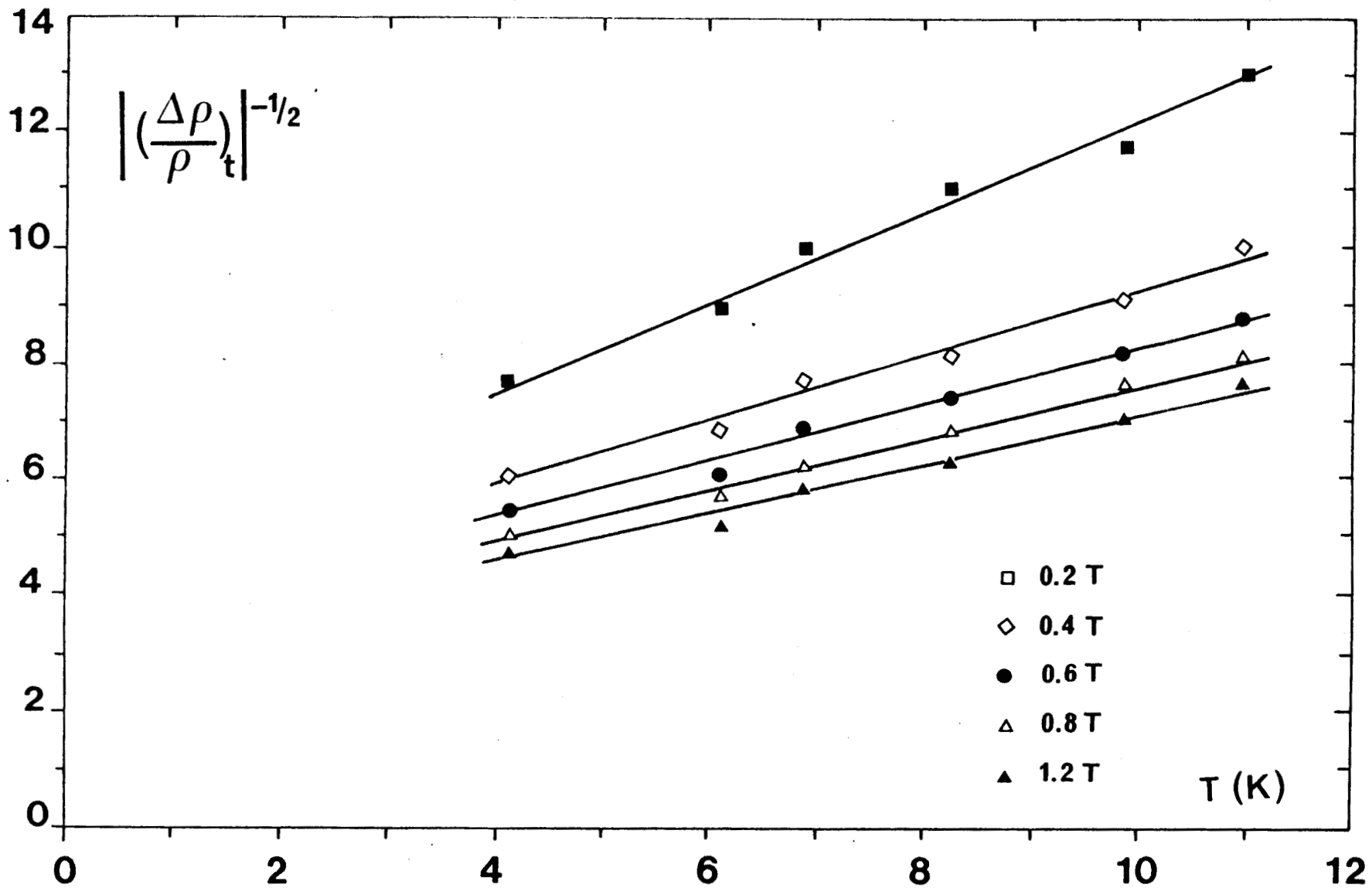


FIGURE [IV-5] : Variation de l'inverse de la racine carrée de la magnéto-résistance négative de l'échantillon S1 en fonction de la température.

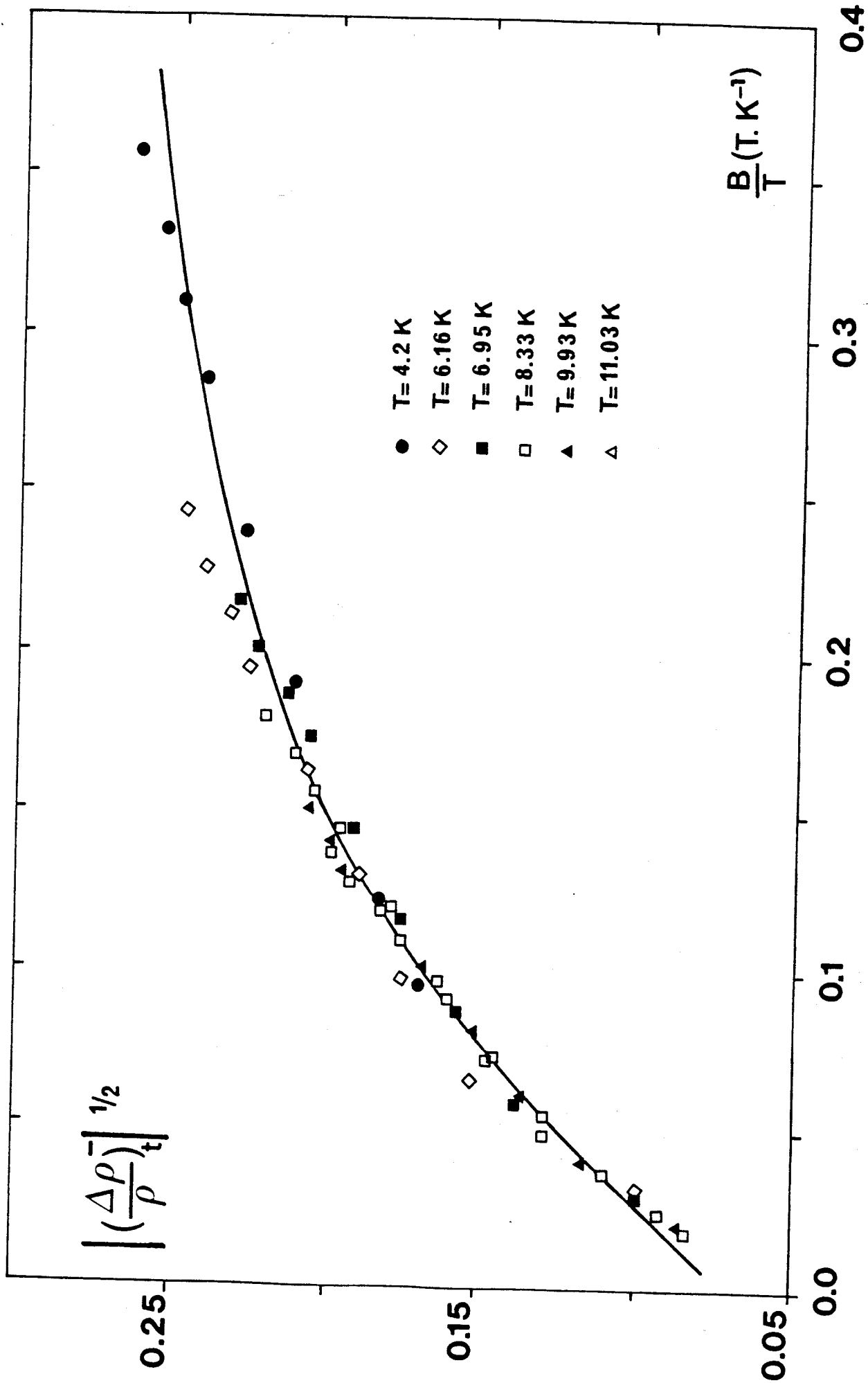


FIGURE [IV-6] : Ajustement de la racine carrée de la magnéto-résistance négative selon une loi de Langevin en fonction de (B/T) .

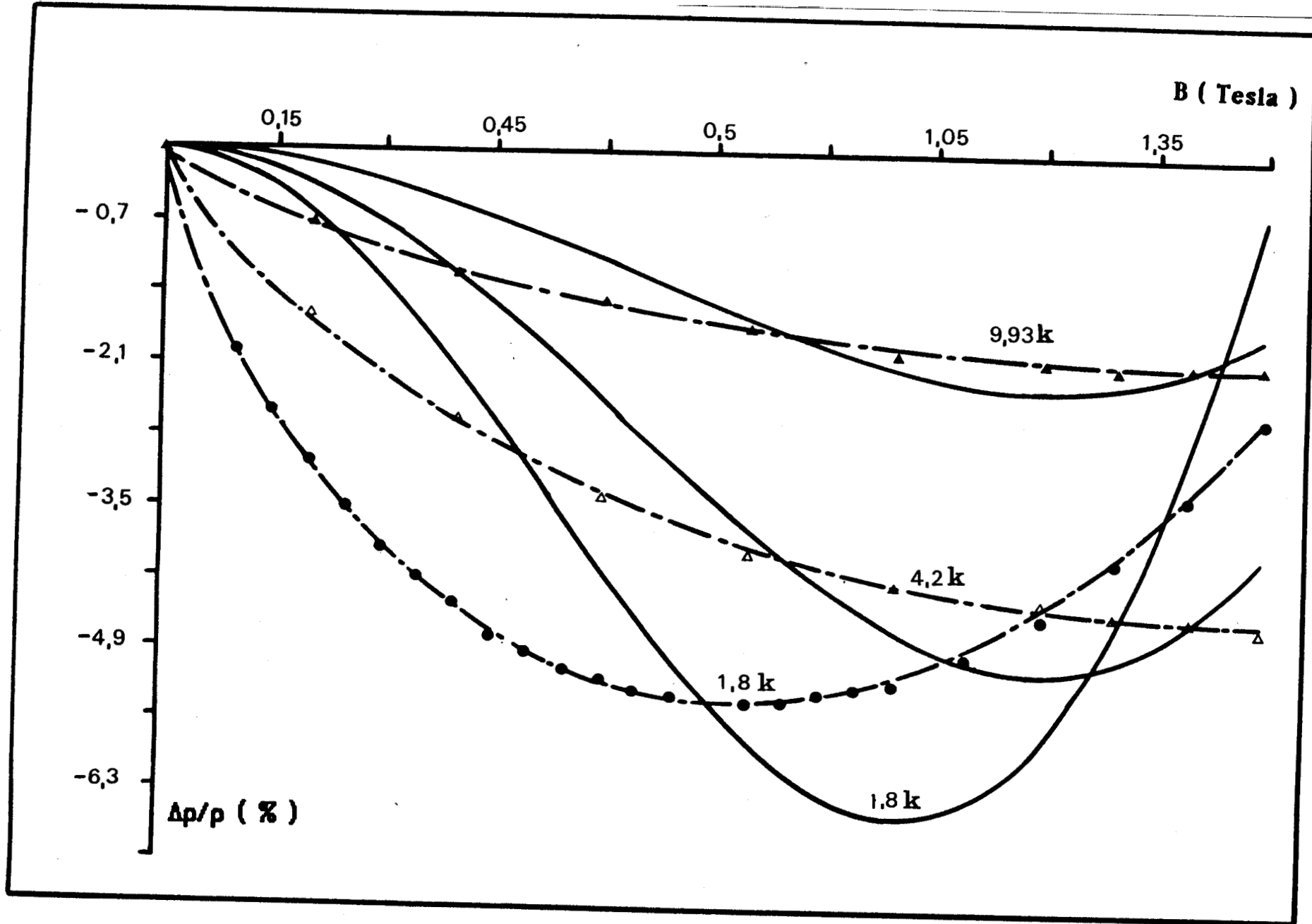


FIGURE [IV-7] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de l'effet Zeeman et du déplacement du front de mobilité suivant la loi : $(\Delta\rho/\rho) = \exp(aB^2)/\cosh(bB) - 1$.

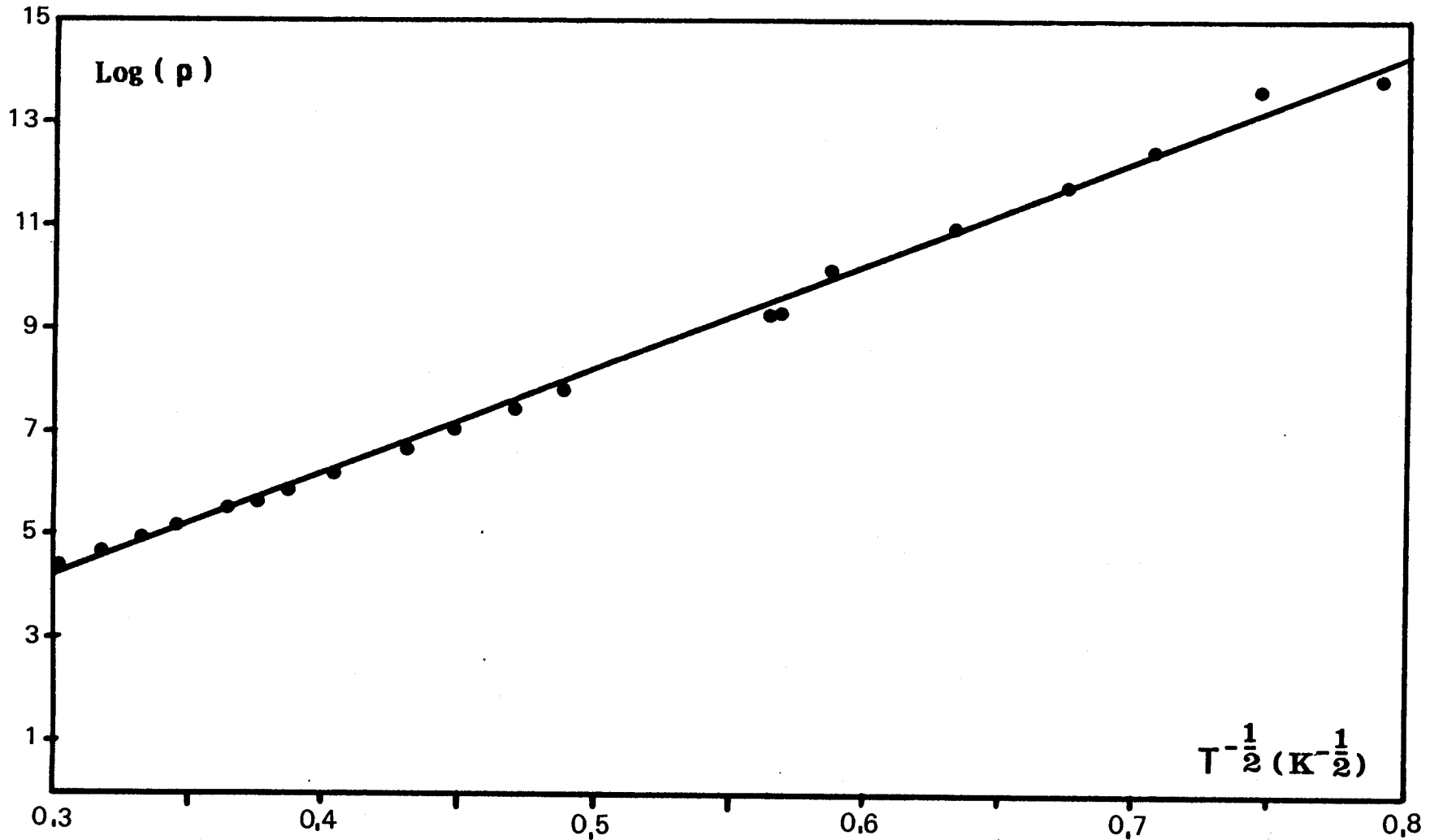


FIGURE [IV-8] : Ajustement du logarithme de la résistivité à basse température suivant une loi de saut à distance variable associée à l'existence d'un "gap" de Coulomb :

