

50376  
1994  
329

N° d'ordre: 1408

26 102 916  
50376  
1994  
329

# THÈSE

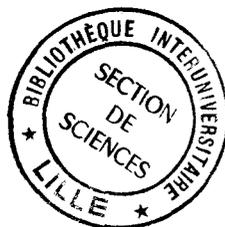
Présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ  
Spécialité: Sciences des Matériaux

par

Zahia BOUGRIOUA



ANISOTROPIE

DES PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT ÉLECTRIQUE  
DES SYSTÈMES ÉLECTRONIQUES BIDIMENSIONNELS  
INDUITE PAR DES DÉFAUTS LINÉAIRES

Soutenue le 16 Décembre 1994 devant la commission d'examen:

Président	E. CONSTANT	Professeur IEMN, UST Lille
Rapporteurs	J.C. PORTAL	Professeur INSA Toulouse
	B. PÖDÖR	Senior Researcher RITP HAS, Budapest
Examineurs	J. GRILHÉ	Professeur Université de Poitiers
	D. FERRÉ	Maître de conférences LSPES, UST Lille
Directeur de thèse	J.L. FARVACQUE	Professeur LSPES, UST Lille

*A la mémoire de ma Mère,*

*à mon Père,*

*à tous les miens.*

## **Remerciements**

*Ce travail a été effectué dans le groupe Semiconducteurs du Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide (LSPES, UA CNRS 234) de l'Université des Sciences et Technologies de Lille.*

*Cette thèse a été réalisée sous la direction scientifique de Monsieur le Professeur Jean-Louis FARVACQUE, directeur du LSPES. Sa compétence et sa disponibilité m'ont été très utiles pour mener à bout cette étude où une partie de l'analyse théorique était à inventer. J'ai beaucoup appris à son contact et je tiens à le remercier vivement.*

*Madame Denise FERRE a également dirigé cette étude. Son aide et ses nombreux conseils m'ont aidée tout au long de ce travail. Je lui en suis reconnaissante.*

*Une partie de mes travaux a pu être entreprise grâce au soutien de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (IEMN) dont le directeur Monsieur le Professeur Etienne CONSTANT a accepté de présider le jury de cette thèse. Je lui exprime toute ma gratitude pour l'intérêt qu'il a ainsi porté à mon travail.*

*Monsieur le professeur Jean-Claude PORTAL (INSA Toulouse et SMCI Grenoble) a bien voulu juger ce travail. Je le remercie pour l'examen attentif auquel il a soumis mon manuscrit.*

*Monsieur Balint PÖDÖR (Research Institute for Technical Physics of Budapest, Hongrie) a, dès le départ, manifesté son intérêt pour cette étude, notamment en me recevant durant deux mois (1992) dans son laboratoire de Budapest où son équipe et lui même ont su me faire profiter de leur expérience (Magnétotransport, MET, C(V) profiling). Je le remercie sincèrement d'avoir accepté de participer à ce jury en tant que rapporteur.*

*Monsieur le Professeur Jean GRILHÉ (Laboratoire de Métallurgie Physique, Université de Poitiers) a accepté d'examiner ce travail. Qu'il soit ici remercié pour l'intérêt qu'il m'a ainsi témoigné.*

*Le travail présenté a bénéficié de l'aide efficace des équipes du Département Hyperfréquences et Semiconducteurs de l'IEMN. Je tiens ainsi à remercier le Professeur Yves DRUELLE, Jean-Luc LORRIAUX, Jean-Louis CODRON, pour m'avoir fourni les hétérostructures adaptées aux différents cas que je souhaitais étudier. Je remercie également le Professeur Alain CAPPY, Yvon CORDIER, Pascal WINN et Henry HAPPY pour les fréquents conseils et discussions que nous avons eu sur la technologie des composants. Mes remerciements vont également aux membres de l'équipe de la centrale de technologie.*

*Evidemment, je remercie tous les membres de l'équipe du groupe Semiconducteurs du LSPES qui m'ont à un moment ou à un autre apportés une aide et ont témoigné un intérêt certain pour mon sujet de recherche: le professeur Jean DI PERSIO pour ses fréquents conseils en topographie aux RX; Ydir ANDROUSSI, Corinne ULHAQ-BOUILLET et Alain LEFEBVRE pour les études par microscopie électronique en transmission; Dominique VIGNAUD pour les caractérisations par photoluminescence; Adel MIRI et François CLETON pour les observations en cathodoluminescence. Une mention spéciale pour Adel et Corinne pour nos nombreuses discussions et leur soutien marqué. Je remercie également le professeur Ghislaine COULON pour avoir analysé quelques échantillons par AFM.*

*Ma sympathie va aux autres personnes du LSPES -doctorants et permanents, chacun avec son nom- qui m'ont apportée une aide amicale durant ces quatre années.*

*Enfin merci à Mimi, Fifi, Sena et Nono qui m'ont supportée dans tous les sens du terme.*

# SOMMAIRE

Introduction générale	1
<u>Chapitre I -</u>	7
<b>  Systèmes électroniques bidimensionnels</b>	
<b>I.1 - Gaz électroniques bidimensionnels</b>	11
I.1.1 - Hétérojonctions	11
I.1.2 - Etats électroniques	13
I.1.3 - La densité d'états	15
<b>I.2 - Quantification magnétique</b>	17
I.2.1 - Niveaux de Landau	17
I.2.2 - La densité d'états	21
I.2.2.1 - Densité d'états en champ magnétique élevé	22
I.2.2.2 - Densité d'états pour des champs magnétiques intermédiaires	25
I.2.2.3 - Conséquences	28
<b>I.3 - Propriétés de transport</b>	31
I.3.1 - Transport à champ magnétique nul	31
I.3.2 - Transport en présence d'un champ magnétique	36
I.3.2.1 - Introduction	36
I.3.2.2 - Magnétotransport en champ magnétique intermédiaire	41
I.3.2.3 - Cas des champs magnétiques intenses	47
A - Conductivité longitudinale en champ fort	49
B - Effet Hall quantique	50
<u>Chapitre II -</u>	53
<b>  Introduction de défauts linéaires:   dislocations et rugosité unidimensionnelle</b>	
<b>II.1 - Caractéristiques des structures utilisées</b>	57
<b>II.2 - Hétérostructures pseudomorphiques</b>	59
II.2.1 - Alliages ternaires ou quaternaires- Dislocations	61

II.2.2 - Désadaptation de maille- Accommodation élastique	63
II.2.3 - Relaxation plastique - Epaisseur critique	65
II.2.3.1 - Modélisation théorique	65
II.2.3.2 - Nature des dislocations de désadaptation de réseau	67
II.2.4 - Choix des structures pseudomorphiques	69
<b>II.3 - Sous-structure de défauts introduits par flexion encastree</b>	<b>71</b>
II.3.1- Choix d'un mode de déformation des hétérostructures	71
II.3.2- Déformation des hétérostructures en flexion encastree	75
II.3.2.1 - Principe de la flexion encastree	75
II.3.2.2 - Orientation des éprouvettes de déformation	75
II.3.2.3 - Conditions expérimentales	81
II.3.3- Caractérisation de la sous-structure par imagerie	85
II.3.3.1 - Etude de l'état de surface	85
II.3.3.2 - Topographie aux rayons X en réflexion	87
A - Conditions d'étude	87
B - Nature des dislocations	89
II.3.3.3 - Microscopie Electronique en Transmission	95
A - "Plan-view"	95
B - "Cross-section"	97
II.3.3.4 - Remarque: cisaillement des hétérostructures	98
II.3.4 - Origine probable de l'asymétrie observée	99
II.3.4.1 - Bilan des observations	99
II.3.4.2 - Rôle de la couche contrainte	101
II.3.5 - Conclusion	105
<b>Chapitre III -</b>	<b>107</b>
<b>Etude expérimentale du magnétotransport</b>	
III.1 - Choix de la géométrie de Van der Pauw	111
III.1.1 - Matériau isotrope	113
III.1.1.1- Résistivité longitudinale	113
III.1.1.2 - Composante de Hall	115
III.1.2 -Méthode d'exploitation pour un matériau anisotrope	117
III.1.3 - Dépouillement en présence d'un champ magnétique	122
III.1.4 - Résistances transverses $R_{ACDB}$ et $R_{DBAC}$	125
III.2 - Dispositif de mesure	129

III.2.1 - Banc de mesure	129
III.2.2 - Préparation des échantillons	129
<b>III.3 - Résultats expérimentaux</b>	<b>135</b>
III.3.1 - Données brutes	135
III.3.2 - Analyse préliminaire	142
<b>III.4 - Eléments du tenseur de résistivité</b>	<b>147</b>
III.4.1- Effet Shubnikov de Haas	147
II.4.1.1 - Echantillons GaAlAs-GaAs	147
II.4.1.2 - Echantillons GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs	147
II.4.1.3 - Echantillons GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs	149
III.4.2 - Effet Hall quantique	155
 <u>chapitre IV -</u>	 <b>157</b>
<b>Etude théorique de l'influence des défauts linéaires sur les propriétés de transport des systèmes 2D à champ magnétique nul</b>	
 IV.1 - Introduction - Position du problème	 160
IV.1.1 - Description des systèmes anisotropes	160
IV.1.2 - Potentiels diffuseurs et écrantage	166
 IV.2 - Approche de la fonction diélectrique dans un milieu composite	 168
IV.2.1 - Présentation rapide du modèle	168
IV.2.2 - Exemple: le cas des impuretés ionisées	171
 IV.3 - Potentiels diffuseurs indépendants et règle de Matthiessen	 174
 IV.4 - Mécanismes de diffusion associés aux dislocations	 177
IV.4.1 - Effet de coeur ou diffusion coulombienne	177
IV.4.2 - Effets dus au champ de déformation	181
IV.4.2.1 - Effet du potentiel de déformation	181
IV.4.2.2 - Effet piezoélectrique	182
IV.4.3 - Potentiels écrantés	184
 IV.5 - Résultats numériques	 186
IV.5.1 - Anisotropie des fréquences de collision	186
IV.5.2 - Anisotropie des mobilités électroniques	191

<b>IV.6 - Mécanisme de diffusion associé à la rugosité unidimensionnelle d'interface</b>	<b>197</b>
IV.6.1 - Introduction	197
IV.6.2 - Potentiel diffuseur	198
IV.6.2.1 - Action individuelle de chaque zone cisailée	198
IV.6.2.2 - Corrélations des zones cisailées	199
IV.6.3 - Résultats numériques	201
<b>IV.7 - Description phénoménologique du potentiel diffuseur</b>	<b>205</b>
<u>chapitre V -</u>	<b>215</b>
<b>Exploitation des phénomènes de conductivité en présence d'un champ magnétique</b>	
<b>V.1 - Comportement en champ magnétique</b>	<b>219</b>
V.1.1 - Echantillons déformés plastiquement	219
V.1.2 - Echantillons plastiquement relaxés	220
<b>V.2 - Etude théorique de la magnétoconductivité en présence de potentiels diffuseurs anisotropes</b>	<b>221</b>
<b>V.3 - Contribution des dislocations à l'élargissement des niveaux de Landau</b>	
V.3.1. Aspect théorique	226
V.3.2 - Détermination des temps de vie quantiques	231
V.3.2.1 - Echantillons plastiquement déformés	231
V.3.2.2 - Echantillons plastiquement relaxés	232
V.3.3 - Origines possibles des différences entre dislocations de désadaptation et des dislocations développées par flexion	233
<b>V.4 - Conclusion</b>	<b>234</b>
<b>Conclusion générale</b>	<b>235</b>
<b>Annexes</b>	
A- Dislocations parfaites dans les composés III.V	241
B- Fonction d'écrantage dans un matériau composite	249
C- Potentiel diffuseur efficace associé aux dislocations	259
<b>Bibliographie</b>	<b>265</b>

Ces quinze dernières années se sont révélées très riches du point de vue de la maîtrise des techniques de croissance cristalline telles que l'épitaxie par jets moléculaires (EJM), le dépôt en phase vapeur par la méthode des organométalliques (MOCVD), ou encore la MOMBE, développée plus récemment et qui allie les deux méthodes précédentes. Cette maîtrise permet notamment la croissance de couches semiconductrices dont la qualité cristalline, la pureté chimique, le contrôle des profils de composition et de dopage sont optimisés. Associés aux techniques de lithographie de plus en plus fines, ces procédés ont favorisé la conception et la réalisation de structures semiconductrices complexes, supports de nouveaux composants électroniques ou optoélectroniques aux fonctions originales gouvernées par des propriétés physiques fondamentalement différentes de celles des matériaux massifs.

Cette effervescence s'est surtout focalisée ces derniers temps sur la réalisation et la caractérisation d'hétérostructures III-V et II-VI supports de systèmes électroniques de dimensionnalité réduite: bidimensionnels (2D), unidimensionnels (1D), zérodimensionnels (0D). Le confinement des porteurs de charge dans respectivement une, deux et trois dimensions de l'espace est rendu possible par le choix judicieux de la structure de bande des matériaux constitutifs des hétérostructures ("Ingénierie des structures de bande").

La réalisation de ces structures composites, alliant des substrats divers (Si, GaAs, InP) à des alliages semiconducteurs épitaxiés ne possédant pas les mêmes paramètres de réseau cristallin, est cependant limitée à un domaine étroit des compositions et des épaisseurs des matériaux épitaxiés. En effet, pour des désadaptations trop élevées, une partie de l'énergie élastique emmagasinée dans ces couches contraintes (pseudomorphiques) peut être relaxée par la nucléation et le développement de défauts structuraux tels que des dislocations de désadaptation de réseau ou des macles. En général, les épaisseurs de matériau épitaxié requises pour localiser latéralement les porteurs de charge dans les systèmes 2D - et a fortiori les systèmes 1D et 0D - sont inférieures aux valeurs des épaisseurs critiques au delà desquelles ces défauts apparaissent. Toutefois, la diversité des besoins technologiques nécessitant de plus en plus l'emploi de couches largement désadaptées mais exemptes de défauts et éventuellement non contraintes (afin de préserver une partie des caractéristiques de la structure de bande), de nombreuses tentatives ont été proposées pour supprimer ou maintenir les dislocations de désadaptation de réseau loin des couches actives en introduisant des couches tampons.

Jusqu'à présent très peu de travaux, aussi bien expérimentaux que théoriques ont été entrepris pour quantifier l'influence des dislocations sur les propriétés électriques des systèmes de dimensionnalité réduite, que ces dislocations soient à proximité du système ou dans les couches tampons. Ce type de problème a par contre été abondamment étudié dans les semiconducteurs massifs. Dans ces milieux 3D, la présence de dislocations se traduit par la dégradation de la mobilité électronique du matériau ainsi que par une diminution significative de la densité de porteurs de charge.