$$\rho = \rho_{03} \exp [- (T_0/T)^{1/2}].$$

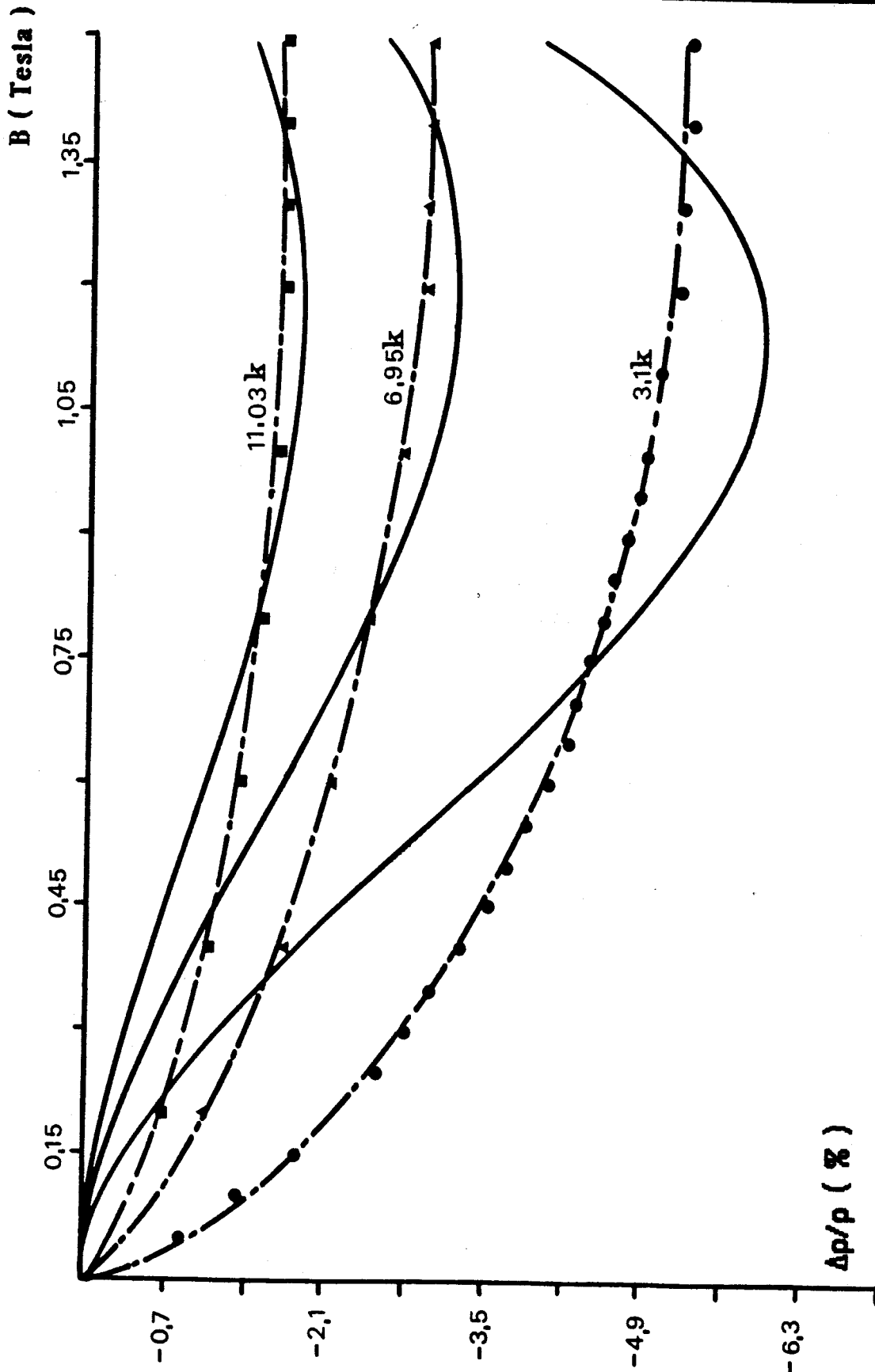


FIGURE [IV-9] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de l'effet Zeeman et du déplacement du front de mobilité suivant la loi : $(\Delta\rho/\rho) = \exp(aB^2)/\cosh(bB) - 1$.

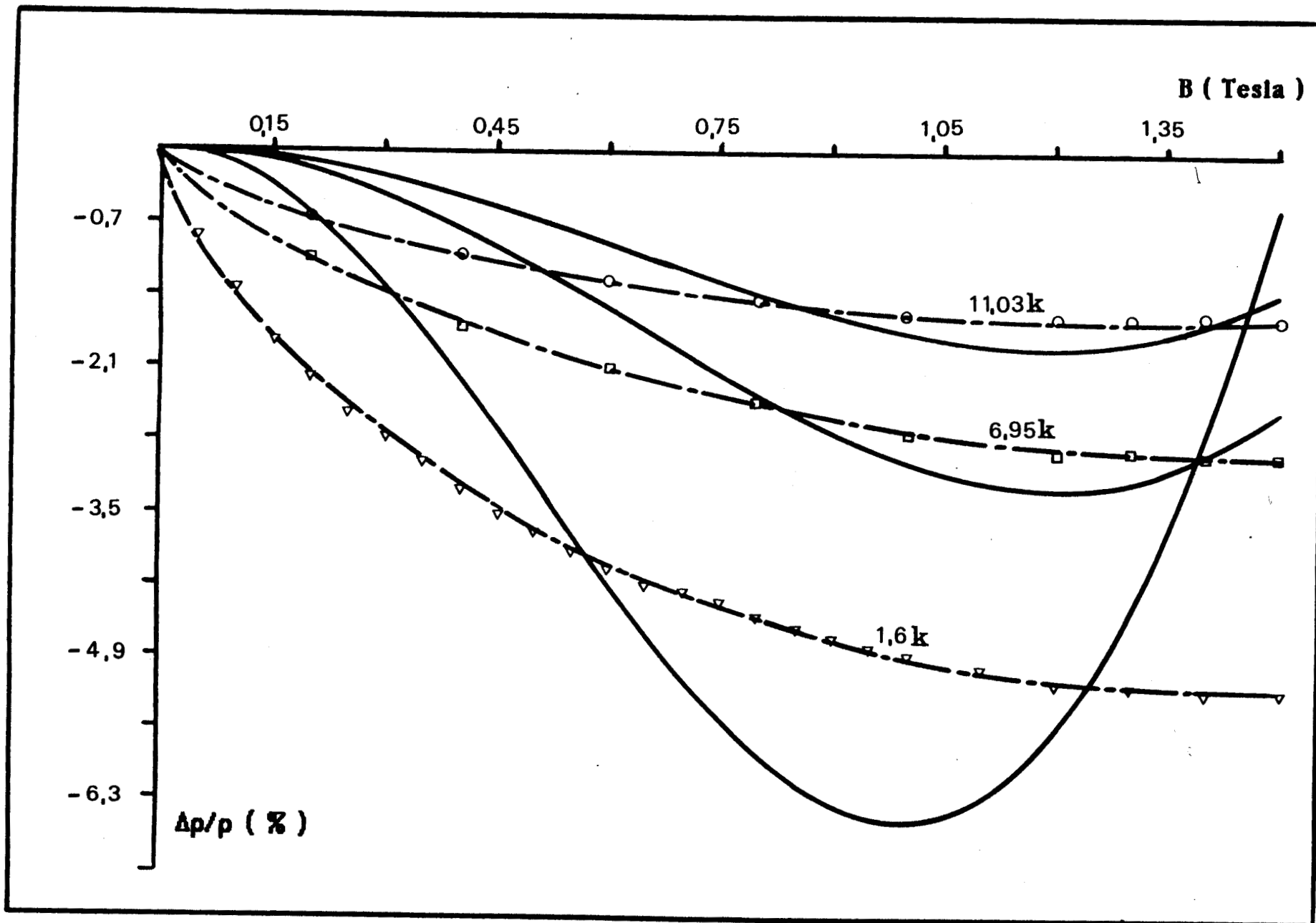


FIGURE [IV-10] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de l'effet Zeeman, du déplacement du front de mobilité et de la composante positive suivant la loi :

$$(\Delta\rho/\rho) = \exp(aB^2)/\cosh(bB) + \exp(cB^2) - 2.$$

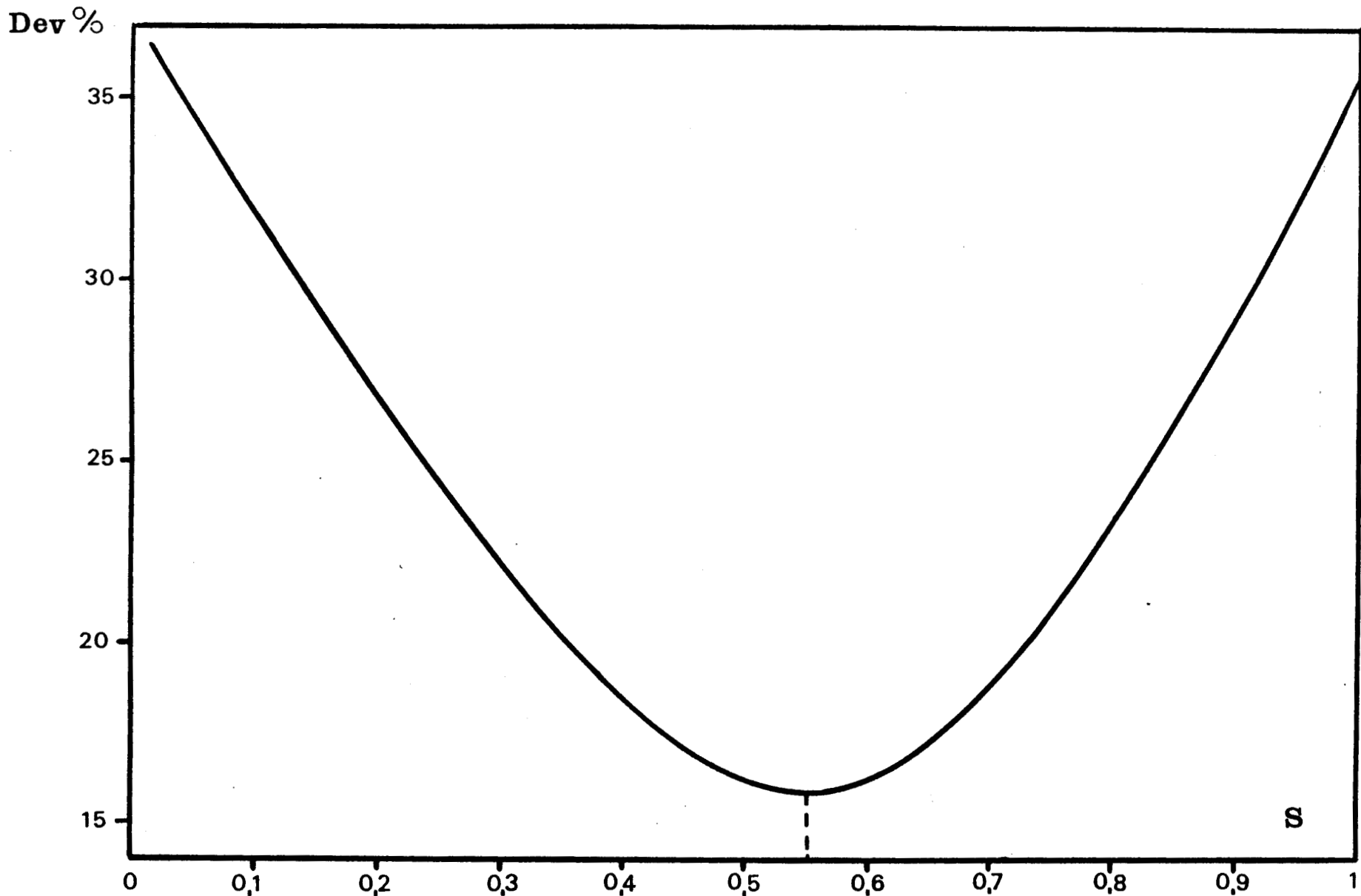


FIGURE [IV-11] : Variation de l'écart quadratique moyen %Dev en fonction de l'exposant "s" dans la loi de conduction par saut à distance variable : $\sigma = \sigma_{03} \exp [- (T_0/T)^s]$.

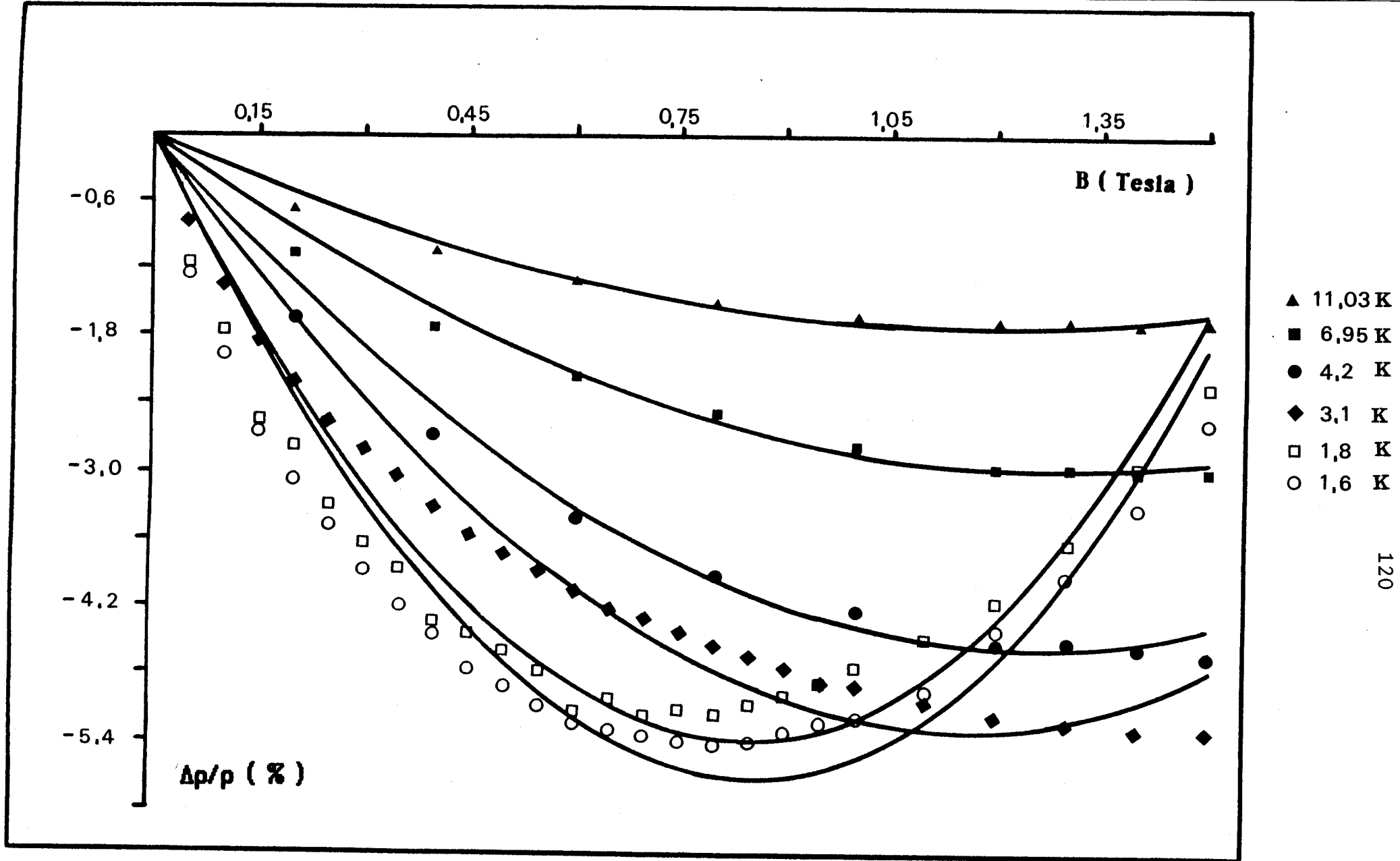


FIGURE [IV-13] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de la diffusion par une impureté intermédiaire et de la composante positive suivant la loi :

$$(\Delta\rho/\rho) = a(T) B + \exp (b B^2) - 1.$$

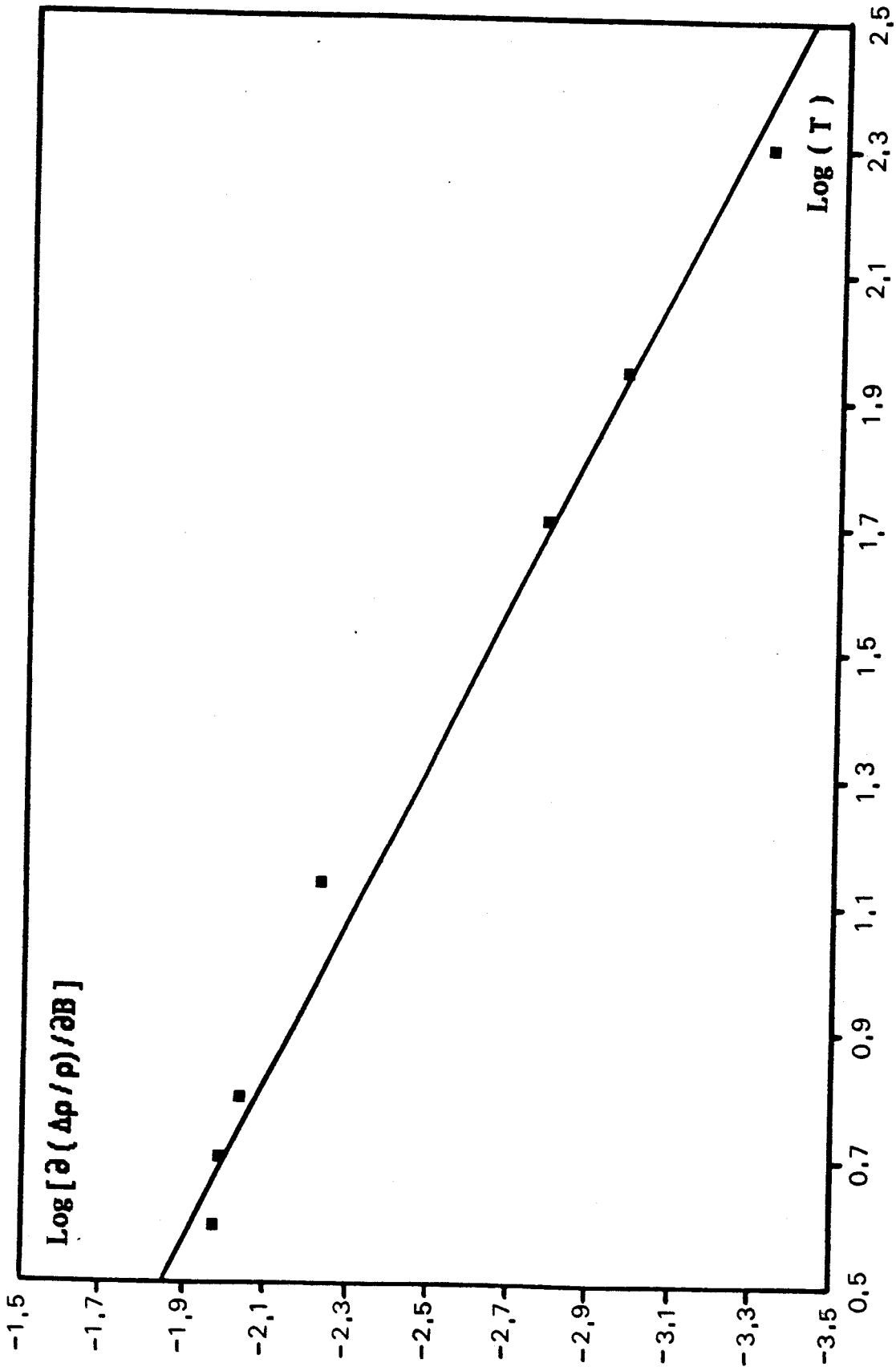


FIGURE [IV-14] : Variation du logarithme de la pente de la magnétorésistance en négative $a(T)$ en fonction du logarithme de la température.

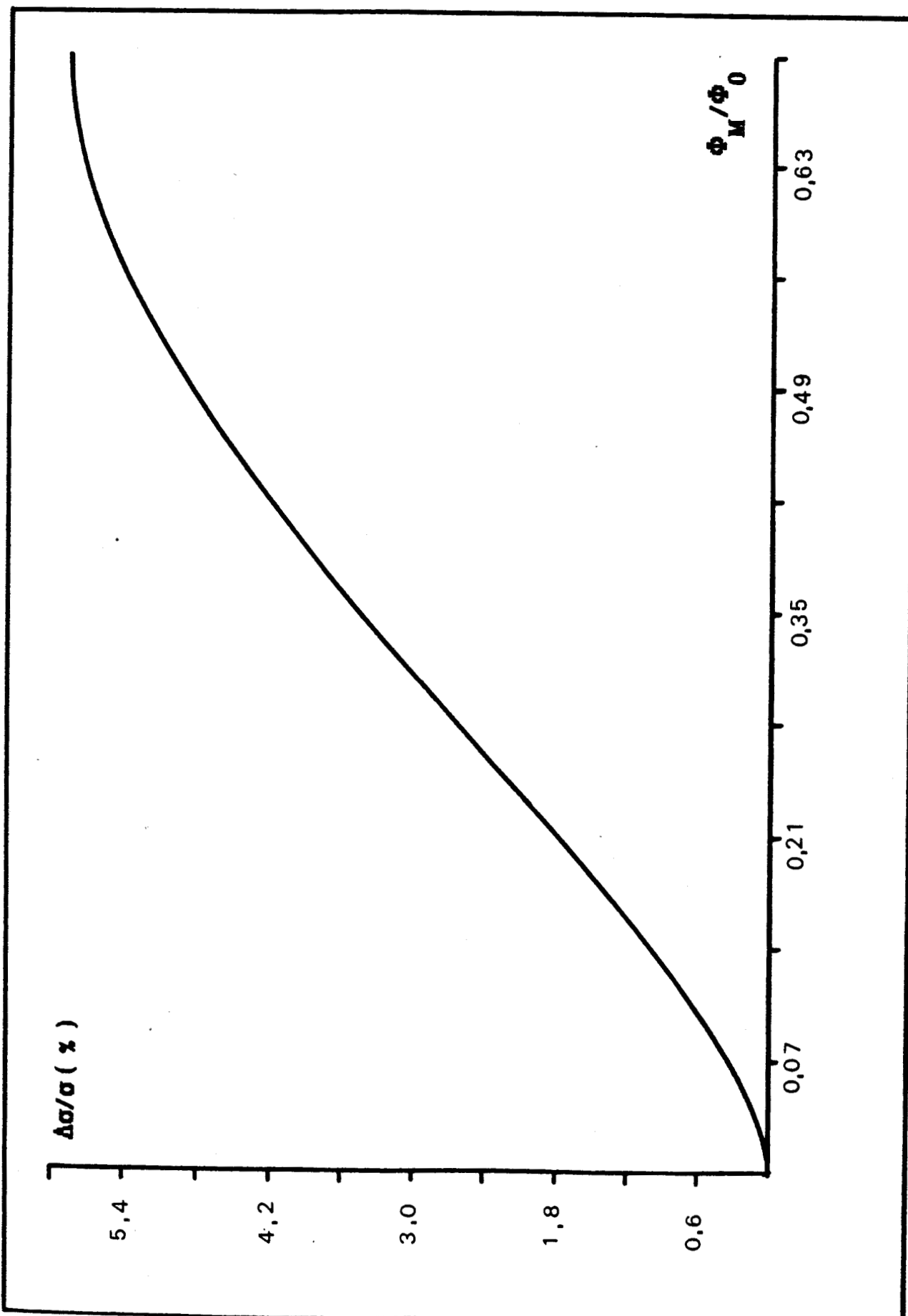


FIGURE [IV-16] : Magnétoconductivité associée à l'effet orbital extraite de l'article de Entin-Wohlmann, Imry et Sivan (Phys. Rev B 40, 8342 (1989)).

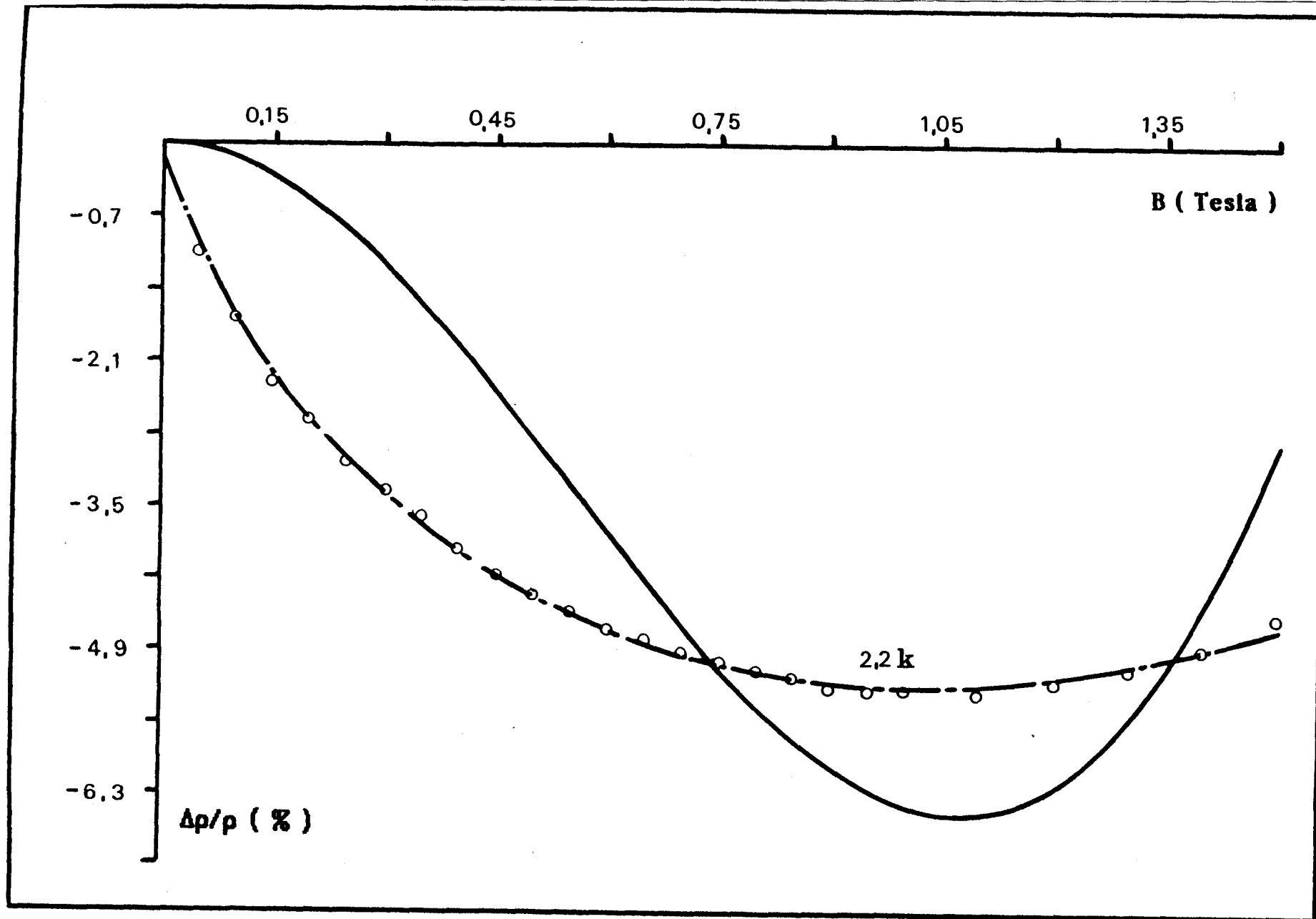


FIGURE [IV-17] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de l'effet Zeeman, de l'effet orbital et de la composante positive suivant la loi :

$$(\Delta\rho/\rho) = (\Delta\rho/\rho)_{\text{orbital}} + \exp(aB^2)/\cosh(bB) + \exp(cB^2) - 2.$$