Aussi, nous avons entrepris dans ce travail une étude systématique de l'influence des dislocations sur les propriétés de transport dans une catégorie particulière de systèmes électroniques de dimensionnalité réduite: les systèmes électroniques bidimensionnels. Au delà de l'intérêt que notre étude expérimentale peut avoir pour les problèmes technologiques, l'interprétation théorique du transport électrique des systèmes 2D en présence de dislocations (donc de centres diffuseurs anisotropes) a conduit à des problèmes de physique fondamentale qui n'étaient jusqu'à présent pas considérés dans la littérature:

- Les sous-structures de dislocations introduites volontairement par déformation plastique sont généralement constituées d'une distribution de dislocations dans les couches environnant le puits quantique et de dislocations situées approximativement aux interfaces limitant ces puits. Il va de soi que les dislocations situées en dehors des puits agissent sur les électrons du puits par l'intermédiaire de potentiels diffuseurs qui sont déjà écrantés par la susceptibilité diélectrique des milieux dans lesquels elles sont placées. Cette remarque nous a conduit à étudier la réponse diélectrique d'une hétérostructure et à montrer que celle-ci est une propriété globale qui ne peut être réduite à la simple réponse diélectrique de la couche bidimensionnelle.

- Les dislocations créent des potentiels diffuseurs anisotropes. Or, l'approximation classique du temps de relaxation pour la résolution de l'équation cinétique de Boltzmann n'est pas cohérente avec de tels potentiels. Pour traiter ce problème, nous avons alors utilisé les résultats de la théorie dynamique; une approche proposée récemment et qui conduit à la définition d'un tenseur de fréquences de collision.

- L'étude des phénomènes de transport, en présence d'un champ magnétique intermédiaire permet d'obtenir des renseignements sur l'élargissement des niveaux de Landau créé par la présence de potentiels localisés. Or, les approches utilisées traditionnellement dans la littérature ne sont en fait valables que dans le cas de potentiels isotropes. Nous montrons qu'il est cependant possible de développer une approche théorique adaptée à la description des propriétés de transport anisotropes.

Notre étude s'articule de la façon suivante:

Nous rappelons succinctement dans le *premier chapitre* les propriétés de transport des gaz d'électrons bidimensionnels qu'il faut connaître pour appréhender l'ensemble de notre étude.

Dans le *second chapitre*, nous rappelons les propriétés plastiques des dislocations dans les matériaux III-V et nous décrivons l'étude expérimentale qui nous a permis de définir les chemins de déformation conduisant à l'introduction de dislocations bien contrôlées dans une direction unique.

Dans le *troisième chapitre*, nous décrivons les résultats expérimentaux obtenus sur les propriétés de transport en présence d'un champ magnétique et à basse température pour des couches électroniques bidimensionnelles des trois types suivants: i) des échantillons de référence, ii) des échantillons plastiquement déformés caractérisés par la présence de longs segments parallèles de dislocations iii) des échantillons partiellement relaxés en cours de croissance et caractérisés par la présence d'une seule famille de dislocations de désadaptation de réseau. Le comportement anisotrope des échantillons contenant des dislocations nécessite l'emploi d'une géométrie particulière des échantillons de mesure. Nous avons employé la géométrie de Van der Pauw car elle permet l'accès aux grandeurs caractéristiques du système 2D suivant les deux directions, parallèle et perpendiculaire aux défauts linéaires.

L'analyse théorique des résultats expérimentaux obtenus à champ magnétique nul fait l'objet du *quatrième chapitre* dans lequel nous décrivons d'abord le calcul de la réponse diélectrique des hétérostructures étudiés, avant d'utiliser la théorie dynamique pour décrire les phénomènes de transport en présence de potentiels diffuseurs anisotropes.

Dans le *dernier chapitre*, nous analysons le comportement des propriétés de transport en fonction du champ magnétique et en particulier discutons de la modification de la fonction densité d'états.

Les analyses menées dans ces deux derniers chapitres permettent de distinguer l'influence des dislocations introduites par déformation plastique de celle exercée par les dislocations de désadaptation des structures plastiquement relaxées.

# Chapitre I

## *Systèmes électroniques bidimensionnels*

*"In essence, the interface is the device."*

Hebert KROEMER (1993).

# Chapitre I

## Systemes électroniques bidimensionnels

---

Nous rappelons dans ce chapitre les propriétés électroniques principales des gaz électroniques bidimensionnels, soumis ou non à un champ magnétique statique. Nous nous intéressons essentiellement à leur comportement aux basses températures. La densité d'états retiendra tout particulièrement notre attention car son comportement détermine un grand nombre des propriétés physiques du gaz électronique bidimensionnel, en particulier, sa conductivité électrique.

L'application d'un champ magnétique perpendiculaire au gaz d'électrons bidimensionnel renforce la localisation spatiale des électrons et conduit donc à une forte quantification des niveaux d'énergie permis (niveaux de Landau). Après avoir rappelé dans une première partie les caractéristiques des systèmes 2D à base d'hétérojonctions semiconductrices, nous décrivons dans la seconde partie cette quantification. L'apparition des niveaux de Landau se traduit par un comportement singulier des phénomènes de transport électrique, illustré entre autres par l'effet Hall quantique, découvert en 1980 par K. Von Klitzing et al. Nous présentons dans la dernière partie de ce chapitre quelques propriétés caractéristiques du transport électrique des systèmes 2D contenant des potentiels diffuseurs *isotropes*.

La description préliminaire du comportement électrique "normal" des systèmes 2D présentée ici, nous permettra par la suite de mieux cerner les comportements perturbés voire originaux qui apparaîtront dans les systèmes 2D contenant des défauts linéaires *anisotropes*.

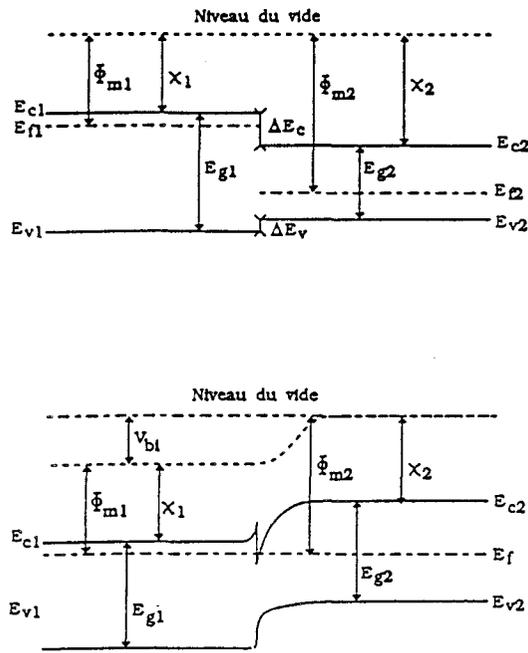


Figure 1.1- Diagramme d'Anderson

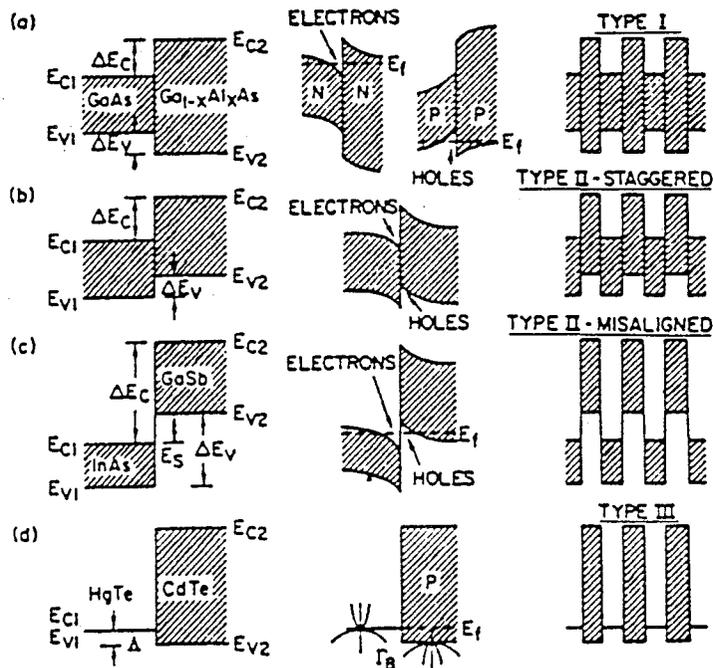


Figure 1.2 - Différentes catégories d'hétérojonctions.  
 (gauche) discontinuités des bandes,  
 (centre) accumulation de porteurs,  
 (droite) superréseau.

## I.1 - Gaz électroniques bidimensionnels

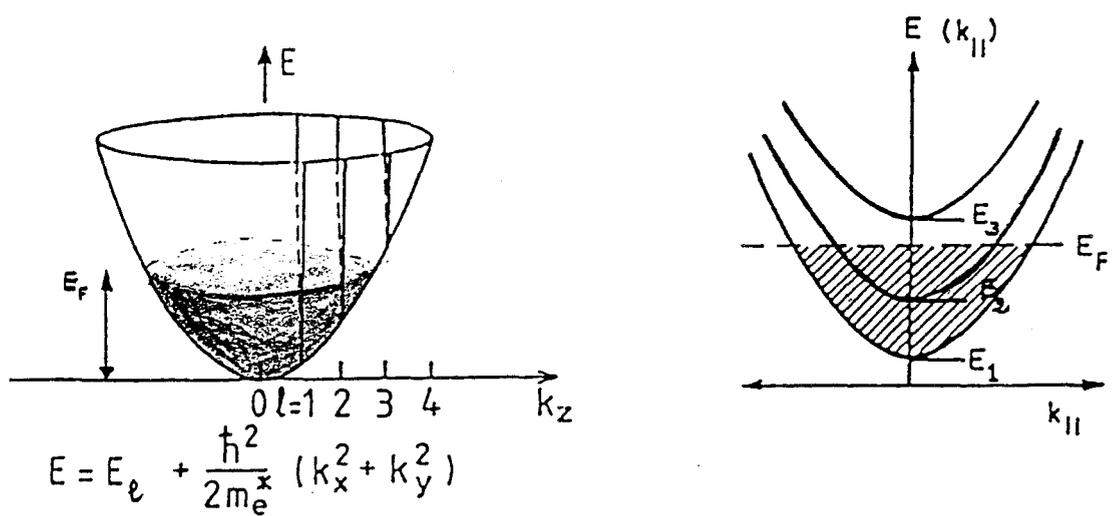
### I.1.1 - Hétérojonctions

L'accolement de matériaux semiconducteurs de structures de bandes différentes (par leur bande d'énergie interdite  $E_g$ , leur affinité électronique  $\chi$ , ou encore leur travail de sortie  $\phi$ ) se traduit d'une part, par des discontinuités de bandes de valence et de conduction au niveau des jonctions, d'autre part, par un transfert de charge en direction des zones de plus faible énergie des états de conduction. Ce transfert s'accompagne d'une courbure des différentes bandes au voisinage de la jonction, assurant à l'équilibre thermodynamique un niveau de Fermi constant dans toute la structure.

Anderson est l'un des premiers, à s'être intéressé aux hétérostructures (1960). Le diagramme d'Anderson (figure I.1), fondé sur la règle des affinités électroniques, permet une compréhension intuitive de la formation d'une hétérojonction et donne une allure approximative de la structure de bande à son voisinage:  $\Delta E_c = \Delta \chi$ ,  $\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta \chi$ . Les discontinuités des bandes de conduction et de valence sont des paramètres importants pour la connaissance de la nouvelle structure de bande, mais la détermination de  $\Delta \chi$  n'est pas aisée. Plusieurs règles (Kroemer 1993) issues de mesures expérimentales liant  $\Delta E_c$  à  $\Delta E_g$  sont actuellement proposées.

Trois types d'hétérojonctions peuvent être envisagées. Leurs structures de bandes sont brièvement décrites sur la figure I.2. Suivant la nature des matériaux en présence, une forte courbure des bandes peut entraîner l'existence, à la jonction des composés, de zones étroites où les bandes de conduction ou de valence plongent sous le niveau de Fermi créant, de ce fait, à l'interface une ou plusieurs couches d'accumulation de porteurs de charge. Le confinement de ces porteurs dans une direction de l'espace, leur confère un caractère quasi-bidimensionnel. Selon l'utilisation envisagée (transistor bipolaire ou à effet de champ, laser,...) le choix se portera sur l'une ou l'autre des structures possibles.

L'hétérostructure de type I est particulièrement intéressante. Le dopage sélectif du matériau à grande bande interdite (couche d'alimentation) permet de réaliser de façon simple un gaz électronique bidimensionnel. Ses propriétés de transport sont meilleures que celles du matériau massif: en particulier, la



**Figure 1.3** - Diagramme de dispersion pour un système électronique bidimensionnel.

séparation spatiale entre les porteurs libres transférés dans la couche d'accumulation et les impuretés de dopage de la couche d'alimentation permet d'atteindre des mobilités électroniques élevées. L'insertion entre la couche d'alimentation et le système 2D d'une couche non intentionnellement dopée de même composition que la couche d'alimentation (espaceur), réduit l'efficacité des potentiels diffuseurs associés aux impuretés ionisées de la couche d'alimentation en les éloignant davantage.

Ce type d'hétérostructure est à la base de la réalisation des transistors à effet de champ à gaz bidimensionnel ou TEGFET (Delagebeaudeuf et al. 1980) qui ont supplanté les transistors "massifs" de type MESFET du fait de leurs performances améliorées: mobilité accrue, meilleur contrôle de charge, performances supérieures dans le domaine des hyperfréquences.

### I.1.2 - Etats électroniques

La population électronique (densité électronique, fonction d'onde) dans le puits est fonction de la forme du puits: triangulaire dans le cas d'une simple hétérojonction, carré dans le cas d'une double hétérojonction, en "V" dans le cas d'un plan de dopage, parabolique pour certains types de superréseaux.

La faible épaisseur du puits de potentiel entraîne une valeur plus élevée du pas de quantification pour  $k_z$ , la composante normale au plan des couches du vecteur d'onde associé à chaque électron, que pour  $k_{//}$ , sa composante parallèle. Il s'ensuit, dans la direction normale, un espacement important des niveaux d'énergie discrets  $E_1, E_2, \dots$  accessibles aux électrons. On parle de *puits quantique*. L'énergie des électrons distribués sur les différents niveaux du puits ou sous-bandes paraboliques (figure I.3) est de la forme:

$$E = E_i + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (I.1)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck et  $m^*$  la masse effective des électrons dans le puits quantique. Les électrons accumulés dans le puits de potentiel conservent un comportement d'électrons quasilibres dans le plan de croissance, mais leur comportement dans la direction normale  $z$  est complètement lié: le système électronique est "dynamiquement" bidimensionnel. En fait, l'extension spatiale du gaz électronique dans la direction de croissance est de l'ordre de 100 Å.