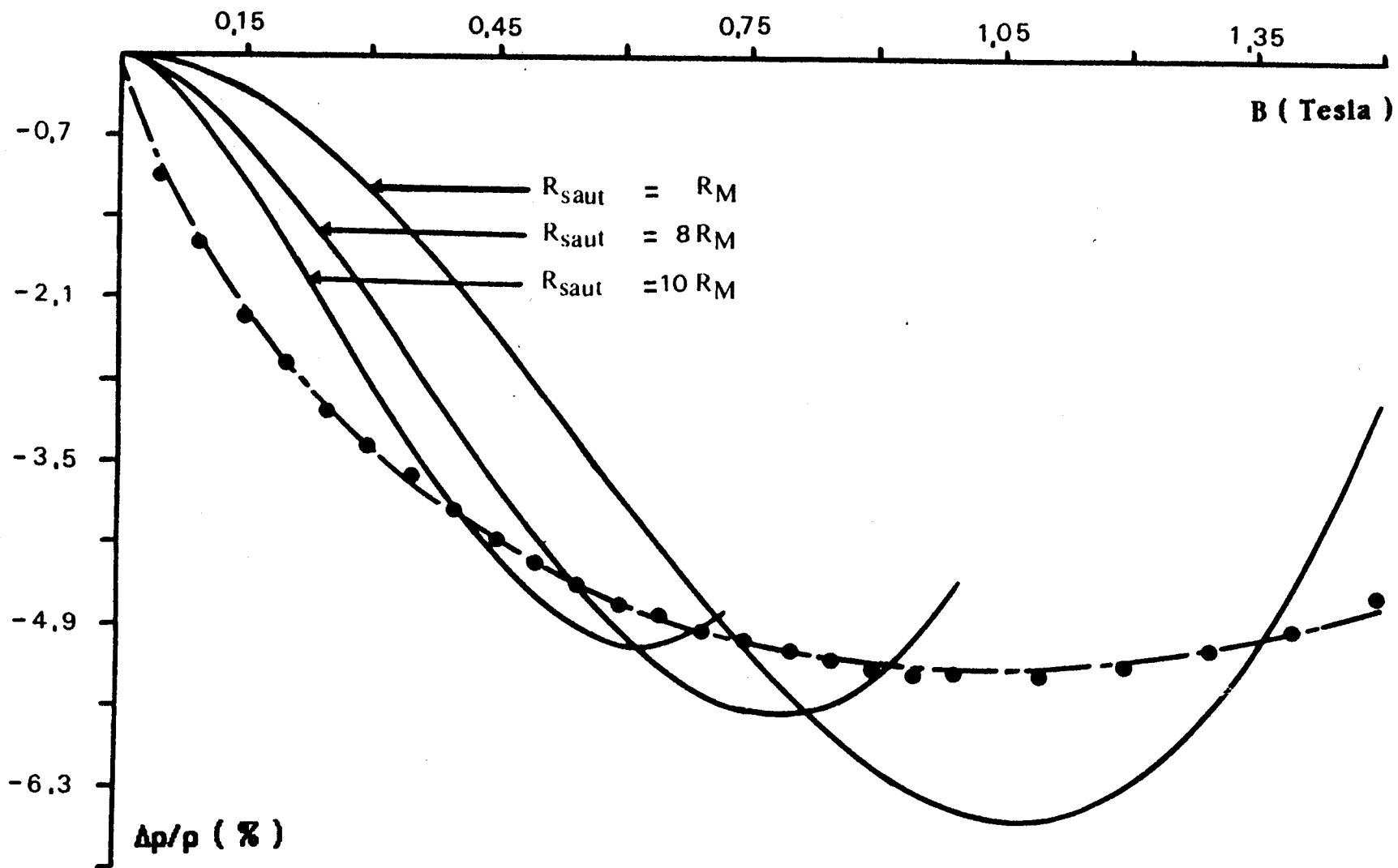


FIGURE [IV-18] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte de l'effet Zeeman, de l'effet orbital et de la composante positive en faisant varier la distance moyenne de saut suivant la loi :

$$(\Delta\rho/\rho) = (\Delta\rho/\rho)_{\text{orbital}} + \exp(aB^2)/\cosh(bB) + \exp(cB^2) - 2.$$

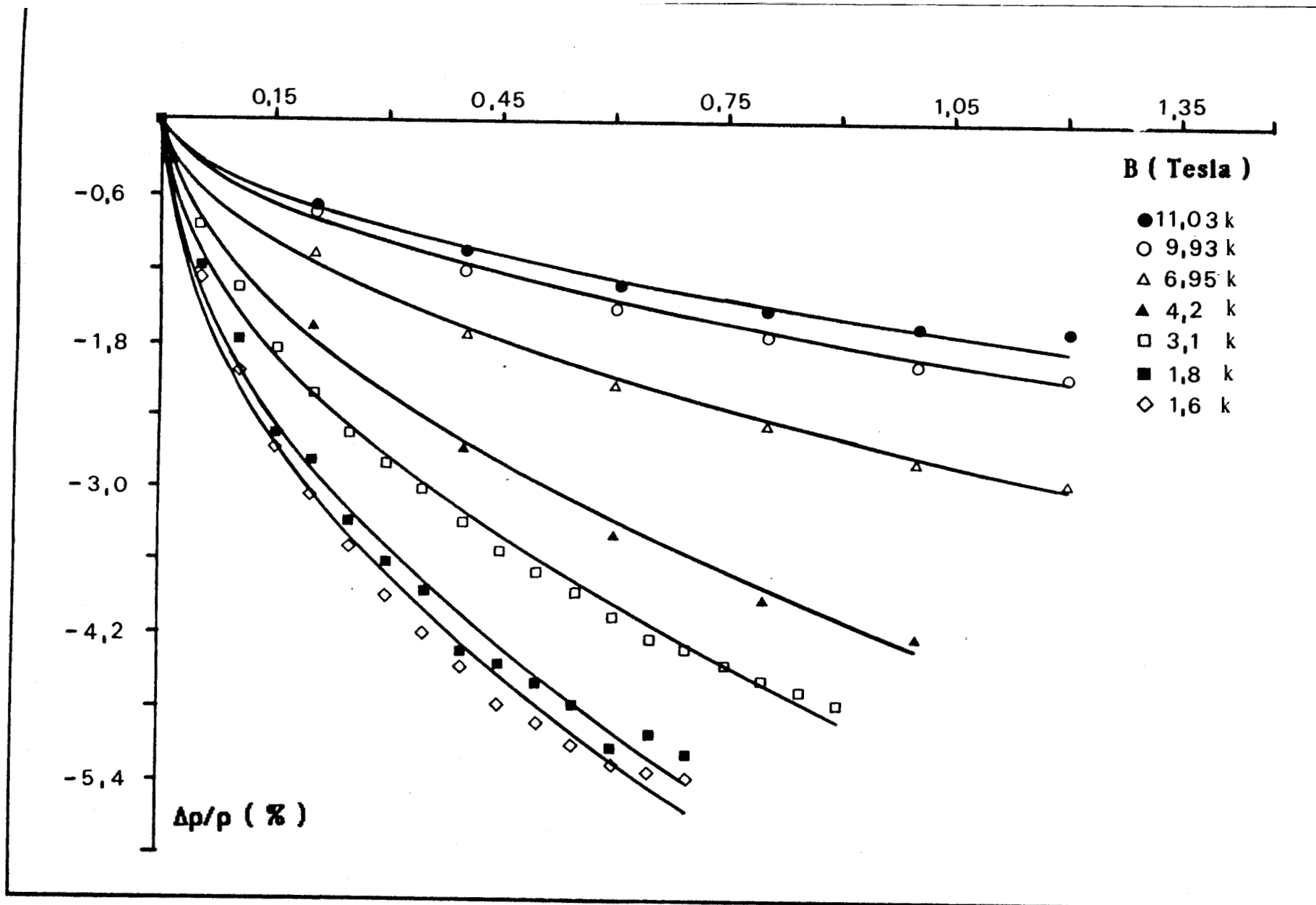


FIGURE [IV-19] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte du déplacement du front de mobilité et des interférences quantiques suivant la loi de Alt'shuler :

$$(\Delta\rho/\rho) = \exp(-a B^{1/2\nu}) - 1.$$

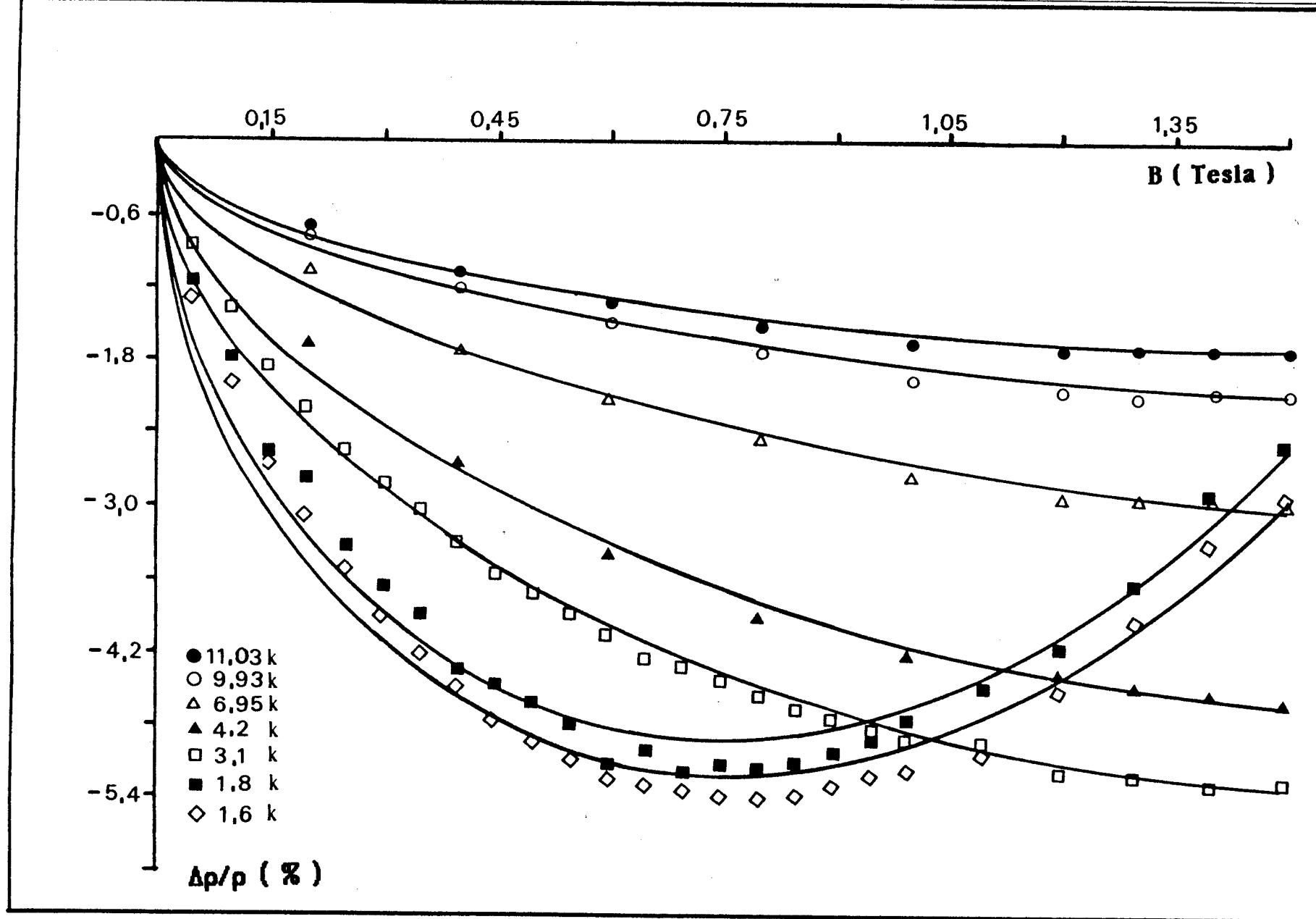


FIGURE [IV-20] : Ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte du déplacement du front de mobilité, des interférences quantiques et de la composante positive suivant la loi : $(\Delta\rho/\rho) = \exp(-a B^{1/2\nu}) + \exp(cB^2) - 2$.

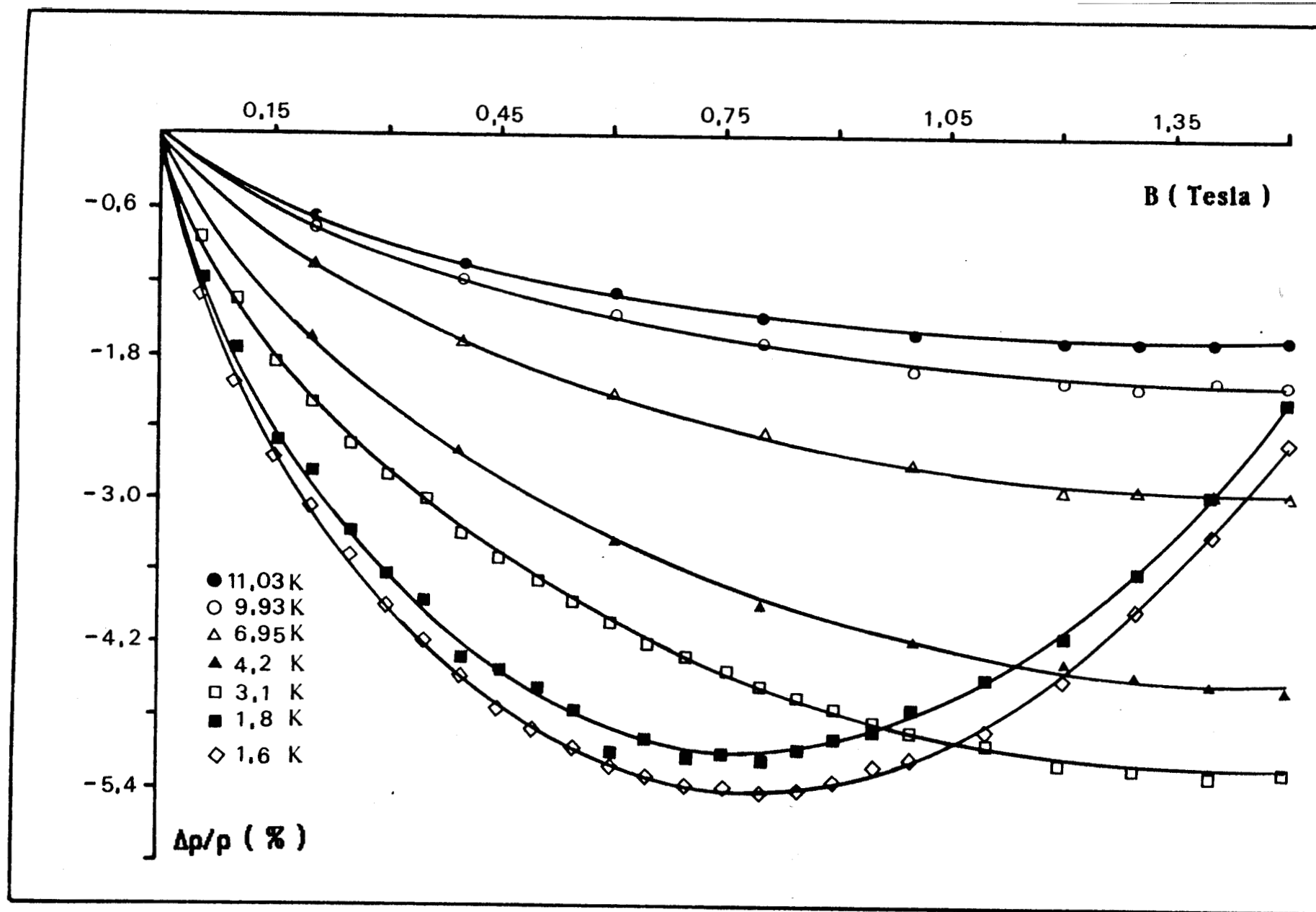


FIGURE [IV-21] : Optimisation de l'ajustement de la magnétorésistance négative en tenant compte du déplacement du front de mobilité, des interférences quantiques et de la composante positive suivant la loi :

$$(\Delta\rho/\rho) = \exp(-a B^{1/2\nu}) + \exp(cB^2) - 2.$$

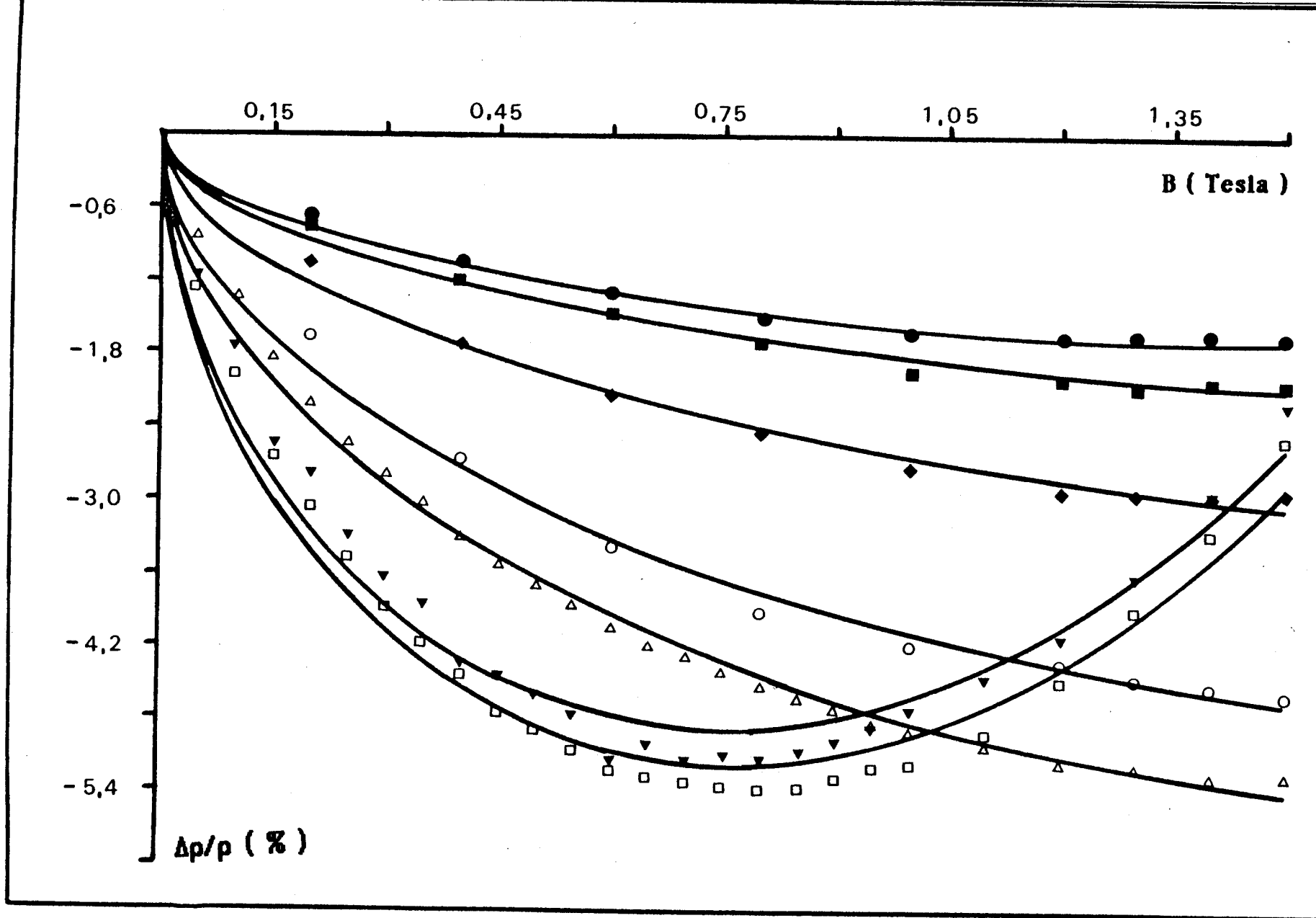


FIGURE [IV-23] : Ajustement de la magnétorésistance en tenant compte des interférences quantiques et de la composante positive suivant la loi de Zhao et al :

$$(\Delta\rho/\rho) = \gamma(T) (R_M/L_H) + \exp(cB^2) - 1.$$

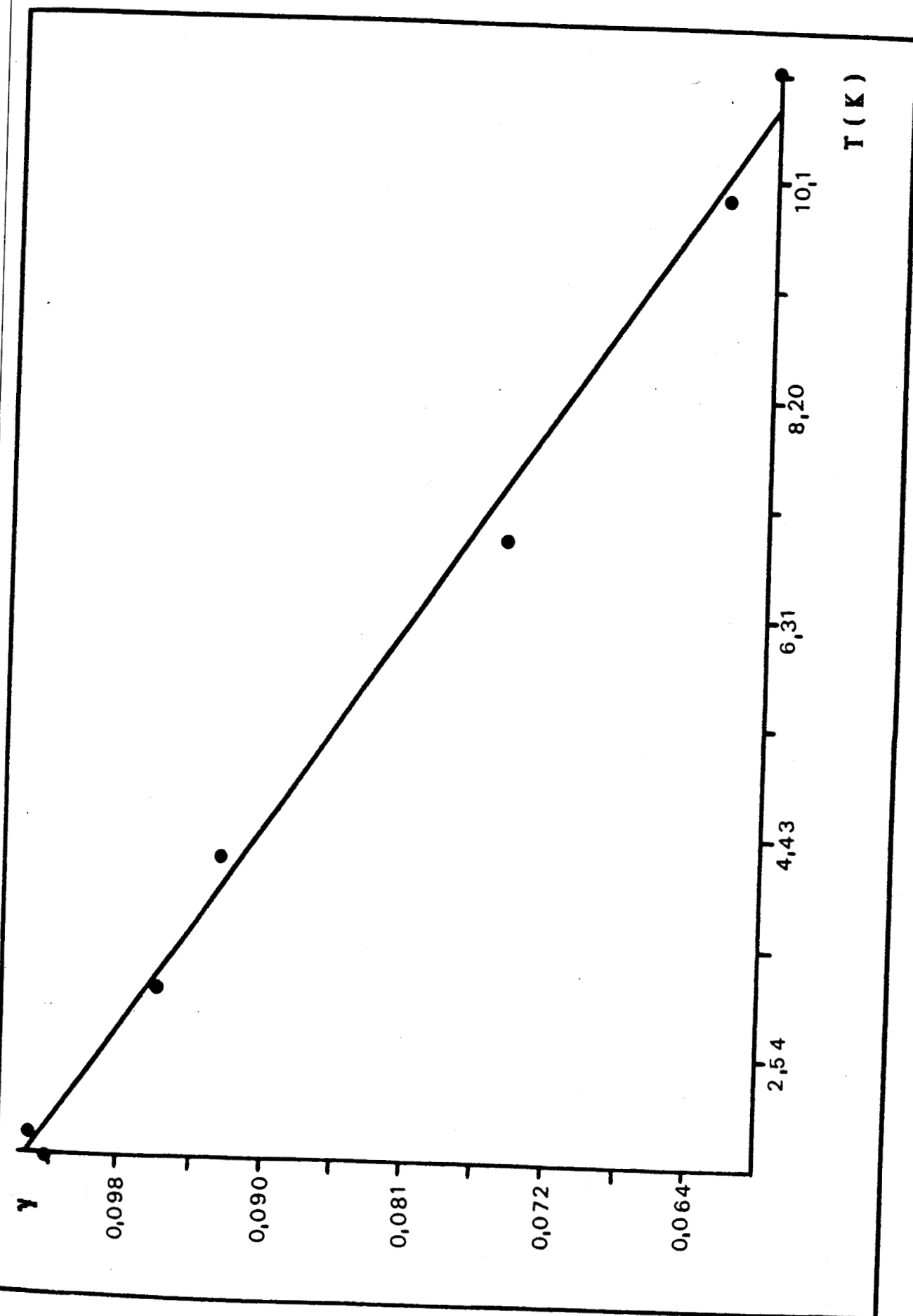


FIGURE [IV-24] : Variation de $\gamma(T)$ en fonction de la température.

CONCLUSION

Dans le travail que nous avons présenté, une étude systématique des mécanismes de conduction à basse température dans CdAs₂ est entreprise. Les résultats obtenus dans la première partie montrent que tous les échantillons sont situés du côté isolant de la transition métal-isolant. Le comportement de la conductivité suggère l'existence de deux processus de conduction. Le premier est associé à l'excitation des électrons dans la bande de conduction à haute température et le second dominant à plus basse température s'effectue par saut dans la bande d'impuretés.

Pour étudier ces mécanismes, nous avons utilisé différentes méthodes permettant le calcul des énergies d'ionisation des donneurs et des énergies de saut. Le problème de l'ajustement de la conductivité mesurée par l'expression, $\sigma = \sigma_{01} \exp[-(\epsilon_1/k_B T)] + \sigma_{03} \exp[-(T_0/T)^{1/n}]$, a pu être résolu.

Pour déterminer précisément le type conduction à basse température, nous avons réalisé un ajustement de la conductivité expérimentale par l'expression, $\sigma = \sigma_0 \exp[-(T_0/T)^s]$. Le calcul du pourcentage de déviation montre que l'exposant s ($s=1/2$) trouvé suggère une conduction par saut à distance variable associée à l'existence d'un "gap" de Coulomb dû aux interactions électron-électron.

Dans la suite de ce travail nous avons étudié la magnétorésistance négative du côté isolant de la transition de Anderson en prenant en considération la composante positive. Le premier modèle empirique étudié suggère une variation de la magnétorésistance négative, proportionnelle à B^x où $0 < x < 1$. Ce type de variation, observé du côté métallique de la transition, ne nous a pas permis d'en donner une interprétation physique.

La première interprétation possible de ce phénomène a été réalisée grâce à la théorie développée par Toyozawa et selon laquelle un processus de diffusion supplémentaire par des moments magnétiques localisés est pris en compte. La magnétorésistance ainsi traitée dans CdAs₂ possède le comportement d'un système de spins paramagnétiques et sa variation est associée à une loi de Curie-Weiss dont la température de Curie est négligeable.

La variation de l'inverse de la racine carrée de la magnétorésistance en fonction de (B/T) montre que celle-ci peut être correctement décrite par la fonction de Langevin d'un système de spins paramagnétiques. Le moment magnétique effectif ainsi trouvé est $\mu^* = 8\mu_B$. On notera cependant que cette valeur de μ^* semble relativement élevée. Il est par conséquent difficile de confirmer la validité de ce modèle étant donné notre ignorance quant à la présence d'impuretés magnétiques dans CdAs₂.

Un modèle plus récent proposé par Fukuyama et Yosida prend en compte l'action du champ magnétique sur les niveaux d'énergie dans la bande d'impuretés et sur le front de mobilité, lorsque la conduction a lieu par saut à distance variable. La comparaison avec les résultats expérimentaux montre que ce modèle décrit correctement l'aspect qualitatif de la magnétorésistance négative, mais les écarts entre l'expérience et la théorie restent assez importants.

Nous avons ensuite étudié un modèle développé par Schirmacher. Il considère l'influence des effets d'interférences et prend en compte la diffusion par une impureté entre chaque saut. Dans ce cas la magnétorésistance négative varie linéairement avec les champs magnétiques faibles. La confrontation de ce résultat à nos mesures a montré que ce modèle est plus adéquat que celui étudié précédemment.

Le même comportement de la magnétorésistance avec le champ magnétique est obtenue lors d'une simulation en prenant en compte la diffusion par plusieurs impuretés et la variation de la longueur de localisation.

La nature orbitale de la magnétorésistance négative ayant été prouvée, Entin-Wohlman et al ont calculé son expression théorique. L'ajustement avec nos résultats expérimentaux et ce malgré la considération d'un effet supplémentaire ne donne pas de résultats appréciables. En effet ce modèle suggère une variation quadratique de la magnétorésistance à champs faibles alors que dans notre cas elle varie en B^x où $0 < x < 1$.

Un modèle développé par Alt'shuler prend en compte les effets d'interférences ainsi que l'action du champ magnétique sur la longueur de localisation et sur le front de mobilité. L'ajustement de nos résultats expérimentaux avec l'expression théorique montre que ce modèle décrit parfaitement la magnétorésistance négative dans un régime de conduction par saut à distance variable.

Le dernier modèle que nous avons étudié a été proposé par Zhao et al. Dans ce cas la magnétorésistance aurait un comportement universel indépendant des potentiels de diffusion. La simulation d'un réseau bidimensionnel et un calcul théorique ont permis de montrer que celle-ci varie en $B^{1/2}$ à champs faibles. Les résultats ainsi obtenus sont en assez bon accord avec nos mesures, mais le modèle proposé par Alt'shuler est celui rendant le mieux compte de l'expérience.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev 109, 1492 (1958).
- [2] N.F. Mott, Phil Mag 26, 1015 (1972).
- [3] E. Abrahams, D.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett 42, 673 (1979).
- [4] N.F. Mott, Phil. Mag. B 60, 365 (1989).
- [5] G.Biskupski, A. El Kaaaouachi, J Phys. Cond Mater. (à paraitre)
- [6] N.F. Mott, E.A Davis, Electronic process in non crystalline materials Clarendon Press - Oxford 1979.
- [7] D. Ferre, H. Dubois, G. Biskupski, Phys. Stat. Sol. (b) 70, 81 (1975).
- [8] A. L. Efros, B. I. Shklovskii, J. Phys. C. State Phys. 8, L49-L51 (1979).
- [9] B. I. Shklovskii, A. L. Efros, Electronic Properties of Doped Semiconductors (Springer Verlag).
- [10] L. Cervinka, A. Hruby, Acta Cryst. B 26, 457 (1970).
- [11] L. Cervinka, R. Hoseman, W. Vogel, J. non Cryst.Solids 3, 294 (1970).
- [12] D. Long, J. Applied Physics 33, 1682 (1962).
- [13] Landolt-Börnstein, Enzyklopädie, Band 17e, Ed Springer Verlag, Berlin (1983).
- [14] J P. Spriet, Thèse de Doctorat, Université de Lille I (1985).
- [15] G. Biskupski, Thèse d'état, Université de Lille I (1982).
- [16] N. F. Mott, M. Pepper, S. Pollit, R. H. Wallis, C. J. Adkins, Proc. Roy. Soc. London A, 345, 169 (1975).
- [17] H. Kamimura, N. F. Mott, J. Phys. Soc. Japan, 40, 1351 (1976).
- [18] H. Brooks, Adv. Electronics and Electron Phys., 7, 158 (1955).
- [19] J. H. De Boer, W. C. Van Geel, Physica 2, 186 (1935).
- [20] E. Zdanowicz, G. Biskupski, H. Dubois, A. A. Oubraham, Acta Phys. Pol. A 75, 347 (1989).
- [21] A. Vapaille, Physique des Dispositifs à Semiconducteur, Ed Masson & Cie (1970).
- [22] M. A. Lampert, Phys. Rev 97, 352 (1955).
- [23] C. Kittel, A. H. Mitchell, Phys. Rev 96, 1488 (1955).
- [24] W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev 98, 915 (1955).
- [25] A. Miller, E. Abrahams, Phys. Rev 120, 745, (1960).
- [26] F. R. Allen, G. L. Adkins, Phil. Mag. 26, 1027 (1972).
- [27] H. Fritzsche, M. Cuevas, Phys. Rev. 119, 4 (1960).
- [28] O. V. Emelyanenko, T. S. Lagunova, P. N. Nasledov, P. N. Nedologo, J. N. Timchenko, Sov. Phys. Semicond. 7, 1919 (1973).
- [29] T. Dietl, J. Antoszewski, L. Antoszewski, L. Swierkowski, Phys. of Semicond., Physica 117 B, 491 (1983).
- [30] B. I. Shklovskii, Sov. Phys. Semicond. 6, 1053 (1973).
- [31] H. Fritzsche, Phys. Rev 99, 406 (1955).
- [32] R. Mansfield, L. Kuztalan, J. Phys. C, 11, 4157 (1978).
- [33] G. Biskupski, H. Dubois, in Recent Developpement in Condensed Matter. Physics, (1981) (Plenum Publishing Cop.) Vol. 3, p 29.