La détermination des états électroniques du puits se fait de façon autocohérente par la résolution simultanée des équations de Schrödinger (contenant la forme du puits de potentiel) et de Poisson (liant le potentiel en chaque point à la densité de charge, c'est à dire au module carré de la fonction enveloppe). Une telle résolution passe obligatoirement par un traitement numérique (par exemple Happy 1992). Le calcul autocohérent permet, d'une part, de déterminer de façon précise les niveaux du puits et la répartition des porteurs sur chacun d'entre eux, d'autre part, d'estimer la forme réelle de la fonction enveloppe (la hauteur finie des barrières entraîne une probabilité de pénétration de la fonction enveloppe dans ces barrières non nulle). Dans le cas d'un puits triangulaire, une méthode variationnelle (Stern 1972), où la forme de la fonction enveloppe est approximée par une fonction de Fang-Howard paramétrée (1966), permet de calculer de façon satisfaisante la valeur du niveau fondamental  $E_1$ .

Des solutions analytiques peuvent être trouvées si on considère les cas simples du puits à barrières infinies. Les cas de puits de potentiel carré ou parabolique sont académiques. Les solutions exactes du puits carré sont des ondes stationnaires et l'énergie des différents niveaux est donnée par:

$$E_i = i^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* e_{ep}^2} \quad (I.2)$$

où  $e_{ep}$  est l'épaisseur du puits. Pour un puits parabolique, les solutions sont celles de l'oscillateur harmonique (niveaux  $E_i$  équidistants); pour un puits triangulaire (approximation d'une hétérojonction simple), un calcul semi-classique permet d'écrire les fonctions d'onde sous forme de fonctions d'Airy. Les niveaux d'énergie sont approximés par:

$$E_i = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3}{2} \pi e E (i + \frac{3}{4}) \right)^{2/3}$$

où  $E$  est le champ électrique local supposé constant, et  $e$  la charge de l'électron. La valeur de  $E_1$  calculée dans cette approximation est relativement correcte puisqu'elle diffère de moins de 10% du résultat d'un calcul autocohérent.

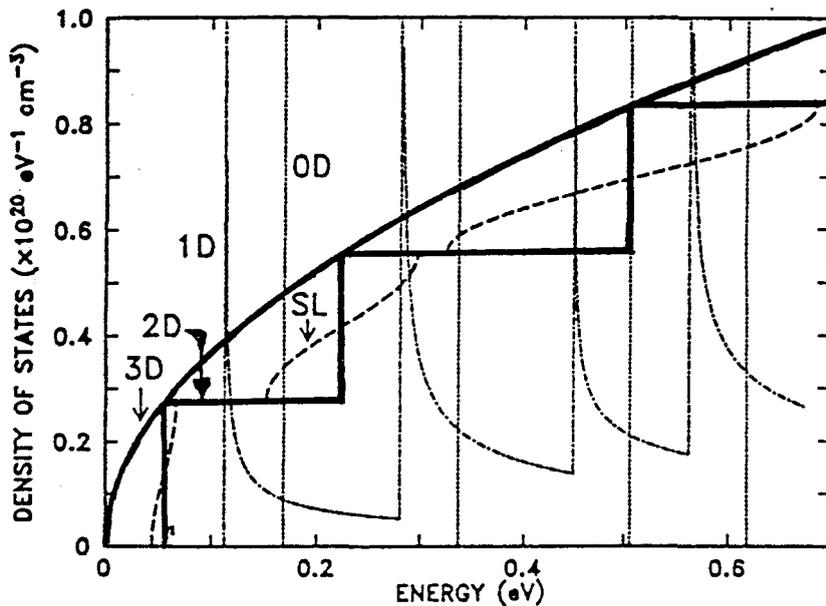
Dans les cas réels, l'efficacité du transfert électronique ainsi que l'efficacité du confinement seront fonction de l'importance de la discontinuité de la bande de conduction  $\Delta E_c$ , de la température, du dopage des composés barrières et éventuellement, dans le cas des structures à puits carré, de la largeur de ce puits et de celle de l'espaceur.

### I.1.3 - La densité d'états

La densité d'états dans l'espace réciproque  $N(k)$ , d'un système bidimensionnel est  $1/4\pi^2$ . Compte tenu de la forme de la relation de dispersion (I.1), la fonction densité d'états en énergie  $N(E)$  est, pour un système 2D, assez singulière puisqu'entre deux valeurs de  $E_i$ , elle est constante, alors que pour un système tridimensionnel elle est proportionnelle à  $\sqrt{E}$  (figure I.4). Elle est donnée par:

$$N(E) = N_0 \sum_i Y(E-E_i) \quad (I.3)$$

avec  $N_0 = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$  et où  $Y$  est la fonction échelon de Heaviside.



**Figure I.4** - Fonction densité d'états d'un système 2D comparée à celles des systèmes 3D, 1D, 0D et à celle des superréseaux (SL).

A l'aide de l'expression précédente, on obtient immédiatement la densité superficielle de porteurs libres à l'équilibre thermodynamique :

$$n_s = 2 \int_0^{\infty} N(E) f(E) dE = \sum_i n_i = \frac{m^* k_b T}{\pi \hbar^2} \sum_i \ln \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_b T}\right) \right]$$

où  $k_b$  est la constante de Boltzmann,  $E_F$  le niveau de Fermi et  $T$  la température absolue.

Pour des températures élevées, plusieurs sous-bandes sont occupées et des interactions entre différents niveaux du puits ainsi qu'avec les couches environnantes détériorent les qualités de conductivité de la couche 2D. Pour  $T \rightarrow 0$  K, les différentes populations sont simplement données par:

$$n_i = 2 N_0 (E_F - E_i) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i)$$

Lorsque le transfert de charge est suffisamment faible (par exemple dans le cas d'un faible dopage de la couche d'alimentation), et que l'énergie thermique  $kT$  est inférieure à l'espacement intersousbande, en dehors de toute transition optique éventuelle, une seule sous-bande parabolique est peuplée. Dans ce cas:

$$n_s = 2N_0 E_F \quad \text{ou encore} \quad 2\pi n_s = k_F^2 \quad (I.4)$$

On parle de "limite quantique électronique".

## I.2- Quantification magnétique

L'application d'un champ magnétique dans un milieu quelconque réorganise complètement la structure de bande dans le plan (Oxy) normal au champ B, laissant le spectre d'énergie inchangé parallèlement à B.

### I.2.1 - Niveaux de Landau

En présence d'un champ magnétique, le hamiltonien monoélectronique associé aux électrons d'un gaz 2D devient:

$$H = \frac{(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2}{2m^*} + eV(r) = H_0 + eV(r) \quad (I.5)$$

où  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  représente l'impulsion,  $\mathbf{A}$  le potentiel vecteur et où le potentiel cristallin périodique est pris en compte dans la masse effective  $m^*$ . Le terme  $eV(r)$ , qui rend compte de l'existence de défauts ou d'impuretés d'origines diverses, sera négligé dans un premier temps. On choisit la jauge de Landau  $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$  pour la définition du potentiel vecteur; le choix d'une jauge symétrique conduirait aux mêmes conclusions.

L'équation de Schrödinger,  $H_0\psi = E\psi$ , peut être résolue en choisissant une solution de la forme:

$$\psi(x,y,z) = e^{i\beta y} g(x).h(z)$$

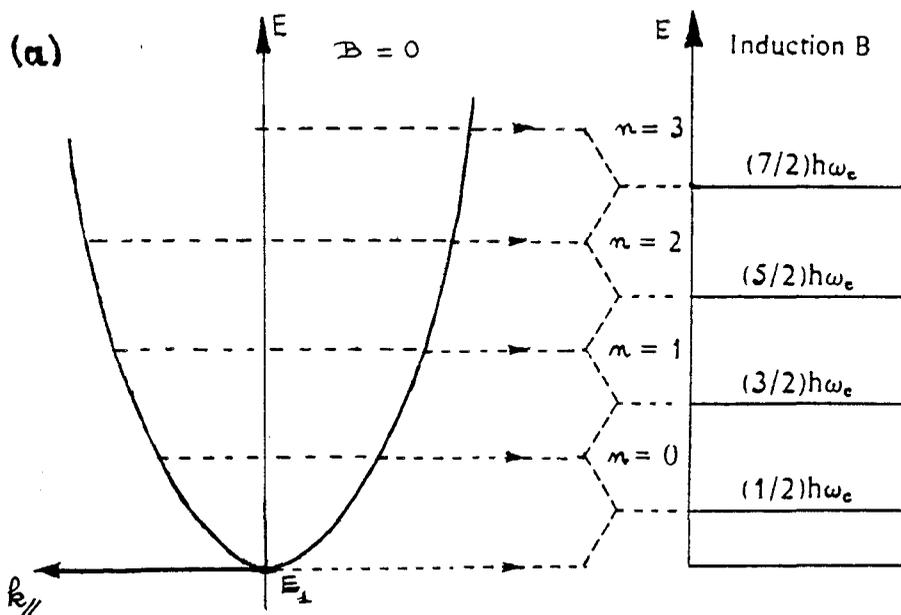
où  $h(z)$  est la composante de la fonction d'onde correspondant à la direction du champ magnétique B. L'équation de Schrödinger vérifiée par cette fonction ne dépend évidemment pas du champ B.

En utilisant les changements de variable suivants:

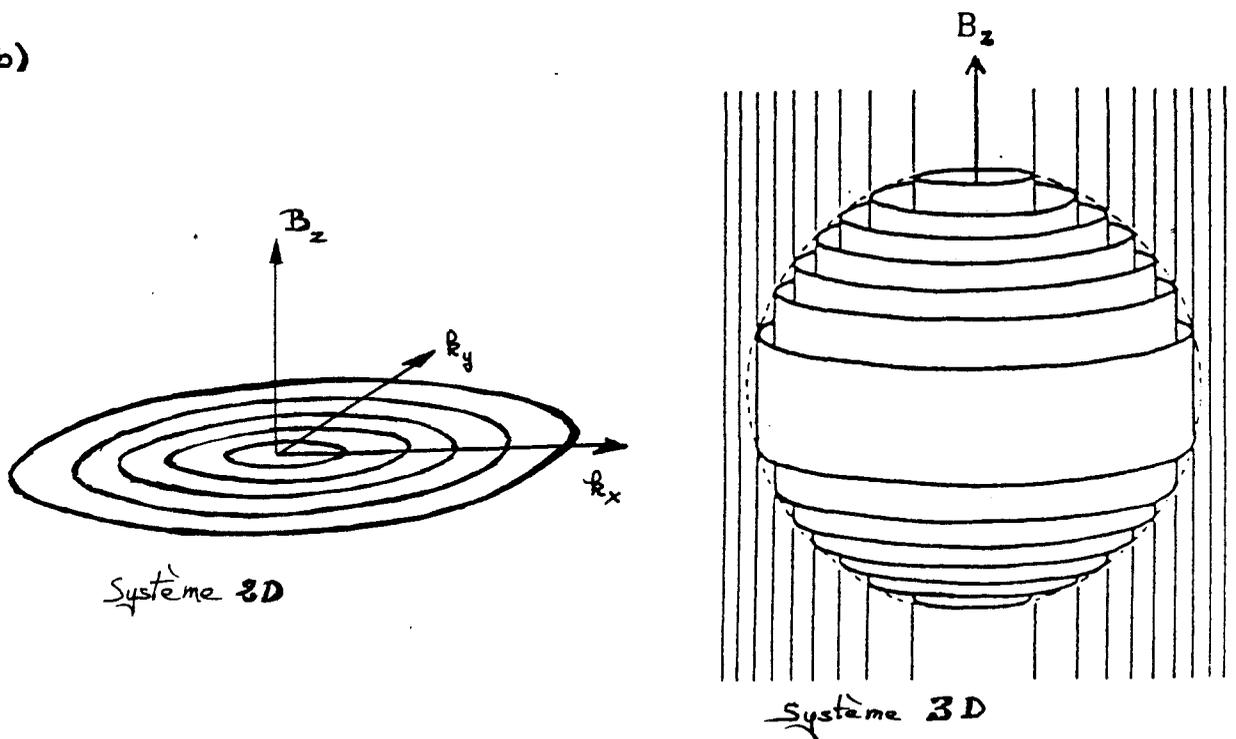
$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}, \quad x' = -x + x_0 = -x + \frac{\hbar\beta}{eB}, \quad E' = E - E_z,$$

où  $E_z$  représente le spectre d'énergie associé à la fonction  $h(z)$  et où  $x_0$  correspond à un centre de rotation cyclotron dans le plan normal au champ B, l'équation de Schrödinger devient:

$$E'.g(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 g}{\partial x'^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 x'^2 g(x')$$



(b)



**Figure 1.5** - (a) Condensation des états d'un système 2D en niveaux de Landau.  
 (b) Représentation dans l'espace réciproque des niveaux de Landau pour des systèmes 2D et 3D.

Cette équation différentielle correspond à celle d'un oscillateur harmonique de masse  $m^*$ , de pulsation  $\omega_c$  et de centre  $x_0$ . Elle ne possède de solutions que pour les valeurs propres:

$$E' = E_n = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) \quad \text{avec } n=0,1,2,3\dots$$

Les solutions  $g(x)$  peuvent être décrites par des polynômes d'Hermite.