- [34] J. R. Sites, A. K. Nedoluha, Phys. Rev. 24, 4309 (1981).
- [35] J. A. Chroboczek, R. J. Sladek, Phys. Rev 151, 595 (1966).
- [36] N. Mikoshiba, Phys. Rev. 127, 1961 (1962).
- [37] B. I. Shklovskii, Nguyen Van Lien, Sov. Phys. Semicond. 12, 796 (1972).
- [38] B. I. Shklovskii, Sov. Phys. Semicond. 8, 268 (1973).
- [39] I. V. Emel'yanenko, K. G. Masagutov, D. N. Nasledov, I. N. Timchenko, Sov. Phys. Semicond. 9, 330 (1975).
- [40] H. Kahlert, G. Landwehr, A. Schachetski, H. Salow, Z. Physik B, 24, 361, (1976).
- [41] J. A. Chroboczek, Phil. Mag. B6, 933 (1980).
- [42] B. Movaghar, G. W. Sauer, Solid state Comm. 35, 841 (1980).
- [43] R. P. Khosla, J. R. Fischer, Phys. Rev. B2, 4084 (1970).
- [44] Y. Toyozawa, J. Phys. Soc. Japan 17, 986 (1962).
- [45] A. A. Oubraham, G. Biskupski, E. Zdanowicz, Solid state comm. 77, 351 (1991).
- [46] C. D. Kourkoutas, P. D. Bekris, G. J. Papaioannou, P. C. Euthymiou, Solid State comm. 55, 881 (1985).
- [47] G. Biskupski, H. Dubois, Solid state comm. 28, 601 (1978).
- [48] L. Halbo, R. J. Sladek, Phys. Rev. 173, 794 (1968).
- [49] J. F. Blatt, Physics of Electronic Conduction in Solids, Mc Graw Hill, p221 (1969).
- [50] N. F. Mott, W. D. Twose, Advan. Phys. 10, 107 (1961).
- [51] K. Yosida, Phys. Rev 107, 396 (1957).
- [52] G. Garyagydyev, O. V. Emel'yanenko, N. V. Zotova, T. S. Lagunova, D. N. Nasledov, Sov. Phys. Semicond. 7, 141 (1975).
- [53] H. Fukuyama, K. Yosida, J. Phys. Soc. Japan 46, 102 (1979).
- [54] K. Yosida, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Japan 48, 1879 (1980).
- [55] D. E. Khmel'nitskii, A. I. Larkin, Solid State comm. 39, 1069 (1981).
- [56] T. F. Rosenbaum, K. Andres, G. A. Thomas, R. N. Bhatt, Phys. Rev. Lett. 45, 1723 (1980).
- [57] W. N. Shafarman, D. W. Koon, T. G. Castner, Phys. Rev. B 40, 1216 (1989).
- [58] W. Schirmacher, Phys. Rev B41, 2461 (1960).
- [59] H. L. Zhao, B. Z. Spivak, M. P. Gelfand, S. Feng, Private communication.
- [60] T. Holstein, Phys. Rev. 124, 1329 (1961).
- [61] B. Movaghar, B. Pohlman, G. Sauer, Phys. Status Solidi B 97, 553 (1980).
- [62] B. Movaghar, W. Schirmacher, J. Phys. C 14, 859, (1980).
- [63] Qiu-yi Ye, B. I. Shklovskii, A. Zrenner, F. Koch, Phys. Rev. B 41, 8477 (1990).
- [64] V. L. Nguen, B. Z. Spivak, B. I. Shklovskii, Sov. Phys. JETP 62, 1021 (1985).
- [65] U. Sivan, O. Entin-Wohlman, Y. Imry, Phys. Rev. Lett. 60, 1566 (1988).

- [66] O. Entin-Wohlman, Y. Imry, U. Sivan, Phys. Rev. B 40, 8342 (1989).
- [67] B.I. Shklovskii, B. Z. Spivak, J. Stat. Phys. 38, 267 (1988).
- [68] S. Aboudy, R. Mansfield, L. C. Ming, Private communication.
- [69] B. L. Alt'shuler, A. G. Aronov, D. E. Khmel'nitskii, JETP lett. 36,195 (1982).
- [70] N. F. Mott, Adv. Phys. 21, 785 (1972).
- [71] E. Zdanowicz, K. G. Lisunov, JETP Lett. 51, 235 (1990).
- [72] Y. Ootuka, S. Kobayashi, S. Ikehada, J. F. Kondo, Solid state comm. 30, 169 (1979).
- [73] Z. Ovadyahu, Phys. Rev. B 33, 6552 (1986).
- [74] O. Faran, Z. Ovadyahu, Phys. Rev. B 38, 5457 (1988,I).
- [75] E. Medina, M. Kardar, Y. Shapir, X. R. Wang, Phys. Rev. Lett. 64, 1816 (1990).
- [76] B. Z. Spivak, Sov. Phys. JETP 60, 787 (1984).

ANNEXE 1

CALCUL VARIATIONNEL.

L'énergie d'ionisation des donneurs peut être déterminée par la résolution de l'équation de Schrödinger appliquée à des fonctions d'ondes hydrogénoïdes avec des masses effectives anisotropes.

Dans ce paragraphe nous allons calculer l'énergie d'ionisation des donneurs du CdAs₂ par la méthode variationnelle. Les fonctions d'ondes considérées sont du type hydrogénoïde, soit :

$$\Psi(x,y,z) = \left[\frac{a b^2}{\pi r_0^3} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{r_0} \left[a^2 x^2 + b^2 (y^2 + z^2) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (\text{III-3-2})$$

où $r_0 = [(\kappa \hbar^2)/(m e^2)]$ et a,b des paramètres à déterminer.

Cette fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger :

$$H \Psi = E \Psi \quad (\text{III-3-3})$$

$$\text{soit : } -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\alpha_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \Psi + V(r) \Psi = E \Psi \quad (\text{III-3-4})$$

$V(r)$ est le potentiel de Coulomb d'un électron dans le champ d'un atome donneur soit :

$$V(r) = -\frac{e^2}{\kappa r} \quad (\text{III-3-5})$$

où κ est la constante diélectrique, $m_1 = \alpha_1 m_0$ et $m_t = \alpha_2 m_0$.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, on multiplie l'équation (III-3-4) par l'expression conjuguée Ψ^* de Ψ et on intègre sur tout l'espace, d'où :

$$\int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = E \int_{\tau} \Psi^* \Psi d\tau \quad (\text{III-3-6})$$

Les fonctions d'ondes hydrogénoïdes étant normalisées, on a :

$$\int_{\tau} \Psi^* \Psi d\tau = 1 \quad (\text{III-3-7})$$

On remplace H par son expression dans (III-3-6) et on obtient :

$$\int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \left[\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\alpha_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \Psi dx dy dz$$

$$+ \int_{\tau} \Psi^* V(x,y,z) \Psi dx dy dz \quad (\text{III-3-8})$$

$$\int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi dx dy dz$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi dx dy dz$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi dx dy dz$$

$$- \frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi dx dy dz \quad (\text{III-3-9})$$

Pour calculer ces intégrales on passe aux coordonnées sphériques :

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \quad \text{et} \quad d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi. \quad (\text{III-3-10}) \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Le terme de l'exponentielle dans (III-3-2) s'écrit dans ce nouveau système :

$$\begin{aligned}
[a^2 x^2 + b^2 (y^2 + z^2)] &= [a^2 r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + b^2 r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + b^2 r^2 \cos^2 \theta] \\
&= [b^2 r^2 \sin^2 \theta (\sin^2 \phi + (a/b)^2 \cos^2 \phi) + b^2 r^2 \cos^2 \theta] \\
&= [b^2 r^2 \sin^2 \theta (\sin^2 \phi [1 + (a/b)^2 \cot^2 \phi] + \cos^2 \theta)] \quad (\text{III-3-11})
\end{aligned}$$

On procède au changement de variable :

$$u = \cot \phi \quad \text{et} \quad du = -(1 + u^2) d\phi$$

$$v = \cot \theta \quad \text{et} \quad dv = -(1 + v^2) d\theta$$

L'équation (III-3-11) s'écrit alors :

$$[a^2 x^2 + b^2 (y^2 + z^2)] = \left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left(1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right) + v^2 \right) \right]^{1/2} \quad (\text{III-3-12})$$

Les coordonnées sphériques deviennent :

$$x = \frac{r}{(1+v^2)^{1/2}} \frac{u}{(1+u^2)^{1/2}}$$

$$y = \frac{r}{(1+v^2)^{1/2}} \frac{1}{(1+u^2)^{1/2}} \quad \text{et} \quad d\tau = \frac{r^2 dr du dv}{(1+u^2)(1+v^2)^{3/2}} \quad (\text{III-3-13})$$

$$z = \frac{r v}{(1+v^2)^{1/2}}$$

Une fois le changement de variable effectué, on calcule séparément chaque terme de l'équation (III-3-9), soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{r_0}^r \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi d\tau = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{ab}{\pi r_0^3} \right) \frac{8a^2}{\alpha_1 r_0}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \exp \left\{ -\frac{2}{r_0} \left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] \right) + v^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \\
 & \times \left[\left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] \right) + v^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \frac{r^2}{(1+u^2)(1+v^2)^{\frac{3}{2}}} \right. \\
 & \quad \left. - \left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] \right) + v^2 \right]^{-\frac{3}{2}} \frac{a^2 r^4 u^2}{(1+u^2)(1+v^2)^{\frac{5}{2}}} \right. \\
 & \quad \left. - \left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] \right) + v^2 \right]^{-1} \frac{a^2 r^4 u^2}{(1+u^2)^2 (1+v^2)^{\frac{5}{2}}} \right] dudvdr \quad (\text{III-3-14})
 \end{aligned}$$

On notera également que :

$$\int_0^\infty x^n \exp(-ax) = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (\text{III-3-15})$$

L'expression (III-3-14) s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \, d\tau = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0 a^2}{\alpha_1 b^3} \\
 & \times \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{(1+u^2)} \left\{ \frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] + v^2 \right\}^{-\frac{3}{2}}
 \end{aligned}$$

$$X \left\{ 1 - \frac{2a^2}{b^2} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] + v^2 \right)^{-1} \right\} du dv \quad (\text{III-3-16})$$

soit :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \, d\tau &= \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0}{b} \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{\left(\frac{b^2}{a^2} + u^2 \right)} - \frac{4}{3} \frac{u^2}{\left(\frac{b^2}{a^2} + u^2 \right)} \right] du \\ &= \frac{\pi \hbar^2}{2m} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0 a}{b^2} - \frac{4 \hbar^2}{3m} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0}{b} \left[-\frac{u}{2 \left(\frac{b^2}{a^2} + u^2 \right)} + \frac{1}{2 \left(\frac{b}{a} \right)} \arctan \left[\frac{u}{\left(\frac{b}{a} \right)} \right] \right]_0^{\infty} \end{aligned}$$

D'où finalement :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \, d\tau &= \frac{\pi \hbar^2}{3 \cdot 2m} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0 a}{\alpha_1 b^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \, d\tau &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{a^2}{3\alpha_1 r_0^2} \quad (\text{III-3-17}) \end{aligned}$$

De la même façon pour les deux termes suivants on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi \, d\tau = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi \, d\tau = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{b^2}{3\alpha_2 r_0^2} \quad (\text{III-3-18})$$

Il ne reste plus que le dernier terme de l'expression (III-3-9) à calculer, d'où :

$$-\frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi d\tau = \frac{8e^2}{\kappa} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r}{(1+u^2)(1+v^2)^{3/2}} \\ \times \exp \left\{ -\frac{2}{r_0} \left[\frac{b^2 r^2}{(1+v^2)} \left(\frac{1}{(1+u^2)} \left[1 + \frac{a^2}{b^2} u^2 \right] \right) + v^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} dudvdr \quad (\text{III-3-19})$$

Compte tenu de (III-3-15) cette intégrale s'écrit :

$$-\frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi d\tau = -\frac{2e^2}{\kappa} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0^2}{b^2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (1+v^2)^{-1/2} \left((1+v^2) + u^2 \left(v^2 + \frac{a^2}{b^2} \right) \right)^{-1} dudv$$

$$\text{soit } -\frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi d\tau = -\frac{\pi e^2}{\kappa} \left(\frac{ab^2}{\pi r_0^3} \right) \frac{r_0^2}{b^2} \int_0^{\infty} (1+v^2)^{-1/2} \left(v^2 + \frac{a^2}{b^2} \right)^{-1/2} dv \quad (\text{III-3-20})$$

Cette dernière intégrale possède deux solutions

a) - si $a > b$: Ce cas correspond à celui du Germanium et du Silicium. La solution est donnée par :

$$-\frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi d\tau = -\frac{e^2}{\kappa} \frac{a}{r_0} \left(\frac{a^2}{b^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \arctan \left(\frac{a^2}{b^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-3-21})$$

b) - si $a < b$: Ce cas correspond à celui du CdAs₂ dont les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution aplatis. La solution est donnée par :

$$-\frac{e^2}{\kappa} \int_{\tau} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi d\tau = -\frac{e^2}{\kappa} \frac{a}{r_0} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{a^2}{b^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \text{Log} \left| \frac{1 + \left(1 - \frac{a^2}{b^2} \right)^{\frac{1}{2}}}{1 - \left(1 - \frac{a^2}{b^2} \right)^{\frac{1}{2}}} \right| \quad (\text{III-3-22})$$

L'énergie E solution de l'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$E = \int_{\tau} \Psi^* H \Psi d\tau = - \left(\frac{me^4}{2 \kappa^2 \hbar^2} \right) \left[a \frac{\text{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|}{\rho} - \frac{a^2}{3\alpha_1} - \frac{2b^2}{3\alpha_2} \right] \quad (\text{III-3-23})$$

avec: $\rho = [1 - (a^2/b^2)]^{1/2}$
 $\alpha_1 = 0,15$
 $\alpha_2 = 0,58$

Pour déterminer l'énergie d'ionisation des donneurs, on minimise E par rapport aux paramètres a et b. On doit avoir :

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0$$

On pose :

$$Q = - \left(\frac{me^4}{2 \kappa^2 \hbar^2} \right) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial \rho}{\partial a} = - \frac{1}{b} \frac{(1-\rho^2)^{1/2}}{\rho} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \rho}{\partial b} = \frac{1}{b} \frac{(1-\rho^2)}{\rho}$$

$$\text{et} \quad \frac{\partial E}{\partial a} = -Q \left[\text{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right| \frac{\left(\rho - a \frac{\partial \rho}{\partial a} \right)}{\rho^2} - \frac{2a}{3\alpha_1} - \frac{2}{3\alpha_2} \frac{2a|1-\rho^2| - \left(-2a^2 \rho \frac{\partial \rho}{\partial a} \right)}{(1-\rho^2)^2} + \frac{a}{\rho} \frac{\frac{\partial \rho}{\partial a} (1-\rho) + \frac{\partial \rho}{\partial a} (1+\rho)}{(1-\rho)^2} \frac{(1-\rho)}{(1+\rho)} \right] = 0$$

$$\text{soit} \quad \frac{\partial E}{\partial a} = -Q \left[\text{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right| \frac{\rho + \frac{a}{b} \frac{(1-\rho^2)^{1/2}}{\rho}}{\rho^2} - \frac{2a}{3\alpha_1} - \frac{2}{\rho^2} \right] = 0 \quad (\text{III-3-24})$$

$$\text{d'où} \quad a = \frac{3\alpha_1}{2} \left[\frac{\text{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right| - 2\rho}{\rho^3} \right] \quad (\text{III-3-25})$$

De la même façon on remplace "a" par $a-b(1-\rho)^{1/2}$ dans l'expression de E et on trouve :

$$E = -Q \left\{ \frac{b(1-\rho^2)^{1/2}}{\rho} \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right| - \frac{b^2(1-\rho^2)}{3\alpha_1} - \frac{2b^2}{3\alpha_2} \right\} \quad (\text{III-3-26})$$

On résoud ensuite l'équation $\partial E/\partial b = 0$, pour trouver :

$$b = \frac{3\alpha_2}{4} (1-\rho^2)^{1/2} \left\{ \frac{2\rho - (1-\rho^2) \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|}{\rho^3} \right\} \quad (\text{III-3-27})$$

On divise ensuite b par a , pour obtenir une nouvelle équation avec comme seul paramètre ρ :

$$\frac{b}{a} = \frac{\alpha_2}{2\alpha_1} (1-\rho^2)^{1/2} \left\{ \frac{2\rho - (1-\rho^2) \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|}{\operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right| - 2\rho} \right\} = \frac{1}{(1-\rho^2)^{1/2}}$$

$$\text{soit} \quad \frac{\alpha_2}{2\alpha_1} \left\{ \frac{2\rho - (1-\rho^2) \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|}{2\rho - \operatorname{Log} \left| \frac{1+\rho}{1-\rho} \right|} \right\} + \frac{1}{(1-\rho^2)} = 0 \quad (\text{III-3-28})$$

La résolution de cette équation permet de déterminer les paramètres a et b . La solution est trouvée grâce à la représentation graphique de la fonction définie par l'expression (III-3-28). Le point d'intersection de cette courbe avec l'axe des abscisses constitue la racine réelle positive recherchée.

La valeur de $\rho=0,79$ ainsi trouvée est ensuite remplacée dans les équations (III-3-25) et (III-3-27) pour obtenir enfin les paramètres recherchés suivants : $a = 0,256$; $b = 0,4189$

L'énergie d'ionisation des donneurs déduite de l'expression (III-3-26) est alors : $E_I = 14,6$ meV.

ANNEXE 2

ACTIVATION ENERGY OF HOPPING CONDUCTIVITY IN n-CdAs₂*

BY E. ŻDANOWICZ

Institute of Inorganic Chemistry and Metallurgy of Rare Elements, Technical University of Wrocław**

G. BISKUPSKI, H. DUBOIS AND A. A. OUBRAHAM

Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne — CNRS, Université de Lille, France

(Received June 30, 1988)

The transverse magnetoresistance and the Hall Coefficient of n-type CdAs₂ single crystals with the electron concentration, $N_d - N_a$, within the range $7 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ – $3.4 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ were measured in the temperature range from 1.8 to 300 K and in magnetic field up to 1.5 T. The activation energy ε_3 decreases with increasing donor concentration N_d . The obtained results are discussed in comparison with Shklovskii-Efros theory.

PACS numbers: 72.15.Gd

The impurity conduction at low temperatures has been investigated for many semiconductors (for ex. [1–3, 8]). The compact theory of hopping conduction in lightly doped semiconductors based on percolation model, proposed by Miller and Abrahams [2] and later by Shklovskii and Efros [4], gives us deeper understanding of this process and offers the possibility of comparison of this theory with the experimental data. The temperature dependence of resistivity in doped semiconductors in hopping region is $\rho = \rho_3 \exp(\varepsilon_3/kT)$, where activation energy ε_3 depends on donor concentration N_d and compensation K ($K = N_a/N_d$). The subject of this work has been to examine the dependence of ε_3 on N_d . The dependence of the preexponential factor ρ_3 and ε_3 on magnetic field has been described elsewhere [5]. In this work the results of measurements of resistivity ρ are presented for five n-CdAs₂ samples with donor concentration from $9.7 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ to $4 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ in the temperatures down to 1.8 K. The samples were not intentionally doped and for convenience of interpretation are of the same compensation level ($K = 0.2$). The donor concentration N_d and compensation K for all investigated samples have been calculated by

* Proc. XVII School on Physics of Semiconducting Compounds, Jaszowiec 1988.

** Address: Instytut Chemii Nieorganicznej i Metalurgii Pierwiastków Rzadkich, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland.

computer fitting to the temperature dependence of the Hall coefficient R_H . The obtained characteristics are presented in Table I. The temperature dependences of the resistivity ρ for these samples are shown in Fig. 1. The values of the activation energy ϵ_3 are determined from the slopes of the $\log \rho$ vs $1/T$ function in the hopping region below 5 K and graphi-

TABLE I

Sample	$N_d - N_a$ [m^{-3}]	N_d [m^{-3}]	ϵ_3 [meV]	$K = N_a/N_d$	d/a^*
S-52	7.7×10^{22}	9.7×10^{22}	2.17	0.2	5.19
S-61	8.8×10^{22}	1.2×10^{23}	2.05	0.2	4.85
S-1	1.62×10^{23}	2.11×10^{23}	1.51	0.23	4.1
S-4	2.56×10^{23}	3.2×10^{23}	0.44	0.2	3.48
S-53	3.4×10^{23}	4×10^{23}	0.37	0.15	3.23

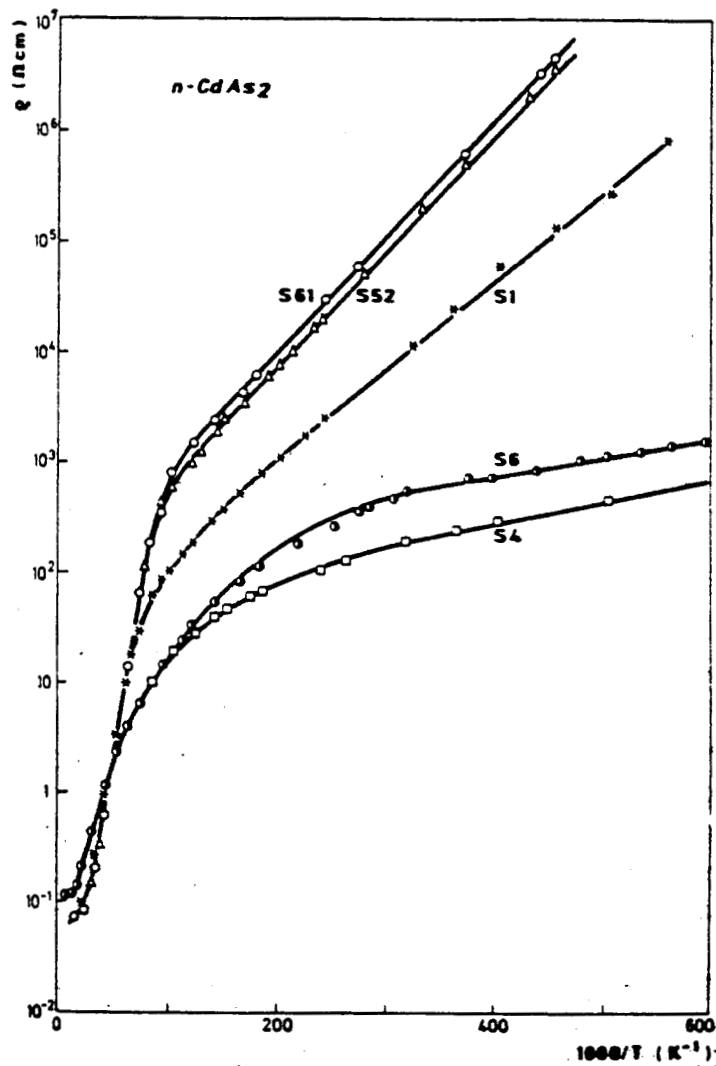


Fig. 1. Resistivity ρ as a function of reciprocal temperature for five samples on n-type CdAs₂ for various donor concentrations. ϵ_3 region of impurity conduction is clearly visible

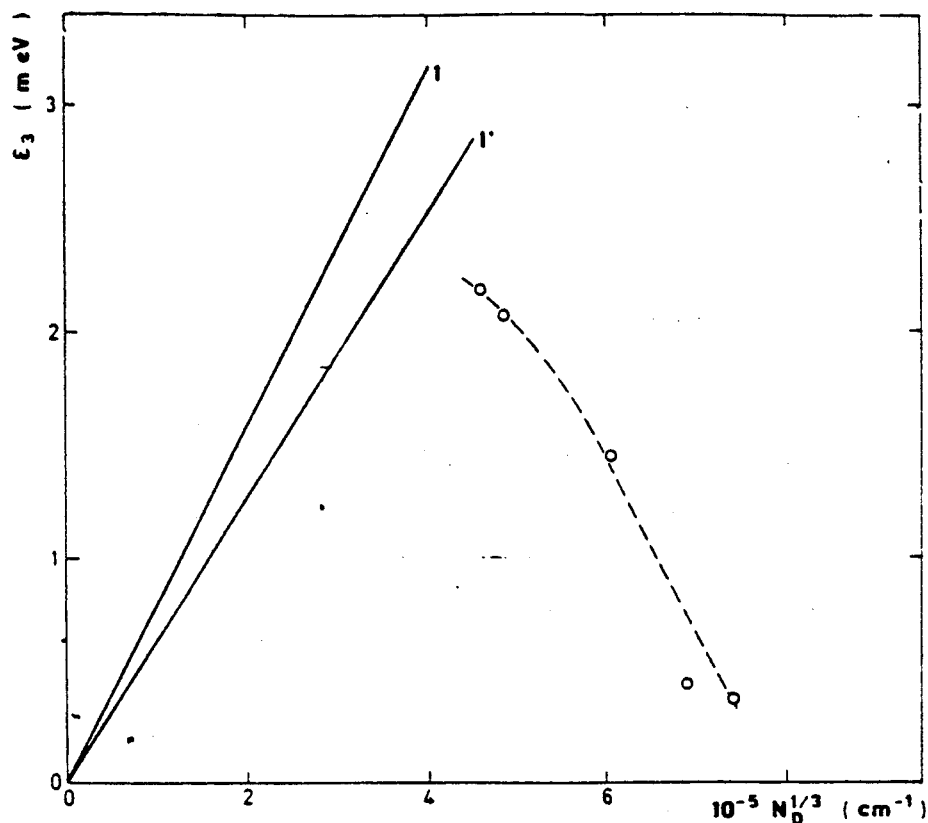


Fig. 2. Variation of activation energy ε_3 as a function of donor concentration. \circ — experimental points, lines I and I' calculated from the $S-E$ theory acc. to relation (2) for $K = 0$ and $K = 0.2$, respectively

cally shown in Fig. 2 as a function of N_d . The experimental values of ε_3 gradually decrease with increasing concentration. This experimental result is not consistent with the Shklovskii-Efros theory [4, 6]. They propose the following relation for ε_3 for weakly compensated semiconductors ($K \leq 0.2$):

$$\varepsilon_3 = 0.99 \frac{e^2 N_d^{1/3}}{\kappa} (1 - 0.3 K^{1/4}), \quad (1)$$

where κ is a dielectric constant (for CdAs_2 $\kappa = 18$ [7]). The solid lines I and I' in Fig. 2 are calculated according to the relation (1) for $K = 0$ and $K = 0.2$, respectively. The deviation of experimental points from the theory with increasing N_d is clearly seen. Such disagreement of behaviour of ε_3 with the theory was observed also for other semiconductors for larger N_d (for example in n-Ge [8], p-Ge [1], GaAs [9], CdMnSe [10]). Instead of monotonically rising with increasing concentration this dependence exhibits a peak at some concentration N'_d . At concentration higher than N'_d , ε_3 begins to decrease with increasing concentration. In the literature data there are suggested two different mechanisms for explanation of this behaviour of ε_3 . According to [4, 11] the decrease of ε_3 above N'_d is rather associated with Anderson delocalization; as the concentration increases the delocalization region broadens and activation energy from the Fermi level to the edge of the delocalized states

decreases. Pollak and Knotek [12] suggested that the decrease of ϵ_3 is caused by correlated multi-electron hopping. This effect should appear at concentrations for which Coulomb interactions between electrons located at neighbouring pairs is strong. Then repulsion between the electrons is alleviated if the transitions at different pairs are executed together. The e-e interaction strongly depends upon the overlap parameter d/a^* , where d is the mean distance between impurities and a^* is the effective Bohr radius (for CdAs₂ $a^* = 26 \text{ \AA}$ [5]). Discussion of this relation for Ge and Si has been provided by Chroboczek [13]. For clear explanation of the problem for CdAs₂ further investigations are needed also for the samples with lower concentration.

One of the authors (E. Ż.) is appreciate to dr. K. Sierański for his help in computer calculations. Financial support from the Institute of Solid State Physics Polish Academy of Sciences in Zabrze is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- [1] H. Fritzsche, *Phys. Rev.* **99**, 406 (1955).
- [2] A. Miller, E. Abrahams, *Phys. Rev.* **120**, 745 (1960).
- [3] N. R. Ray, H. Y. Fan, *Phys. Rev.* **121**, 768 (1961).
- [4] B. I. Sklovskii, A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Moskva 1979.
- [5] G. Biskupski, E. Żdanowicz, H. Dubois, J. C. Portal, S. F. Marenkin, *Acta Phys. Pol.* **A75**, 293 (1989).
- [6] A. L. Efros, B. I. Shklovskii, *Phys. Status Solidi* (b) **50**, 45 (1972).
- [7] Landolt-Bornstein, Band 17, p. 225-228, Springer-Verlag 1983.
- [8] H. Fritzsche, M. Cuevas, *Phys. Rev.* **119**, 4 (1960).
- [9] O. V. Emelyanenko, T. S. Lagunova, P. N. Nasledov, P. N. Nedolgo, J. N. Timchenko, *Sov. Phys. Semicond.* **7**, 1919 (1973).
- [10] T. Dietl, J. Antoszewski, L. Świerkowski, *Phys. of Semicond. Physica* **117B**, 491 (1983).
- [11] B. T. Shklovskii, J. S. Shlimak, *Phys. Techn. Semicond.* **6**, 1 (1972).
- [12] M. Pollak, M. L. Knotek, *Solid State Commun.* **21**, 183 (1977).
- [13] J. A. Chroboczek, *Impurity Conduction in Semiconductors*, to be published.

ANNEXE 3



NEGATIVE MAGNETORESISTANCE OF n-type COMPENSATED CADMIUM ARSENIDE (CdAs₂) IN THE TEMPERATURE RANGE 11 K - 4.2 K

A.A. Oubraham, G. Biskupski and E. Zdanowicz*

Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne (C.N.R.S), Université de Lille I, F 59655
Villeneuve d'ascq Cedex - FRANCE.