L'application d'un champ magnétique se traduit ainsi par la quantification des états d'énergie dans le plan normal au champ  $B$  en des niveaux équidistants  $E_n$  appelés niveaux de Landau :

$$E(k_x, k_y, k_z) \Rightarrow E_z + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$$

Dans le cas d'un système 2D soumis à un champ  $B$  normal à ce système, ceci correspond à la quantification complète des niveaux d'énergie associés aux électrons

$$E = E_i + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) \quad (I.6)$$

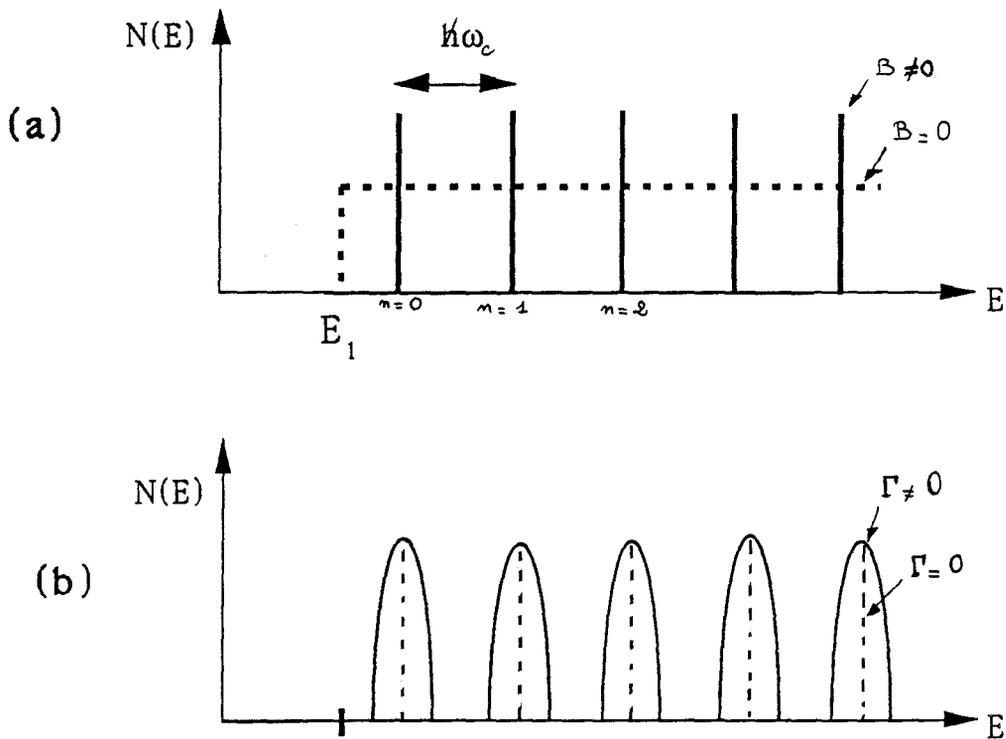
où  $E_i$  sont les niveaux fondamentaux des sous-bandes du puits quantique définis précédemment (figure I.5-a).

La figure I.5-b représente la répartition, dans l'espace réciproque, des états électroniques accessibles dans les cas de gaz d'électrons 2D et 3D. Dans le cas 3D, ces états sont regroupés sous forme de cylindres concentriques parallèles à la direction du champ  $B$ ; dans le cas 2D qui nous intéresse, ces domaines se réduisent à des ensembles de cercles concentriques: les électrons ne sont plus quasilibres.

Les fonctions d'onde sont données par:

$$\psi_{n,x_0}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! r_c \sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2r_c^2}\right] H_n\left(\frac{x-x_0}{r_c}\right) \exp[i\beta y]$$

où  $r_c^2 = \hbar/eB$  représente l'orbite cyclotron fondamentale. Elles sont définies par les deux nombres quantiques  $n$  et  $\beta$  (ou de façon équivalente par  $n$  et  $x_0$ ). Pour  $n$  fixé (relation (I.6)),  $E_n$  est indépendant de  $x_0$ . Ainsi, la dégénérescence  $\nu$  de chaque niveau de Landau est égale au nombre de valeurs que peut prendre  $x_0$ . Compte tenu



**Figure 1.6** - Quantification en niveaux de Landau.  
 (a) Densité d'états à  $T=0$  K, pour un système 2D idéal.  
 (b) Elargissement semi-elliptique des niveaux de Landau à champ magnétique élevé; système 2D réel .

des dimensions finies du cristal 2D:

$$0 < x_0 < L_x \text{ avec } x_0 = \frac{\hbar\beta}{eB}$$

Le paramètre  $\beta$  peut être quantifié en utilisant les conditions cycliques de Born-von Karman, qui conduisent à un écart entre deux de ses valeurs successives égal à  $2\pi/L_y$ . Ceci implique que les différentes valeurs de  $x_0$  sont espacées de:

$$\frac{2\pi\hbar}{L_y eB} = \frac{1}{L_y} \frac{\hbar}{eB}$$

et que la dégénérescence de chaque niveau de Landau (par unité de surface) est égale à:

$$\nu = \frac{eB}{h} \quad (I.7)$$

ou encore  $\nu = \frac{1}{2\pi r_c^2}$

Le spin de l'électron introduit le terme supplémentaire de Pauli:  $s\mu_B g^* B$ , où  $\mu_B$  est le magnéton de Bohr,  $g^*$  le facteur de Landé et  $s = \pm \frac{1}{2}$ . Il vient:

$$E_{l,n,s} = E_l + E_n + s\mu_B g^* B$$

### I.2.2 - La densité d'états

La transformation, par l'application d'un champ magnétique, du continuum d'énergie en un ensemble de niveaux discrets de Landau, se traduit par l'apparition de singularités dans la fonction densité d'états (figure I.6.a). Chaque ancien palier de  $N(E)$  est changé en une série de fonctions de Dirac espacées de  $\hbar\omega_c$ :

$$N(E) = \frac{eB}{h} \sum_{l,n,s} \delta(E - E_{l,n,s}) \quad (I.8)$$

Cette densité d'états est cependant modifiée par l'existence du potentiel  $V(r)$  associé aux défauts et impuretés du matériau. Nous montrons maintenant que cette modification correspond à une levée de dégénérescence des niveaux de Landau et donc à un élargissement des singularités de la fonction densité d'états.

Dans le cas des champs  $B$  élevés, un calcul simple de l'élargissement des niveaux de Landau est proposé par Ando et al. (1982), dans l'approximation auto-cohérente de Born. Ce modèle conduit à une forme semi-elliptique de l'élargissement de chaque niveau initial (figure I.6-b). Dans le cas des champs

magnétiques d'intensité intermédiaire, la forme de la fonction densité d'états est déterminée en décomposant l'opérateur "self-energy" (voir Economou 1990 pour une définition précise de ce concept) en sa partie réelle et sa partie imaginaire. Dans ce cas, l'élargissement de chaque niveau de Landau est de forme lorentzienne et conduit à une forme oscillante de la densité d'états.

Nous résumons ci-dessous les étapes essentielles du calcul de  $N(E)$  à  $T=0$  K et proposons dans le cas des champs intermédiaires une démonstration originale. Nous ne considérons pas la levée de dégénérescence de spin.

### 1.2.2.1 - Densité d'états en champ magnétique élevé

La densité d'états  $N(E)=\text{Tr}(\delta(E-H))$  correspond à la partie imaginaire de l'opérateur de Green (Economou 1990)

$$G(E) = \frac{1}{E - H + i\epsilon} = \frac{1}{E - eV - H_0 + i\epsilon} \quad (I.9)$$

soit:

$$N(E) = \text{Im}(\text{Tr}\langle G(E) \rangle) / \pi \quad (I.10)$$

Où le symbole  $\langle \dots \rangle$  signifie que l'on considère une valeur moyennée sur toutes les configurations possibles de la distribution de défauts. L'utilisation de l'équation de Dyson mène, après développement limité au second ordre, à l'expression de la valeur moyennée suivante (approximation auto-cohérente de Born: SCBA en anglais):

$$\langle G \rangle = G_0 + e^2 G_0 \langle VGV \rangle \langle G \rangle$$

où  $G_0$  représente la fonction de Green associée à  $H_0$ . Le terme  $\langle VGV \rangle$ , noté  $\Sigma$ , représente la "self-energy" (aucune traduction simple en français). Dans cette approximation, les opérateurs  $\langle G \rangle$  et  $\Sigma$  sont des opérateurs diagonaux si leurs éléments de matrice sont calculés dans la base des états propres de  $H_0$ . Soient  $|n, x_0\rangle$  les états de Landau définis par les deux nombres quantiques  $n$  et  $x_0$ . Compte tenu de l'expression de  $\Sigma$  en fonction de  $V$ , l'élément de matrice de la fonction de Green  $G$  (relation (I.9)) s'écrit:

$$G(n, x_0, E) = \langle n, x_0 | G | n, x_0 \rangle = \frac{1}{E - E_n - \Sigma(n, x_0, E)} \quad (I.11)$$

avec:

$$\Sigma(n, x_0, E) = \langle n, x_0 | \Sigma | n, x_0 \rangle = e^2 \sum_{n', x_0'} |\langle n, x_0 | V | n', x_0' \rangle|^2 G(E, n', x_0')$$

Puisque  $E_n$  est indépendante du centre de rotation  $x_0$ , les fonctions de Green et la "self-energy" le seront également,

$$G(n, x_0, E) = G(E, n) = \frac{1}{E - E_n - \Sigma(E, n)} \quad (I.12)$$

$$\Sigma(n, x_0, E) = \Sigma(E, n) = e^2 \sum_{n', x_0'} |\langle n, x_0 | V | n', x_0' \rangle|^2 G(E, n')$$

Si on pose:

$$\Gamma_{n, n'}^2 = 4e^2 \sum_{x_0'} |\langle n | V | n', x_0' \rangle|^2$$

alors:

$$\Sigma(n, E) = \frac{1}{4} \sum_{n'} \Gamma_{n, n'}^2 G(E, n')$$

Dans le cas des champs magnétiques  $B$  forts, les niveaux de Landau étant suffisamment espacés, les termes non diagonaux contenus dans la somme précédente peuvent être négligés:  $|\langle n | V | n' \rangle|^2 = \delta_{n, n'} |V(n)|^2$ , on obtient ainsi:

$$\Sigma(n, E) = \frac{1}{4} \Gamma_n^2 G(E, n)$$

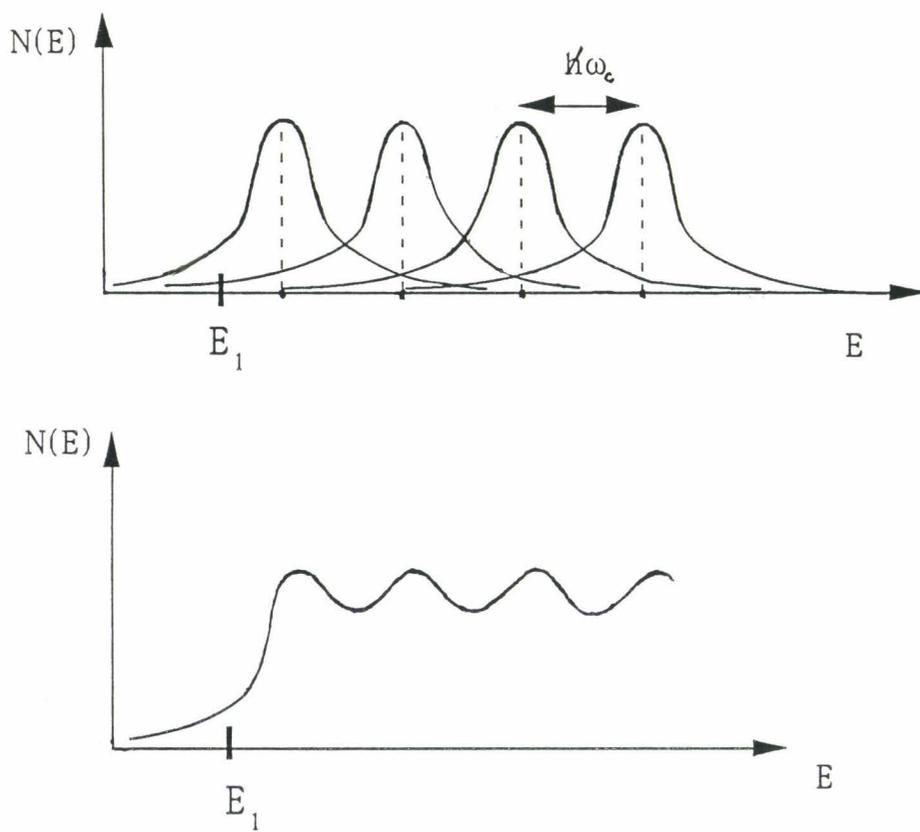
Introduite dans l'équation (I.12) reliant  $G(E, n)$  à  $\Sigma(E, n)$ , la fonction de Green  $G(E, n)$  vérifie une équation du second degré, dont la solution est:

$$G(E, n) = \frac{E - E_n}{\Gamma_n} \pm \frac{1}{\Gamma_n} \sqrt{\left[ \frac{E - E_n}{\Gamma_n} \right]^2 - 1}$$

Cette expression possède une partie imaginaire toutes les fois que  $|E - E_n| < \Gamma$ . La densité d'états est donc donnée par:

$$N(E) = \frac{v}{\pi} \sum_n \frac{1}{\Gamma_n} \sqrt{1 - \left[ \frac{E - E_n}{\Gamma_n} \right]^2}$$

où la dégénérescence  $v$  résulte de la somme sur les différentes valeurs de  $x_0$ .



**Figure I,7** - Elargissement lorentzien des niveaux de Landau pour des champs magnétiques intermédiaires (hypothèse d'un élargissement indépendant de  $n$ ).

L'élargissement des différents niveaux de Landau se fait bien sous forme semi-elliptique; la quantité  $2\Gamma_n$  représente la largeur de base de chaque semi-ellipse. Dans certains cas de potentiels diffuseurs (potentiels soit de courte portée, soit de longue portée) l'élargissement de chaque niveau de Landau devient indépendant de son indice  $n$  et du champ  $B$  (Ando et al. 1982).

Pour des champs magnétiques  $B$  faibles, cette description n'est plus valable, mais par extrapolation, on conçoit bien que  $N(E)$  restera une fonction oscillante et même périodique si l'élargissement de chaque niveau de Landau est indépendant de  $n$  et de  $B$ .

En pratique, les bords abrupts des formes semi-elliptiques trouvées pour  $N(E)$  ne correspondent pas aux évolutions des grandeurs physiques qui dépendent directement de  $N(E)$ . Cependant, en tenant compte des termes de diffusion multiples, il est possible de montrer que la forme des fonctions décrivant  $N(E)$  se situent plutôt entre une forme gaussienne et cette forme semi-elliptique. Il faut remarquer ici qu'une forme purement gaussienne a été obtenue par Gerhardt (1975) à l'aide d'une approche statistique étendue à plusieurs cumulants. La possibilité de l'existence d'états localisés situés sur les bords de chaque niveau de Landau élargi n'est pas incluse dans ce calcul.

### 1.2.2.2 - Densité d'états pour des champs $B$ intermédiaires

La "self-energy" (relation (I.12)) peut s'écrire sous la forme d'une partie réelle et d'une partie imaginaire:

$$\Sigma(n,E) = \Delta(n,E) + i\Lambda(n,E) = \Delta_n + i\Lambda_n$$

On peut donc exprimer la densité d'état  $N(E) = \text{Im}(\text{Tr } G(E))/\pi$  sous la forme d'une somme de lorentziennes de largeurs à mi-hauteur  $\Lambda_n$  (figure I.7):

$$N(E) = \frac{v}{\pi} \sum_n \frac{\Lambda_n}{(E - \Delta_n - \hbar\omega_c(n+1/2))^2 + \Lambda_n^2}$$

Dans les cas particuliers où l'on peut considérer que la "self-energy" est indépendante du niveau de Landau, et pour des énergies  $E$  suffisamment grandes, la fonction  $N(E)$  sera très proche d'une fonction périodique de période  $\hbar\omega_c$ .

En utilisant le changement de variable:

$$x = \frac{E - \Delta}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2}$$

on a

$$N(E) = \frac{v\Lambda}{\pi(\hbar\omega_c)^2} N(x)$$

avec

$$N(x) = \sum_n \frac{1}{(x-n)^2 + (\Lambda/\hbar\omega_c)^2}$$

$N(x)$  est une fonction périodique, de période 1. Elle peut être décomposée en une série de Fourier:

$$N(x) = \sum_{s=-\infty}^{+\infty} f(s) \exp(2i\pi s x) = f(0) + \sum_{s=1}^{+\infty} f(s) \cos(2\pi s x)$$

où:

$$f(s) = \int_0^1 N(x) \cos(2\pi s x) dx$$

en effectuant le changement de variable  $y = x-n$ , il vient:

$$f(s) = \sum_{n=0}^{+\infty} \int_{-n}^{1-n} \frac{\cos(2\pi s y) dy}{y^2 + (\Lambda/\hbar\omega_c)^2} = \int_{-1}^{+\infty} \frac{\cos(2\pi s y) dy}{y^2 + (\Lambda/\hbar\omega_c)^2}$$

(I.14)

Pour les grandes valeurs de  $E$ , la forme de la densité d'états cherchée dépendra très peu du fait que l'on somme une "demi-infinité" de lorentziennes plutôt qu'une infinité. La borne inférieure d'intégration, apparaissant dans la relation (I.14), peut donc être artificiellement étendue à  $-\infty$ . En utilisant le résultat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-iky} dy}{y^2 + \alpha^2} = \frac{\pi}{\alpha} e^{-k\alpha} \quad ,$$

on trouve alors:

$$f(s) = \frac{\pi\hbar\omega_c}{\Lambda} \exp\left(-\frac{2\pi s\Lambda}{\hbar\omega_c}\right).$$

L'expression finale de la densité d'états  $N(E)$  est ainsi donnée par:

$$N(E) = \frac{v}{\hbar\omega_c} \left( 1 + 2 \sum_{s=1}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2\pi s\Lambda}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(\frac{2\pi s(E-\Delta)}{\hbar\omega_c} - \pi s\right) \right)$$

avec  $v/(\hbar\omega_c) = m^*/(2\pi\hbar^2) = N_0$  (densité d'états libres du système 2D à  $B=0$ ).

La présentation que nous venons de faire est originale puisque, jusqu'à présent, les démonstrations conduisant à ce type de relation limitaient la somme sur l'indice des niveaux de Landau, à une valeur adéquate pour que la relation finale ne diverge pas.

L'effet de la température, négligé dans le calcul précédent, peut être introduit dans l'expression de la densité d'états sous la forme du facteur de pondération  $X(T)$ :

$$X(T) = st / \sinh(st) \quad \text{avec} \quad t = 2\pi k_b T / \hbar\omega_c$$

$$N(E) = N_0 \left( 1 + 2 \sum_{s=1}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2\pi s\Lambda}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(\frac{2\pi s(E-\Delta)}{\hbar\omega_c} - \pi s\right) X(T) \right) \quad (\text{I.15})$$

De manière générale, le terme exponentiel est rapidement convergent, ce qui permet de limiter la somme au premier terme  $s=1$ . Dans ce cas, à champ  $B$  fixe, la densité d'états peut être assimilée à une fonction périodique sinusoïdale de l'énergie. Pour une énergie donnée  $E$ ,  $N(E)$  variera exponentiellement en fonction de  $B$  et présentera un caractère oscillatoire périodique en  $1/B$ .

Le terme  $\Lambda$  correspondant à la partie imaginaire de la "self-energy" joue un rôle prépondérant dans le comportement de  $N(E)$  en fonction de  $B$ . Dans la mesure où  $\Lambda$  a été considérée comme une fonction indépendante de  $n$  (et par conséquent de  $B$ ), une expression simplifiée de ce terme peut être obtenue

- en substituant dans l'équation de Dyson la valeur  $G_0$  à la valeur  $\langle G \rangle$  (approximation simple du second ordre),
- en utilisant la base des états libres  $|k\rangle$  pour évaluer les éléments de matrice.

On trouve alors:

$$\Lambda = \pi e^2 \sum_{k'} |\langle k|V|k'\rangle|^2 \delta(E-E_{k'})$$

Cette expression est semblable, à un facteur  $(1-\cos(k,k'))$  près, à la définition semi-classique du temps de relaxation de Boltzmann (cf. (I.20)). Par analogie on pose:

$$\Lambda = \frac{\hbar}{2 \tau_q}$$

où  $\tau_q$ , appelé temps de vie quantique, correspond à l'expression:

$$\frac{1}{\tau_q} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V(k'-k)|^2 \delta(E-E_{k'}) d^2k \quad (I.16)$$

Avec cette notation, la densité d'états est donnée par:

$$N(E) = N_0 \left( 1 - 2 \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q(E)}\right) \cos\left(\frac{2\pi s(E-\Delta)}{\hbar \omega_c}\right) X(T) \right)$$

### I.2.2.3 - Conséquences

Plusieurs grandeurs physiques sont étroitement liées à l'évolution de la densité d'états avec B. La quantification de l'énergie leur confère un comportement magnéto-oscillatoire, périodique en 1/B (Gornik 1987); c'est ainsi le cas de la chaleur spécifique, de la susceptibilité magnétique (effet De Haas-Van Alphen, 1930) ou de la magnétorésistance (effet Shubnikov-De Haas, 1930). Compte tenu de l'aspect plus marqué des singularités de la fonction densité d'états dans les systèmes 2D par rapport à celle dans les systèmes 3D, ces comportements y sont plus prononcés. La présence, à champ B élevé, de bandes d'énergie interdites séparant les niveaux de Landau, entraîne des comportements singuliers caractéristiques du gaz électronique 2D lorsque le niveau de Fermi s'y trouve localisé.

Quoi qu'il en soit, les effets de la quantification ne sont clairement observés qu'à condition que l'espacement  $\hbar\omega_c$  entre niveaux de Landau soit nettement supérieur à  $k_b T$ . La première condition d'observation des effets magnéto-oscillatoires sera donc:  $\hbar\omega_c \gg k_b T$ .

La seconde limitation est bien évidemment liée à la largeur des niveaux de Landau:  $\hbar\omega_c \gg 2\lambda$  ou encore  $\omega_c\tau_q \gg 1$ . Compte-tenu de la "parenté" de  $\tau_q$  avec le temps de relaxation de Boltzmann  $\tau_B = m\mu/e$  (où  $\mu$  est la mobilité électronique du système; cf. §I.3) certains auteurs résument (abusivement) cette condition à l'inégalité:  $\mu B \gg 1$ .

En pratique, l'effet de quantification ne sera donc observable qu'à champ magnétique suffisamment grand ("champs magnétiques quantifiants"); d'autant plus grand que le puits 2D sera de mauvaise qualité et que la température sera élevée.

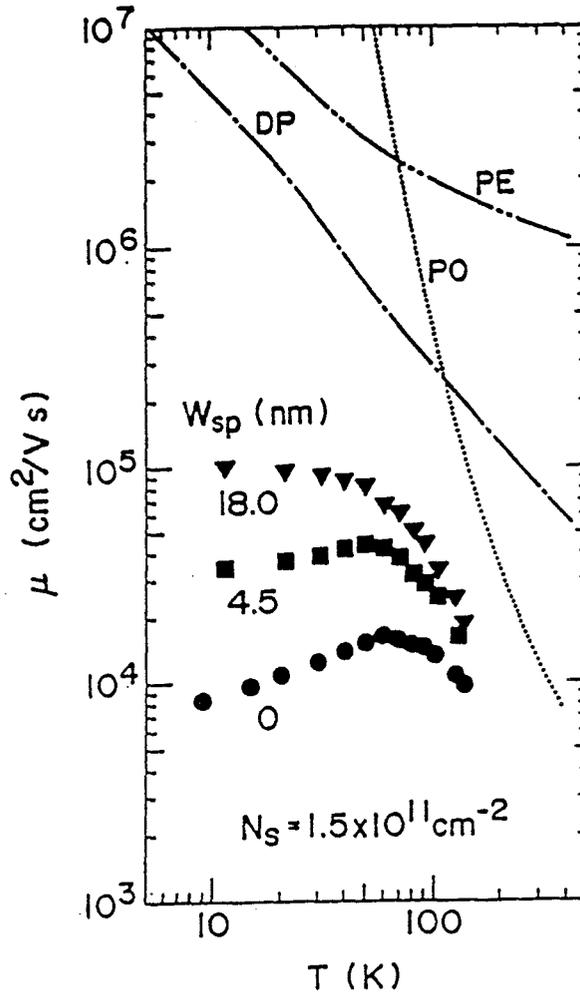


Figure 1.8 - Mobilité électronique d'un gaz 2D dans une hétérostructure GaAlAs-GaAs (d'après Hirakawa et Sakaki 1986).

A basse température: diffusion par les impuretés ionisées.  
 A partir de 50 K: diffusion par les phonons optiques (PO).  
 $W_s$ : épaisseur de l'espaceur.

## I.3- Propriétés de transport

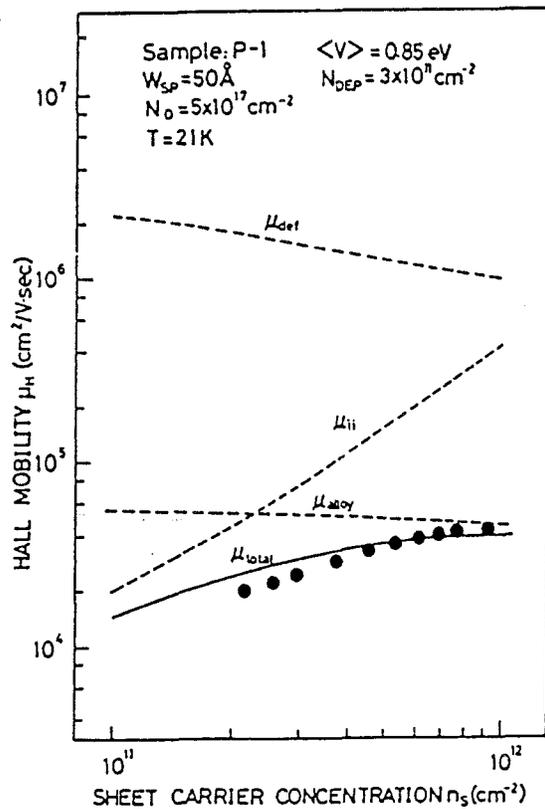
### I.3.1 - Transport à champ magnétique nul

Les propriétés de transport dans les systèmes électroniques 2D et leurs applications ont fait l'objet d'un très grand nombre d'études aussi bien théoriques qu'expérimentales. On pourra par exemple se référer à la revue assez complète d'Ando et al. (1982) ou pour une présentation plus technologique au livre de Sze (1990).

L'intérêt des systèmes bidimensionnels, dans la fabrication des composants électroniques tels que les transistors à effet de champ (cf.I.1), réside dans le fait que ces structures permettent d'obtenir par rapport aux matériaux massifs, des mobilités des porteurs libres très élevées dues, d'une part, à la séparation spatiale entre porteurs et impuretés dopantes, d'autre part, à l'emploi de matériaux de faible masse effective pour la couche active.

En supposant parfaite la technologie de croissance épitaxiale, la mobilité des porteurs libres dans de tels systèmes ne serait limitée que par deux mécanismes intrinsèques: les phonons, à haute température (figure I.8) et les impuretés de dopage dont l'effet peut toutefois être amoindri par l'ajout d'un espaceur. A basse température, la diffusion par les phonons devenant totalement négligeable, le seul effet de diffusion inévitable est dû aux impuretés de dopage. En pratique, cette mobilité optimale ne peut être atteinte à cause de la présence d'autres types de défauts (intrinsèques ou extrinsèques) incontrôlables, pouvant encore être actifs à basse température, à savoir:

- le désordre d'alliage associé à la distribution aléatoire sur le réseau cristallin des différents éléments III ou V dans le cas de puits ou de milieux extérieurs constitués de matériaux ternaires ou quaternaires (Brum et Bastard 1985),
- les impuretés résiduelles situées dans le puits ou aux interfaces (leur densité minimum est de l'ordre de  $10^9 \text{cm}^{-2}$ ),
- les fluctuations de dopage de la couche d'alimentation,
- la diffusion porteur-porteur ou interbande, lorsque plusieurs sous-bandes du puits sont peuplées,



**Figure 1.9** - Diffusion liée au désordre d'alliage dans un puits  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As} - \text{Ga}_{0.87}\text{In}_{0.13}\text{As}$  (200 Å) - GaAs (d'après Luo et al. 1988).  
 La différence entre les données expérimentales (●) et la modélisation serait due à un mécanisme de diffusion supplémentaire lié aux inhomogénéités de composition de l'alliage ("cluster scattering").

- la qualité des interfaces du puits ou rugosité (une légère rugosité des interfaces peut produire d'importantes fluctuations de la quantification des états d'énergie du gaz 2D) (Ando 1982, Battacharyya 1993),
- la conduction parallèle dans la couche d'alimentation ou tout autre canal parallèle, dans lesquels le transport est médiocre (Schubert et al.1984, Kusters et al. 1992),
- la présence de défauts de réseau tels que les dislocations de désadaptation de réseau ou de macles dans des structures plastiquement relaxées,
- les marches rectilignes laissées éventuellement soit lors de la croissance épitaxiale des couches, soit par le glissement des dislocations aux interfaces des couches 2D (cf. chapitre II).

Aux basses températures (où nous avons situé notre étude expérimentale), la mobilité électronique des hétérostructures de type III-V telles que GaAlAs-GaAs épitaxiées par Jets Moléculaires (EJM) est essentiellement gouvernée par la diffusion sur les impuretés ionisées dans le puits (impuretés résiduelles) ou à l'extérieur du puits ("remote impurities"). La rugosité d'interface, qui reste un problème majeur de la filière Silicium (interface oxyde-semiconducteur), est tout à fait négligeable pour les composés III-V, à condition toutefois que le puits quantique ne soit pas trop fin. Dans le cas de structures où le transport des porteurs libres s'effectue dans un composé ternaire ou quaternaire (tel que dans le système GaInAs-InP ou GaInAs-GaAs), c'est la diffusion par le désordre d'alliage qui est prépondérante ou tout au moins du même ordre de grandeur que la diffusion par les impuretés ionisées (figure I.9).