*Institute of Inorganic Chemistry and Metallurgy of Rare Elements, Technical University of
Wrocław, Poland.

(Received 23 October 1990 by M. Balkanski)

The negative magnetoresistance (N.M.R) in compensated n type CdAs₂ with carrier density $n = 1.7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ has been measured in the temperature range 4.2 K - 11 K, in magnetic fields up to 1.5 tesla. Longitudinal and transverse magnetoresistance have similar behaviours. The experimental data have been analysed according to the Toyozawa model which suggests an additional scattering process of the carriers by localized magnetic moments¹. Transverse magnetoresistance which is treated here has the behaviour of a system of paramagnetic spins. The variation of the N.M.R versus magnetic field and temperature is quite well approximated by a Langevin function with an effective magnetic moment $\mu^* = n \mu_B$ where μ_B is the Bohr magneton and $n = 8$.

1. Introduction

N.M.R has been observed by several authors in both metallic and insulating doped semiconductors^{1, 2, 3}. Several models are available for the discussion of experimental results.

According to Toyozawa¹, the conduction electrons are scattered by localized magnetic moments of impurities. The application of an external magnetic field orders these magnetic moments and reduces the scattering effects causing the decrease of resistivity.

Usually the application of magnetic field increases the electrical resistivity of a conductor and this increase can be explained by considering the effects of the classical Lorentz⁵ force on the carriers moving in a crystal.

In the present paper the resistivity of n-type compensated CdAs₂ has been investigated in the temperature range 290 K - 4.2 K with magnetic fields up to 1.5 tesla. The experimental results have been analysed in the point of view that the N.M.R is caused by a magnetic system, in order to calculate the number of magnetic moments.

2. Experiment and results

The carrier density of the sample investigated was determined by measurement of hall effect at room temperature. The sample labelled S1 has a concentration $n = 1.7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and a compensation $K = 0.2$ estimated by the De Boer⁶ formula.

Figure 1 shows the variation of the resistivity and the hall coefficient versus

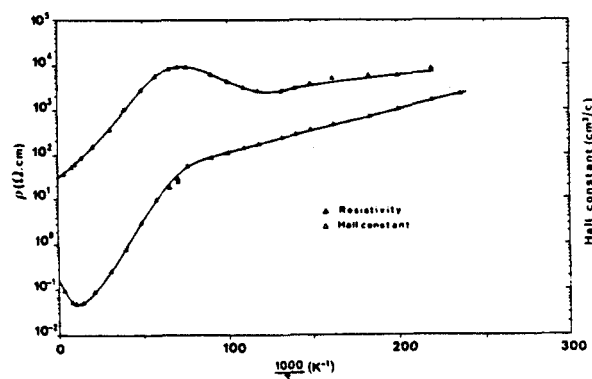


Figure 1. Resistivity ρ , Hall constant R_H versus $1000/T$. The values of temperature lie between 290 K and 4.2 K.

the inverse of temperature. The behaviour of figure 1 is characteristic of the conduction in an impurity band below 14 K. The curve of the hall coefficient presents a bump which was discussed by Mott and Twose 7. It suggests the existence of an impurity band which has not merged with the conduction band. This impurity band is separated from the conduction band by an energy $\epsilon_1 = 10$ meV.

The conductivity exhibit an activation energy $\epsilon_3 = 1.7$ meV lower than ϵ_1 in the lowest temperature region of figure 1. This energy is associated to a conduction process by hopping (Miller Abrahams regime). This result suggests that our sample is on the insulating side of the metal non metal (M.N.M) transition. This transition occurs for a critical concentration N_c defined by : $N_c^{1/3} a_H = 0.25$ where a_H is the effectif Bohr radius and $N_c = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

In order to study magnetic properties of CdAs₂, we have investigated transverse magnetoresistance $(\Delta\rho / \rho)_t$ in a wide range of temperatures. Our measurements have been reported in figure 2. At high temperature the transverse magneto-resistance is positive and becomes negative at $T = 14$ K. The Variation of $|\Delta\rho / \rho|_t^{-1/2}$ with temperature in figure 3 shows that the transverse N.M.R may be approximated by the function :

$$|\Delta\rho / \rho|_t^{-1/2} = K_1 \cdot [(T+\theta)/B] + K_2. \quad [1]$$

where B is the magnetic field and θ a temperature which may be considered as the curie point of a system of paramagnetic spins ($\theta > 0$).

According to Yosida 8, if magnetic moments exist the N.M.R is approximately proportionnal to the square of the magnetization M of impurities.

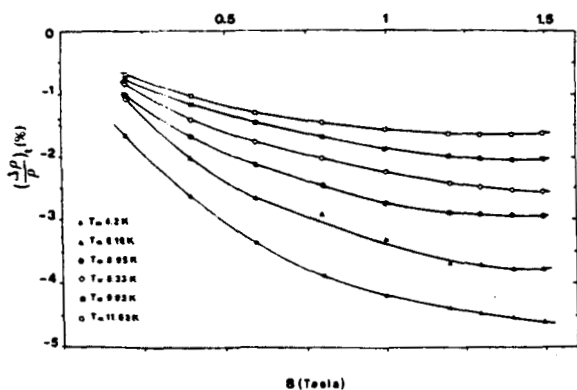


Figure 2. Transverse magnetoresistance versus magnetic field up to 1.5 tesla.

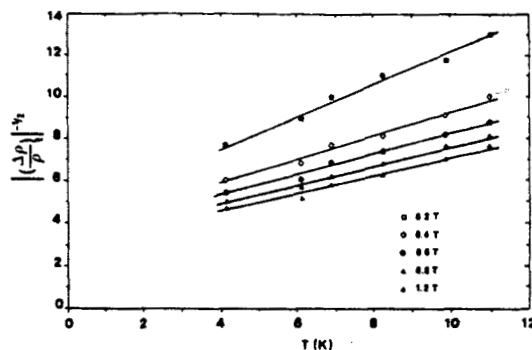


Figure 3. Inverse square root of the transverse magnetoresistance versus temperature at different magnetic field.

$$|\Delta\rho / \rho|_t \propto M^2 \propto (B/T). \quad [2]$$

The magnetization is well described by a Brillouin function B_J:

$$M = N_m g J B_J (\mu^* B / k_B T). \quad [3]$$

where μ^* is the magnetic moment of the scattering centers; N_m the concentration of magnetic dipoles; and J the total moment of localized electrons.

In the case of large values of magnetic moments, the Brillouin function can be approximated by the classical Langevin function : $L(x) = \text{Coth}(x) - 1/x$. [4]

Since, beside the scattering of conduction electrons by localized magnetic moments, there exists also other mechanisms, the total magnetoresistance is the sum of two components,

$$(\Delta\rho / \rho)_t = (\Delta\rho / \rho)_t^+ + (\Delta\rho / \rho)_t^-. \quad [5]$$

The first term describes the usual positive exponential magnetoresistance 9, and is given by,

$$(\Delta\rho / \rho)_t^+ = \exp(\zeta \cdot B^2) - 1. \quad [6]$$

The second term is the negative component, and is given by ,

$$(\Delta\rho / \rho)_t^- = -\lambda L^2 (\mu^* B / k_B [T + \theta]). \quad [7]$$

The total magnetoresistance is well described by the following expression :

$$(\Delta\rho / \rho)_t = -\lambda L^2 (\mu^* B / k_B [T + \theta]) + \exp(\zeta \cdot B^2) - 1. \quad [8]$$

The quantities L, μ^* , θ , and ζ are fitting parameters, which were computed by minimizing the sum of residual squares. The absolute value of the negative component which is our interest is then given by,

$$|(\Delta\rho / \rho)_t^-| \cdot [\exp(\zeta B^2) - 1]^{1/2} = \delta \cdot L(\mu^* B / k_B [T + \theta]). \quad [9]$$

The best fit was obtained by calculating the percentage of deviation given by,

$$\%Dev = [(1/N) \cdot \sum \{100 \cdot (y_{th} - y_{exp}) / y_{exp}\}^2]^{1/2}. \quad [10]$$

where y_{th} and y_{exp} are respectively the second and the first term of equation [9]. Figure 4 shows the variation of the negative term of the magnetoresistance as a function of $B/(T+\theta)$. It is seen that experimental points for various temperatures, after subtracting the positive component, can be fitted with a single curve. Its equation resembles to a Langevin function of $B/(T+\theta)$ the variable. This suggest that the negative component of the magnetoresistance can be explained by the magnetization of localized magnetic moments.

3. DISCUSSION

Such behaviour of the resistivity has already been observed on dilute magnetic alloys and semi-conductors like GaAs¹⁰. It looks like a Curie-Weiss dependance on temperature and this behaviour which is the same for different magnetic fields leads to a value of $\theta = 0$ K.

It is interesting to compare the variation of the magnetisation of paramagnetic system versus $B/(T+\theta)$ as given by the Langevin theory. Figure 4 shows the variation of $|\Delta\rho| / \rho_0^{1/2}$ versus $B/(T+\theta)$ for different sets of values of B and T and for a value of $\theta = 0$ K.

The curve has the feature of a Langevin function $L(x)$ where $x = \mu^* B / K_B T$ and $\mu^* = n \mu_B$ is the effective magnetic moment, μ_B is the Bohr magneton. The computed value of n was : $n = 8$.

Such a value of n corresponds to electron having a magnetic moment eight times larger

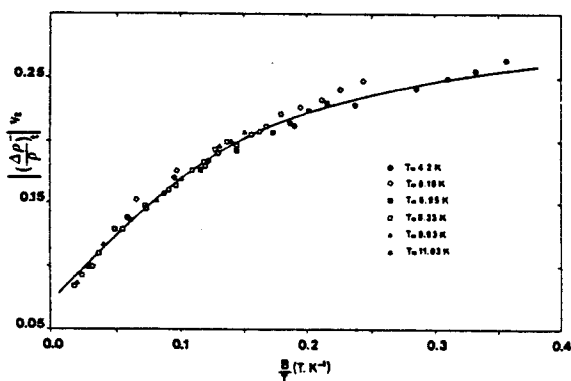


Figure 4. Square root of the negative component of the magnetoresistance versus B/T for different sets of values for B and T. The solid line represents the Langevin function fitted with $\mu^* = 8 \mu_B$.

than that of an electron bound to an isolated hydrogenic impurity. This large value of μ^* is explained by Toyozawa as being the result of statistical distribution of magnetic moments of localized spins due to their collective nature.

According to Toyozawa on the one hand, values for the large magnetic moments of the order of 5 - 10 μ_B , quoted in earlier literature, are explained as being caused by the electrons which are constantly entering and leaving magnetic sites, and on the second hand, the surrounding non magnetic sites make an additional contribution to the magnetic moments.

This value of $n = 8$ makes quite valuable this model for the N.M.R, where the decrease of resistivity can be due to an increase of the mobility resulting from the lowering of the scattering of charge carriers by localized magnetic moments. This model needs high values of magnetic moments with n between 5 and 10. These values are attained in CdAs₂.

According to Woods et al¹¹, it seems to be only two possible kinds of mechanisms which would account for the N.M.R in the impurity conduction range. Either the magnetic field gives rise to a redistribution of charge carriers among different energy states having different carriers mobility, or the magnetic field increases the mobility or hopping probability of electrons.

Halbo et al¹⁰, suggest that the conduction in GaAs is due to delocalized electrons in energy levels above the donor ground state and that the magnetoresistance is due to the field dependance of the mobility of carriers in the band formed by these levels.

Garyagdyev¹² obtained much larger values of magnetic moments in InAs, which reached several tens of Bohr magnetons. This value was associated with large spectroscopic splitting factor g - equation [3] - of the electron levels in Indium arsenide. This factor g was 40 for the conduction band electrons.

Large values for magnetic moments of the impurities have been obtained in the past from similar analyses. Such values require therefore the existence of a large number of paramagnetic sites within the same region.

Adrianov et al¹³ suggested that the interaction energy of electrons localized in levels within one cluster may give rise to large magnetic moments.

Our measurements and calculations

indicate that the temperature dependence of the N.M.R of n type CdAs₂ is governed by the Curie-Weiss law, which implies that the electrons are scattered by localized spins in agreement with Toyozawa's model.

It should be noted that transport and magnetic properties of CdAs₂ need further investigations.

REFERENCES

1. Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* 17, 986 (1962).
2. C. D. Kourkoutas, P. D. Bekris, G. J. Papaioannou & P. C. Euthymiou, *Solid state comm.* 55, 881 (1985).
3. G. Biskupski, H. Dubois, *Solid state comm.* 28, 601 (1978).
4. Yu. V. Shmartsev, E. F. Shender & T. A. Polyanskaya, *Sov. Phys. Semicond.* 4, 1990 (1971).
5. F. J. Blatt, *Physics of electronic conduction in solids*, p. 221. Mc Graw-Hill, New York (1968).
6. J. H. De Boer, W. C. Van Geel, *Physica* 2, 186 (1935).
7. N. F. Mott, W. D. Twose, *Advan. Phys.* 10, 107 (1961).
8. K. Yosida, *Phys. Rev.* 107, 396 (1957).
9. B. I. Shklovski, A. L. Efros, *Sov. Phys. JETP* 33, 468 (1971).
10. L. Halbo, R. J. Sladek, *Phys. Rev.* 173, 794 (1968).
11. J. F. Woods, C. Y. Chen, *Phys. Rev.* 135A, 1462 (1964).
12. G. Garyagdyev, O. V. Emel'yanenko, N. V. Zotova, T. S. Lagunova & D. N. Nasledov, *Sov. Phys. Semicond.* 7, 487 (1973).
13. D. G. Adrianov, G. V. Lazareva, A. S. Savel'ev & V. I. Fistul', *Soviet. Phys. Semicond.* 9, 141 (1975).



RESUME:

Les travaux présentés sont relatifs à l'étude des mécanismes de conduction de la magnétorésistance négative dans un semiconducteur II-V; CdAs₂. Des mesures de résistivité et d'effet Hall ont été effectuées dans le domaine de température 290 - 1.6 K, à des champs magnétiques atteignant 1.5 Tesla. Le critère de Mott situe nos échantillons du côté isolant de la transition métal-isolant.

Les deux premiers chapitres sont consacrés respectivement à la présentation des modèles théoriques décrivant les divers mécanismes de transport et à la description du dispositif expérimental utilisé. Un troisième chapitre aborde l'étude détaillée des énergies d'activation associées aux différents processus de conduction observés sur les courbes de variation de la résistivité avec la température. Un calcul variationnel de l'énergie d'ionisation des atomes donneurs dans CdAs₂ est présenté.

Le dernier chapitre de ce travail est consacré à l'étude de la magnétorésistance négative dans un régime de conduction par saut à distance variable. L'interprétation de ce phénomène nous a conduit à expérimenter plusieurs modèles théoriques. La confrontation de nos résultats expérimentaux aux modèles traitant de la diffusion par une ou plusieurs impuretés ne nous a pas permis d'expliquer correctement la magnétorésistance négative. Seule la théorie prenant en compte l'action du champ magnétique sur le front de mobilité et sur la longueur de localisation présente un excellent accord avec l'expérience.

MOTS CLES:

CdAs₂, Front de mobilité, Gap de Coulomb, conduction par saut, magnétorésistance négative, moments magnétiques, Diffusion, Interférences quantiques