Les phénomènes de conductivité observés à champ magnétique nul et associés aux mécanismes de diffusion énoncés précédemment sont dissipatifs. Ainsi, les approches théoriques les plus simples des phénomènes de transport en champ magnétique nul sont fondées soit sur des bilans d'énergie (Méthode de l'énergie perdue; Gerlach 1974, 1977), soit sur des bilans de forces (Théorie dynamique; Farvacque 1989, a-1994), soit sur la résolution analytique (voir par exemple Kireev 1975) ou numérique (méthode de Monte Carlo; par exemple Thobel et al. 1993) de l'équation cinétique de Boltzmann.

Notons que, contrairement aux techniques de résolution de l'équation cinétique, les deux premières méthodes sont fondées sur les propriétés de la réponse diélectrique du gaz de porteurs libres et incluent dans leur principe l'action de potentiels diffuseurs écrantés alors que ceux-ci sont introduits de façon artificielle lors de la résolution de l'équation cinétique. Une autre distinction majeure, concerne l'analyse des potentiels diffuseurs anisotropes. Nous montrerons dans le chapitre IV que seule la théorie dynamique de Farvacque fournit une approche correcte de ce type de diffusion.

Dès lors que l'approximation de la masse effective est utilisée, que l'hypothèse de potentiels isotropes est posée, que les fonctions d'ondes des porteurs libres sont assimilées à des ondes planes et que les termes de champ locaux sont négligés (Farvacque b-1994), l'approche dynamique conduit à une formulation identique à celle issue de l'équation cinétique de Boltzmann.

Dans un système bidimensionnel, l'application d'un champ électrique  $E$  extérieur (en régime ohmique) induit un courant électrique qui peut aisément s'écrire ( $e < 0$ ):

$$\mathbf{j} = -2e \int N(\mathbf{k}) \delta f(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} \quad (I.17)$$

où la variation  $\delta f(\mathbf{k})$  représente la modification, suite à l'application d'un champ extérieur, de la fonction d'occupation  $f(\mathbf{k})$  d'un état  $\mathbf{k}$  consécutive à l'accroissement moyen de la vitesse associée à cet état d'une quantité  $v_D(\mathbf{k})$ . Elle est directement donnée par:

$$\delta f(\mathbf{k}) = - \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_D(\mathbf{k}) \quad (I.18)$$

La vitesse de dérive  $\mathbf{v}_D(\mathbf{k})$  vérifie bien évidemment l'équation fondamentale de la dynamique tenant compte d'un terme de friction homogène à l'inverse d'un temps  $\tau(\mathbf{k})$ , appelé temps de collision (correspondant au temps de relaxation dans l'approche de Boltzmann):

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_D(\mathbf{k})}{dt} = -e\mathbf{E} - m^* \frac{\mathbf{v}_D(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})}$$

$1/\tau(\mathbf{k})$  représente la probabilité pour un électron d'être diffusé lorsque son vecteur  $\mathbf{k}$  a pour module  $k$ . La solution stationnaire de cette équation est:

$$\mathbf{v}_D(\mathbf{k}) = - \frac{e\tau(\mathbf{k})\mathbf{E}}{m^*}$$

Une fois introduite dans l'équation (I.17) et après avoir remplacé la densité d'états

libres  $N(k)$  par  $1/4\pi^2$ :

$$j = -\frac{e^2 \hbar^2}{2\pi^2 m^{*2}} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(k) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{k} d^2k \quad (\text{I.19})$$

Un bilan des énergies pour un état  $k$  conduit à l'expression de la fréquence de collision  $1/\tau(k)$ :

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{e^2}{2\pi \hbar^2} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 (1 - \cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}')) \delta(E(k') - E(k)) d^2k' \quad (\text{I.20})$$

où:  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ,

$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{q})/\epsilon(\mathbf{q})$  est la transformée de Fourier du potentiel diffuseur total écranté avec  $V_{\text{ext}}(\mathbf{q})$  le potentiel correspondant aux défauts placés dans le vide;  $\epsilon(\mathbf{q})$  est la fonction diélectrique communément associée dans la littérature à la seule réponse diélectrique du gaz électronique bidimensionnel.

Dans les métaux, mais aussi dans les systèmes électroniques 2D confinés dans un puits quantique, à température suffisamment faible, la dérivée de la fonction d'occupation  $-\partial f_0/\partial E$  est analogue à la fonction de Dirac  $\delta(E - E_F)$  (tout se passe comme si le transport était uniquement assuré par les électrons situés sur le cercle de Fermi): seule compte la valeur de  $\tau(k)$  pour  $k = k_F$ . La mobilité  $\mu$  du gaz électronique 2D, reliant la densité de courant au champ électrique selon  $j = \sigma E = n_s e \mu E$  (loi d'Ohm), est alors un scalaire donné par:

$$\mu = \frac{e \tau(E_F)}{m^*}$$

Dans le cas de la diffusion par des impuretés ionisées séparées du gaz électronique 2D par un espaceur d'épaisseur  $d$ , une expression simplifiée de la mobilité, fondée sur l'expression de  $\tau$  proposée par Lee et al. (1983), conduit à:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{m^*}{e\tau} = \frac{N e^3 m^{*2}}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r \hbar^3} f(k_F, \beta)$$

$$\text{avec} \quad f(k_F, \beta) = \int_0^{2\pi} \frac{u e^{-4k_F d u}}{u + \beta/(4k_F)} d\theta \quad u = \sin(\theta)$$

où  $k_F$  est le module du vecteur d'onde associé au niveau de Fermi et  $\beta$  est le vecteur d'écran dans l'approximation de Thomas-Fermi.

Pour la diffusion d'alliage, nous donnons pour mémoire l'expression simplifiée couramment employée dans la littérature (Bastard 1988, Bhattacharyya-1993). Dans le cas où le puits est constitué d'un composé ternaire  $A_xA'_{1-x}B$  et où la fonction enveloppe est approximée par la fonction de Fang-Howard:

$$\mu_{\text{all}} = \frac{e\tau_{\text{all}}}{m^*} = \frac{16\hbar^3 e}{3m^{*2}\Omega_0[\delta V]^2 x(1-x)b} \quad (\text{I.21})$$

- où
- $b$  est le paramètre variationnel de Fang-Howard,  $b = (12 eFm^*/\hbar^2)^{1/3}$ .
  - $\Omega_0$  est le volume d'une maille du réseau,
  - $[\delta V]$  représente la différence entre les potentiels cristallins des deux composés binaires constitutifs de l'alliage ternaire; dans le cas du GaInAs  $[\delta V]$  est communément estimé entre 0,5 et 0,9 eV.

Pour la gamme usuelle des densités de porteurs  $n_s$ , la mobilité d'alliage varie comme  $n_s^{-1/3}$  et est d'autant plus élevée que le puits est large (variation linéaire avec la largeur du puits (Gold 1988)).

## I.3.2 - Transport en présence d'un champ magnétique

### I.3.2.1 - Introduction

L'étude théorique des phénomènes de transport en champ magnétique suffisamment faible peut généralement se faire, soit en résolvant numériquement l'équation cinétique de Boltzmann, soit en utilisant une approche dynamique fondée sur les propriétés diélectriques des porteurs de charge. A l'instar de l'étude à champ  $B$  nul, ces théories conduisent dans leur fondement à évaluer la modification  $\delta f(k)$  du taux d'occupation statistique d'un état  $k$ , mais négligent toute modification de la densité d'états libres  $N(k,B)$  consécutive à l'application du champ magnétique. Dans de telles conditions, la densité de courant électrique macroscopique  $j$  vérifie toujours la relation (I.17). Quant à l'expression de la variation  $\delta f(k)$  (relation (I.18)), elle dépend cette fois-ci d'une vitesse de dérive  $v_D(k)$  vérifiant une équation fondamentale de la dynamique fonction du champ  $B$ :

$$m^* \frac{dv_D(k)}{dt} = -eE - ev_D(k)*B - m^* \frac{v_D(k)}{\tau(k)}$$

La solution stationnaire associée s'écrit:

$$\mathbf{v}_D(\mathbf{k}) = \frac{-1}{1+\omega_c^2 \tau^2(\mathbf{k})} \left[ \frac{e\tau}{m^*} \mathbf{E} + \frac{e^2 \tau^2}{m^{*2}} \mathbf{B}^* \mathbf{E} \right] \quad (\text{I.22})$$

où l'on a introduit la fréquence cyclotron  $\omega_c = eB/m^*$ . En introduisant l'expression de  $\delta f(\mathbf{k})$  dans la relation (I.17), l'utilisation de la loi d'Ohm nous permet de déterminer le tenseur de conductivité  $\sigma$ .

- L'expression de la conductivité longitudinale est directement donnée par

$$\sigma_{jj} = \frac{2e^2 \hbar}{m^{*2}} \int N(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\tau(\mathbf{k}) k_j^2}{1+\omega_c^2 \tau^2(\mathbf{k})} d^2 \mathbf{k} \quad (\text{I.23})$$

Puisque dès le départ nous décrivons implicitement des centres diffuseurs à symétrie sphérique:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma = \int \frac{\partial f_0}{\partial E} N(E) \frac{E \tau(E)}{1+\omega_c^2 \tau^2(E)} dE$$

A température suffisamment faible,  $-\partial f_0/\partial E$  peut être approximée par la fonction de Dirac  $\delta(E-E_F)$ . De plus,  $2N(E_F)E_F = n_s$  est le nombre total de porteurs libres. Dans un tel cas, l'expression de la conductivité longitudinale est directement donnée par:

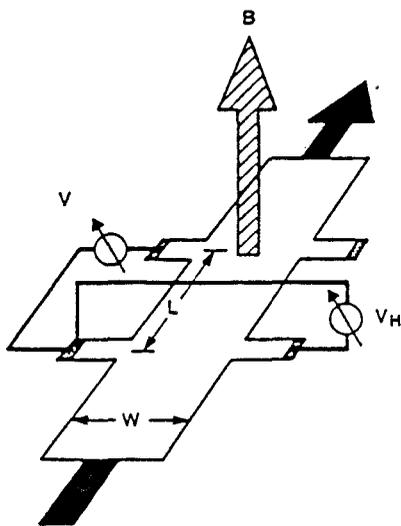
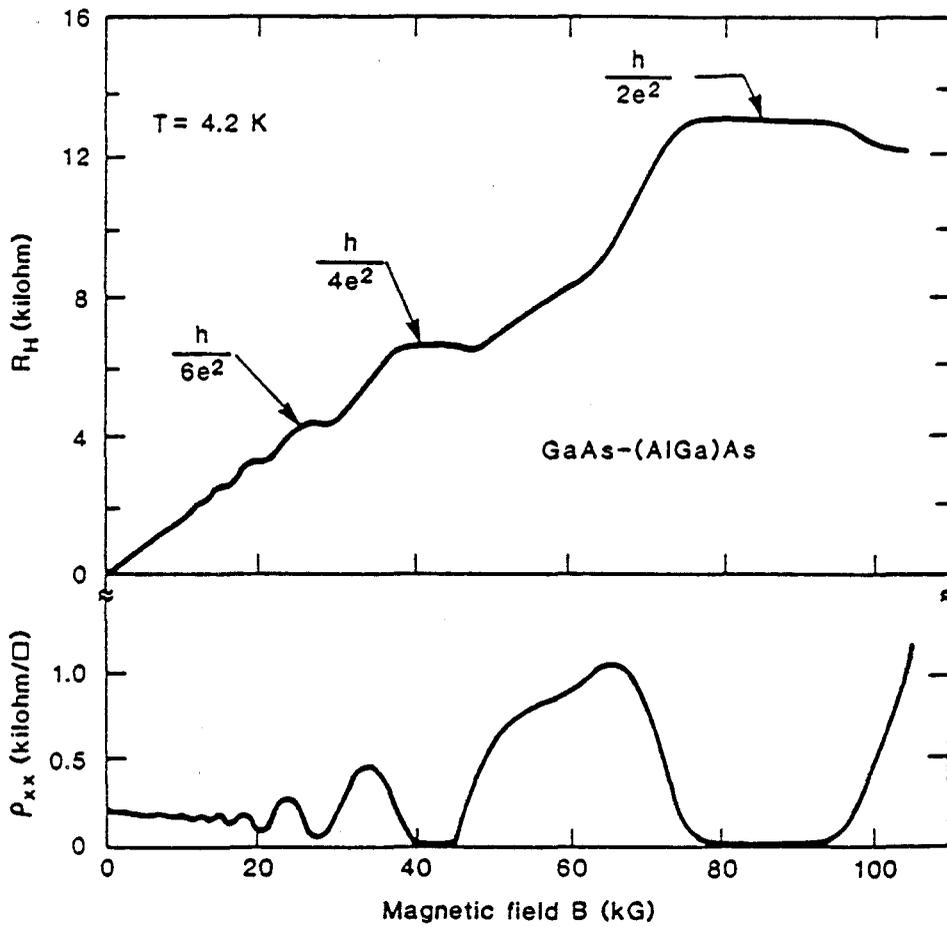
$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1+\omega_c^2 \tau^2} \quad (\text{I.24})$$

avec  $\sigma_0 = \frac{n_s e^2 \tau}{m^*}$  et  $\tau = \tau(E_F)$

- L'expression de la composante transverse de Hall s'écrit quant à elle :

$$\sigma_{xy} = -\frac{\omega_c \tau \sigma_0}{1+\omega_c^2 \tau^2} \quad (\text{I.24}')$$

Le raisonnement semi-classique que nous avons adopté conduit à une formulation des phénomènes de magnéto-transport à bas champ strictement équivalente à la formulation classique de Drude. Elle permet d'interpréter l'évolution linéaire en fonction de  $B$ , de la résistivité transverse (effet Hall



Hall resistance

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{W \cdot E_H}{W \cdot j} = \rho_{xy}$$

Resistivity

$$\rho_{xx} = \frac{E}{j} = \frac{V}{I} \frac{W}{L}$$

**Figure 1.10** - Effet Shubnikov-De Haas et effet Hall quantique dans une hétérostructure GaAlAs-GaAs.

classique pour un seul type de porteurs):

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2} = -\frac{B}{n_s e}$$

et prévoit une résistivité longitudinale  $\rho_{xx}$  a priori constante.

En fait, le principal apport de ce raisonnement semi-classique par rapport au modèle de Drude, est la possibilité de calculer la fréquence de collision  $1/\tau(k)$  au moyen de la relation (I.20).

Lorsque le champ magnétique est fort, la condensation des états électroniques libres sous forme de niveaux de Landau régulièrement espacés modifie la densité d'état  $N(k)$  qui devient elle même une fonction de  $B$  ainsi que le temps de relaxation  $\tau(k)$ . Les phénomènes de magnétotransport s'écartent de ceux décrits ci-dessus et ne sont plus interprétables par les expressions semi-classiques. Il deviennent étroitement liés à la nouvelle forme de la fonction densité d'états  $N(E)$ : la résistivité longitudinale présente des oscillations prononcées en fonction du champ magnétique - effet Shubnikov-De Haas - et la résistivité transverse cesse d'être linéaire pour présenter des plateaux de résistivité situés à des valeurs égales à une fraction entière de  $h/e^2$  - effet Hall quantique -. La figure I.10 illustre ces deux effets quantiques dans la cas d'une hétérostructures GaAlAs-GaAs.

Les oscillations de magnétorésistance dans un système bidimensionnel furent pour la première fois observés dans une couche d'inversion à la surface d'un substrat silicium par Fowler et al (1966). Depuis, l'effet Shubnikov-De Haas n'a cessé d'être mesuré et caractérisé dans des systèmes 2D supportés par des hétérostructures semiconductrices variées: IV-IV, III-V ou II-VI. La présence d'amples oscillations et de zéro de résistivité en fonction du champ magnétique est souvent considérée comme la signature d'un système bidimensionnel.

L'effet Hall quantique, découvert beaucoup plus récemment par Von Klitzing et al. (1980, 1986, Landwehr 1986) est quant à lui devenu l'un des principaux centres d'intérêt de la décennie passée, tant au niveau expérimental qu'au niveau théorique (Macdonald 1989, Prange 1990).

### I.3.2.2 - Magnétotransport en champ magnétique intermédiaire

Le moyen le plus simple d'obtenir une description des phénomènes de magnétotransport évoqués ci-dessus, consiste à utiliser la formulation semi-classique et à considérer maintenant que la densité d'états dépend également du champ magnétique. Cependant, puisque les états libres initialement décrits par des ondes planes  $|k\rangle$  se transforment progressivement en états de Landau, seule la description de la densité d'états dans l'espace des énergies  $N(E)$  peut être utilisée pour obtenir les corrections désirées. Son expression est donnée par la relation (I.15), qui peut se réécrire de façon rigoureuse sous la forme:

$$N(E_F) = N_0 \left( 1 + \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (I.25)$$

Lorsque l'on se limite au premier terme de la suite définissant  $N(E)$  dans l'expression (I.15), on a:

$$\frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} = -2 \exp\left(-\frac{2\pi s \Lambda}{\hbar \omega_c}\right) \cos\left(\frac{2\pi s (E_F - \Delta)}{\hbar \omega_c}\right) X(T) \quad (I.26)$$

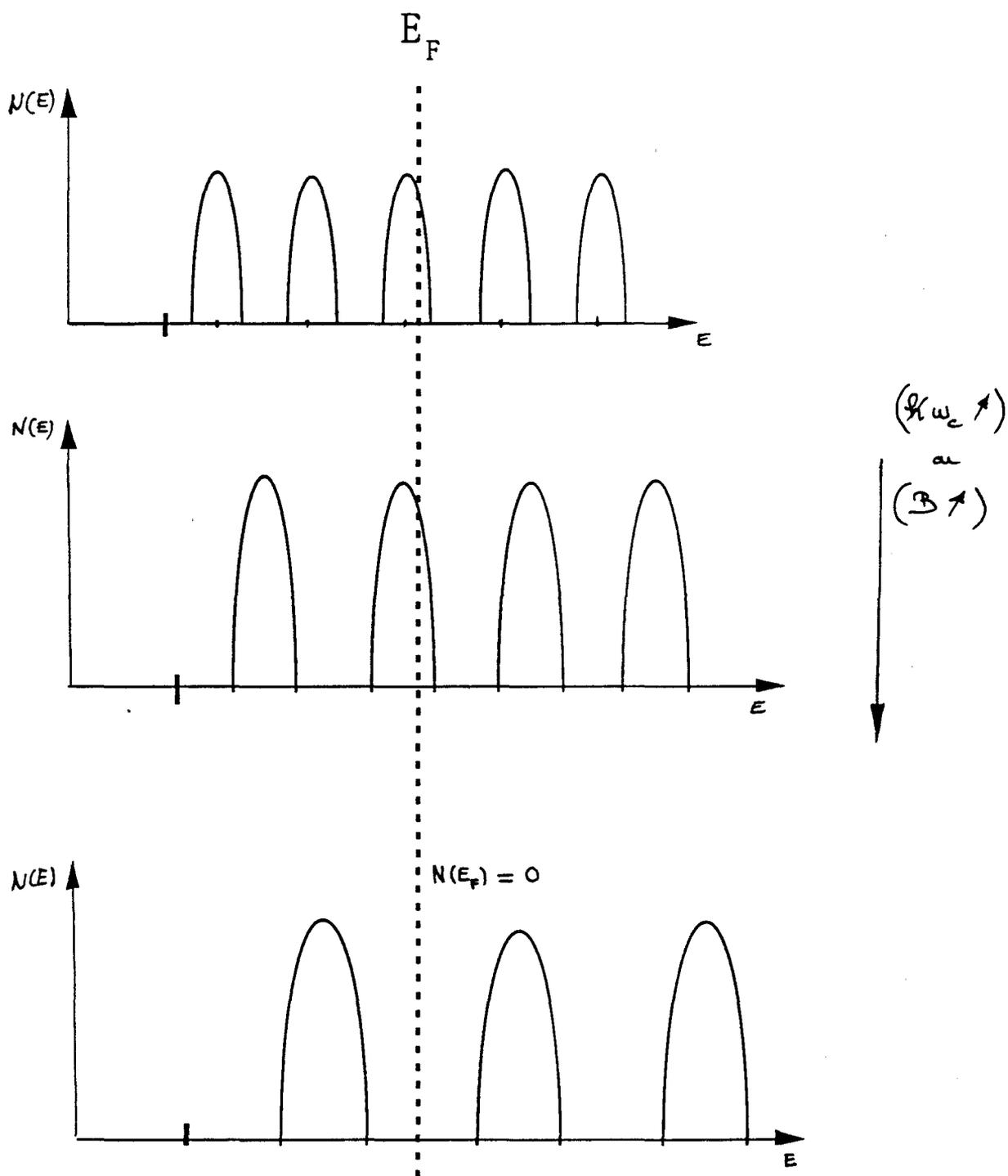
La modification à apporter à l'expression du temps de collision est plus délicate à justifier, puisque celui-ci est défini, non pas par  $N(E)$  mais par la densité d'états dans l'espace des vecteurs d'onde  $N(k')$  -voir expression (I.20)-. Cependant, on considérera, en première approximation et pour des potentiels diffuseurs isotropes, que la dépendance, en fonction de  $B$  du temps de collision  $\tau$ , est la même que la dépendance en fonction de  $B$  de  $N(E)$ , soit:

$$\frac{1}{\tau(E_F)} \equiv \frac{1}{\tau_0(E_F)} \left( 1 + \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (I.27)$$

Ce type de dépendance a également été proposé par Isihara et al. (1986).

En introduisant les relations (I.25) et (I.27) dans l'expression de la conductivité (I.24), on obtient pour les champs intermédiaires et en ne tenant compte que des termes du premier ordre en  $\Delta N/N_0$ :

$$\sigma(B) = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \left( 1 + \frac{2\omega_c^2 \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (I.28)$$



**Figure 1.11** - Evolution de la fonction densité d'états avec le champ B. Les niveaux de Landau "balayent" le niveau de Fermi (supposé constant).

Compte tenu de la relation la liant à la conductivité, la résistivité longitudinale ne peut être dérivée que si l'on connaît également le terme non-diagonal  $\sigma_{xy}(B)$ . Pour pouvoir exprimer cette composante de Hall en fonction de la densité d'états, on ne peut pas se contenter de l'expression (I.24'); il est nécessaire de partir de l'expression quantique proposée par Středa (1982) et :

$$\sigma_{xy} = e \frac{\partial n}{\partial B} - \omega_c \tau \sigma(B) \quad (I.28')$$

où  $n$  représente le nombre total d'électrons d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi (Isihara et Smrčka 1986) :

$$\frac{\partial n}{\partial B} = \frac{\partial}{\partial B} \int_0^{E_F} \Delta N(E, B) dE \cong \frac{en_s \Delta N(E_F, B)}{m^* \omega_c N_0}$$

A partir de (I.28) et (I.28'), nous pouvons finalement exprimer  $\rho(B)$  au premier ordre, sous la forme:

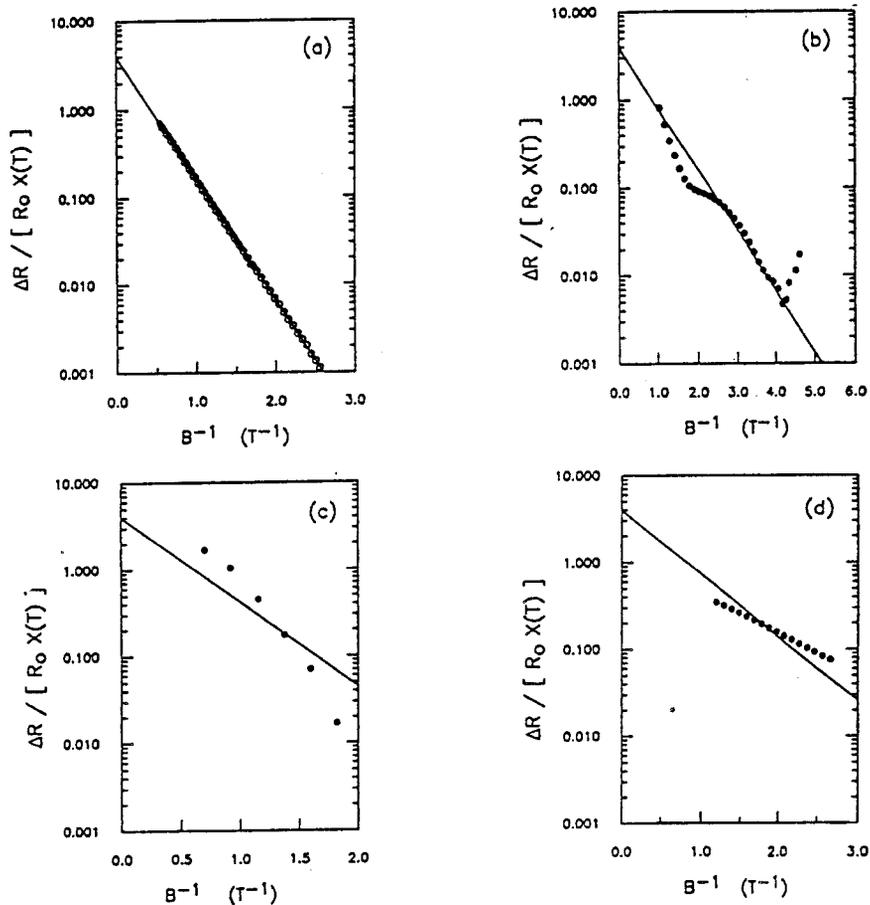
$$\rho(B) = \rho_0 \left( 1 + 2 \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right)$$

avec  $\rho_0 = 1/\sigma_0$ , soit encore:

$$\rho(B) = \rho_0 \left[ 1 - 4 \exp\left(-\frac{2\pi s \Lambda}{\hbar \omega_c}\right) \cos\left(\frac{2\pi s (E_F - \Delta)}{\hbar \omega_c}\right) X(T) \right] \quad (I.29)$$

La relation (I.29) permet une interprétation immédiate de l'effet Shubnikov-De Haas aux champs magnétiques intermédiaires. Ainsi, pour un niveau de Fermi  $E_F$  imposé par les milieux 3D environnants, à mesure que le champ magnétique augmente, les niveaux de Landau s'espacent et balayent tour à tour le niveau de Fermi (figure I.11). La résistivité  $\rho$  et par conséquent la conductivité  $\sigma$  (tout deux, directement proportionnelles à la fonction densité d'état au niveau de Fermi) présentent des oscillations périodiques en  $1/B$  et dont l'amplitude est croissante en fonction de  $B$ .

La périodicité du signal en  $1/B$ , conséquence de l'équidistance des niveaux de Landau, est à l'origine d'une méthode pratique et sans équivoque pour déterminer la densité de porteurs libres  $n_s$  du gaz bidimensionnel. Les maxima d'oscillations sont atteints toutes les fois que le centre d'un niveau de Landau coïncide avec le niveau de Fermi; c'est à dire pour des valeurs  $B_n$  de  $B$  telles que:



*Figure 1.12* - Graphes de DINGLE.

Exemples de comportements des maxima des oscillations de Shubnikov-De Haas en fonction de la qualité de l'hétérostructure GaAlAs-GaAs (d'après Coleridge 1991):

- (a) évolution standart vérifiant la relation (1.29),
- (b) présence d'inhomogénéités dans la structure,
- (c) déphasage fonction de  $B$ ,
- (d) conduction parallèle; mauvaise extrapolation à  $1/B=0$  mais pente correcte.

$$E_F = \frac{\hbar e B_n}{m^*} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Pour deux valeurs consécutives de  $n$ :

$$\frac{E_F}{B_n \left(n + \frac{1}{2}\right)} = \frac{E_F}{B_{n+1} \left(n + \frac{3}{2}\right)} = \frac{\hbar e}{m^*}$$

La période  $T_B$ , définie par la différence  $1/B_n - 1/B_{n+1}$ , est ainsi simplement  $\frac{\hbar e}{m^* E_F}$

Ce qui conduit à la densité surfacique de porteur :

$$n_s = \frac{2e}{\hbar T_B} \quad (I.30)$$

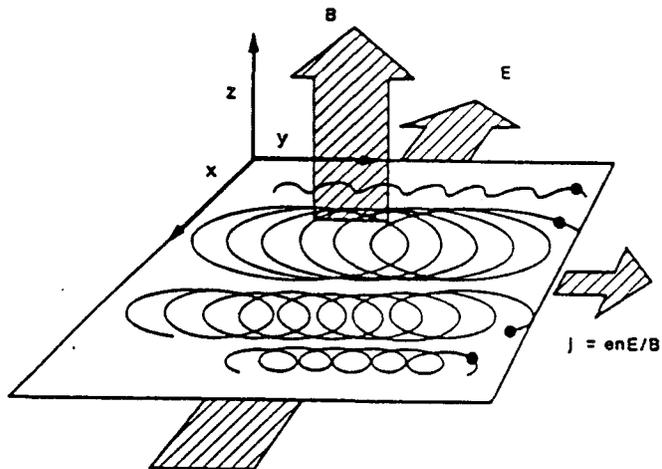
Dans la pratique, la représentation en fonction de l'indice du niveau de Landau  $n$  des valeurs  $1/B_n$  pour lesquels la résistivité passe par un maximum, conduit à une droite passant par  $n = -1/2$  de pente égale à  $T_B$ .

L'analyse de l'évolution des amplitudes des oscillations  $\rho(B)_{\max} - \rho_0 = \rho(B_n) - \rho_0$  de la résistivité en fonction du champ magnétique permet, quant à elle, de caractériser l'élargissement des niveaux de Landau  $\Lambda_n$  (par exemple Coleridge 1991). Le terme exponentiel d'amortissement (relation (I.29)), naturellement issu de l'expression de la fonction densité d'états, fut introduit pour la première fois de façon phénoménologique, avant toute interprétation théorique, par Dingle pour expliquer l'évolution de la susceptibilité magnétique (1952). Depuis lors, la méthode permettant l'évaluation de l'élargissement  $\Lambda$ , fondée sur la représentation de l'évolution de

$$\log \left[ \frac{\rho(B_n) - \rho_0}{\rho_0} \right] \text{ en fonction de } \frac{1}{B}$$

est nommée graphe de Dingle (figure I.12).

Pour un système 2D unique, ne présentant pas de conduction parallèle, l'évolution est une droite passant par  $\log 4$  pour  $1/B = 0$ , et de pente directement proportionnelle à  $\Lambda$ . Cette méthode n'est bien évidemment valable que si le contenu en centres diffuseurs est tel que l'élargissement  $\Lambda_n$  est indépendant de l'indice  $n$ . Si tel est le cas, l'analyse de Dingle permet d'accéder au temps de vie quantique  $\tau_q$  (relation (I.16)):  $\tau_q = \hbar/2\Lambda$ .



**Figure 1.13** - Transport électrique non dissipatif lorsque le niveau de Fermi est situé dans un "gap" de la fonction densité d'états  $N(E)$ .

Comme l'ont fait remarquer Coleridge et al. (1989), il existe dans la littérature une certaine confusion entre le temps de vie quantique et le temps de collision. Cette confusion est probablement d'origine historique puisque les premières expressions théoriques des composantes du tenseur conductivité proposées par Ando (1974), ne font apparaître qu'une constante de temps unique. Notre formulation permet de dériver une expression de la conductivité sans équivoque. Nous l'utiliserons à nouveau plus loin pour la description de système 2D contenant des centres diffuseurs anisotropes.

### I.3.2.3- Cas des champs magnétiques intenses

Dans le cas des champs magnétiques intenses, les niveaux de Landau -même élargis- peuvent être suffisamment séparés pour que la densité d'états du gaz bidimensionnel s'annule quasi-périodiquement en fonction de l'énergie. Un tel comportement de la densité d'états est caractéristique des systèmes 2D. Il est alors clair qu'à mesure que  $B$  augmente le niveau de Fermi  $E_F$  est périodiquement balayé par des domaines d'énergie où la densité d'états s'annule, entraînant de ce fait l'annulation des termes longitudinaux de conductivité et de résistivité alors que les termes transverses de Hall, comme nous le montrons dans ce qui suit, ne s'annulent pas.

De telles situations, où  $\rho$  et  $\sigma$  sont simultanément nulles, correspondent au comportement d'un gaz électronique véhiculant un courant électrique sans production d'énergie Joule. Le champ électrique est tourné de  $90^\circ$  par rapport à la direction du courant: les électrons ont un mouvement cycloïde (figure III.13). Ces situations ne peuvent être décrites par les méthodes semi-classiques de résolution de l'équation cinétique de Boltzmann ou par les méthodes fondées sur la réponse diélectrique des porteurs de charge, car dans leur fondement, celles-ci ne décrivent que des processus de transport dissipatifs. Pour décrire les phénomènes de transport dans ces cas, il est nécessaire de faire appel aux formalismes quantiques de transport électrique (Kubo 1965).

Le développement le plus simple permettant d'obtenir l'expression quantique du tenseur de conductivité consiste à utiliser la notion d'opérateur densité.

A tout système électronique, on peut adjoindre un opérateur densité  $\rho_0$ :

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle f(\alpha) \langle\alpha|$$

où  $|\alpha\rangle$  représentent les états propres du système d'électrons et  $f(\alpha)$  le taux d'occupation statistique de l'état  $|\alpha\rangle$ . A l'aide de cet opérateur densité, il est possible de calculer la valeur moyenne mesurable de tout opérateur  $\hat{A}$ :

$$\langle A \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \hat{A}]$$

Lorsque le système est soumis à une perturbation quelconque  $W(\mathbf{r}, \omega)$ , l'opérateur densité varie d'une quantité  $\delta\rho$  dont les éléments de matrice s'expriment, dans le cadre de la réponse linéaire, par:

$$\delta\rho_{\alpha\beta} = \frac{f(\beta) - f(\alpha)}{E_{\beta} - E_{\alpha} - \hbar\omega + i\varepsilon} \langle\alpha|W|\beta\rangle$$

Ainsi dans une expérience de conductivité électrique, où la perturbation résulte de l'application d'un champ électrique uniforme  $W(\mathbf{r}, \omega) = -e \mathbf{r}E(\omega)$  et où la densité de courant  $\langle j \rangle$  correspond à la valeur moyenne de l'opérateur courant  $e\mathbf{v}$ , l'application des deux expressions qui précèdent, associée à la loi d'Ohm  $\langle j \rangle = \sigma E$ , conduit directement à :

$$\sigma_{ij} = e^2 \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\beta) - f(\alpha)}{E_{\beta} - E_{\alpha} - \hbar\omega + i\varepsilon} \langle\alpha|x_i|\beta\rangle \langle\beta|v_j|\alpha\rangle \quad (\text{I.31})$$

Cette formule est rigoureusement équivalente à la relation de Kubo-Greenwood.

Dans le cas d'une expérience en courant continu ( $\omega=0$ ) et puisque:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E_{\beta} - E_{\alpha} + i\varepsilon} = \frac{1}{E_{\beta} - E_{\alpha}} - i\pi \delta(E_{\beta} - E_{\alpha})$$

on constate que les composantes du tenseur de conductivité se scindent naturellement en un terme symétrique et un terme antisymétrique (par rapport à  $i$  et  $j$ ):

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^S + \sigma_{ij}^A = -e^2 \left[ i\pi \sum_{\alpha, \beta} (f(\beta) - f(\alpha)) \langle\alpha|x_i|\beta\rangle \langle\beta|v_j|\alpha\rangle \delta(E_{\beta} - E_{\alpha}) \right. \\ \left. + \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\beta) - f(\alpha)}{E_{\beta} - E_{\alpha}} \langle\alpha|x_i|\beta\rangle \langle\beta|v_j|\alpha\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{I.32})$$

Les conductivités longitudinales  $\sigma_{ii}$  ne dépendront donc que du premier terme purement dissipatif (le second sera nul) tandis que les conductivités transverses  $\sigma_{ij}$  pourront à la fois contenir un terme symétrique et un terme antisymétrique: le premier traduit une éventuelle désorientation des axes de mesures  $i$  et  $j$  par rapport aux axes propres dans le cas d'un système qui serait anisotrope; le second correspond à la composante de Hall.

### A - Conductivité longitudinale en champ fort

En partant de l'équation d'évolution de la mécanique quantique, on montre que:

$$i\hbar \langle \alpha | v_j | \beta \rangle = (E_\beta - E_\alpha) \langle \alpha | x_j | \beta \rangle$$

Le terme dissipatif est ainsi directement donné par:

$$\sigma_{ij}^S = -e^2 \pi \hbar \sum_{\alpha, \beta} \left[ \frac{\partial f}{\partial E} \right]_{\alpha} \langle \alpha | v_i | \beta \rangle \langle \beta | v_j | \alpha \rangle \delta(E_\beta - E_\alpha)$$

soit encore, en remplaçant l'une des sommes par une intégrale:

$$\sigma_{ij}^S = -e^2 \pi \hbar \int \frac{\partial f}{\partial E} \text{Tr}[v_i \delta(E-H) v_j \delta(E-H)] dE \quad (I.33)$$

Cette dernière formule, rigoureusement valable dans le cadre de l'approximation linéaire, est particulièrement utile pour l'étude du transport en champ magnétique fort. En effet, les fonctions  $\delta(E-H)$  correspondent aux parties imaginaires de la fonction de Green associée au système électronique et la trace apparaissant dans l'expression (I.33) peut être calculée dans la base des états de Landau  $|n, x\rangle$ . Ainsi, si à champ magnétique élevé, les éléments de matrice de l'opérateur  $v$  entre différents états de Landau sont négligés (approximation similaire à celle qui nous a servi pour le calcul de la densité d'états à champ  $B$  élevé; cf. I.2.2.2), il vient directement pour les termes diagonaux:

$$\sigma_{ij}(B) = \frac{e^2 \hbar}{\pi} \left[ \frac{\Gamma_n^{ij}}{\Gamma_n} \right]^2 \left[ 1 - \left( \frac{E_F - E_n}{\Gamma_n} \right)^2 \right] \quad (I.34)$$

où  $n$  correspond au niveau de Landau le plus proche du niveau de Fermi et où l'on a posé:

$$(\Gamma_n^{ij})^2 = \sum_{x, x'} |\langle n, x | v_j | n', x' \rangle|^2$$

L'expression de  $\sigma_{11}$  (I.34) montre clairement qu'à champ fort, la conductivité s'annulera de façon identique à la fonction densité d'états. Bien qu'obtenue de façon approchée à partir de l'expression (I.34), le comportement théorique est en assez bon accord avec le comportement expérimental habituellement observé. Il reste bien évidemment une mauvaise description de l'évolution de la conductivité au voisinage des zéros liée à la forme semi-elliptique de la fonction densité d'états.

### B - Effet Hall quantique

L'expression théorique de l'effet Hall correspond à la partie antisymétrique de la relation (I.32). Pour retrouver la particularité de l'effet Hall caractérisant les systèmes 2D, c'est-à-dire l'apparition à basse température de plateaux de conductivité situés à des valeurs égales à un nombre entier de fois la constante  $e^2/h$ , il est utile d'introduire ici la théorie de migration du centre des orbites de Landau proposée pour la première fois par Kubo (1958). L'analyse que nous proposons ici ne prétend pas expliquer le cas des plateaux de Hall apparaissant pour des valeurs fractionnaires de  $e^2/h$  (effet Hall quantique fractionnaire).

Le mouvement d'un électron de coordonnées  $(x,y)$  soumis à un champ magnétique peut toujours se décomposer en un mouvement relatif, décrit par les coordonnées  $(\xi,\eta)$ , et un mouvement d'entraînement du centre des orbites cyclotron  $(X,Y)$ :

$$x = \xi + X \quad \text{et} \quad y = \eta + Y$$

Il est immédiat de montrer que ces diverses composantes vérifient les règles de commutation suivantes:

$$[\xi,\eta] = -[X,Y] = ir_c^2 \quad \text{et} \quad [\xi,Y] + [\eta,X] = 0 \quad (\text{I.35})$$

où  $r_c$  correspond au rayon de la plus petite orbite cyclotron. Dès que les centres diffuseurs, décrits par le potentiel  $V(r)$ , sont présents dans le matériau, ils provoquent un déplacement (une migration) du centre des orbites cyclotron caractérisé par les vitesses:

$$\dot{X} = \frac{1}{B} \frac{\partial V}{\partial y} \quad \text{et} \quad \dot{Y} = -\frac{1}{B} \frac{\partial V}{\partial x}$$

Ces déplacements correspondent bien évidemment au phénomène de conductivité dissipatif et sont à la base de phénomènes de conductivité longitudinaux.

Si on introduit ces notations dans l'expression des termes de conductivité anti-symétriques de Hall, on obtient directement:

$$\sigma_{xy} = -e^2 \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\beta) - f(\alpha)}{E_\beta - E_\alpha} \langle \alpha | \xi | \beta \rangle \langle \beta | \eta | \alpha \rangle + \Delta\sigma_{xy}$$

où le terme  $\Delta\sigma_{xy}$  non explicité, contient des termes en  $\dot{X}$  et  $\dot{Y}$  et donc s'annule chaque fois que les termes de conductivité longitudinaux  $\sigma_{ii}$  s'annulent.

En appliquant à la variable  $\eta$  l'équation d'évolution déjà utilisée plus haut, on obtient après un changement d'indice muet adéquat:

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{\hbar} \sum_{\alpha} f(\alpha) \langle \alpha | [\xi, \eta] | \alpha \rangle + \Delta\sigma_{xy}$$

Compte tenu des valeurs du commutateur  $[\xi, \eta]$  donnée par la relation (I.35), le terme antisymétrique est directement donné par:

$$\sigma_{xy} = \frac{N_s e}{B} + \Delta\sigma_{xy} \quad (1.36)$$

où  $N_s$  représente le nombre total d'électrons dans le gaz 2D (à ne pas confondre avec  $n_s$  la valeur à champ B nul).

Pour un système 2D où le niveau de Fermi est supposé fixe (exemple d'une hétérostructure à gaz 2D à l'équilibre, sans contrôle de charge par une grille)  $N_s$  évolue avec B:

$$N_s = 2nv = 2ne^2 B/h$$

où  $n$  est l'indice du niveau de Landau le plus proche du niveau de Fermi. Le facteur 2 rend compte de la dégénérescence de spin.

Chaque fois que la conductivité longitudinale s'annule (et donc chaque fois que le terme  $\Delta\sigma_{xy}$  s'annule) le terme antisymétrique d'effet Hall est simplement donné par l'expression classique:

$$\sigma_{xy} = \frac{N_s e}{B} + 0$$

Ainsi, pour les plages de valeur de B pour lesquelles le niveau de Fermi est situé entre deux états de Landau (figure I.11 p.27), le nombre d'états de Landau occupés étant un nombre entier  $n$  et le nombre total de porteurs libres variant linéairement avec B, la conductivité de Hall est alors un multiple entier de la constante universelle  $e^2/h$ :

$$\sigma_{xy} = 2 \frac{ne^2}{h} + 0 \quad (1.37)$$

Cette conductivité reste constante tant que le niveau de Landau suivant n'est pas suffisamment proche pour commencer à se dépeupler.

Puisque de telles situations correspondent à des conductivités longitudinales nulles, la résistivité transverse reste également constante ( $\rho = h/ne^2B$ ) pour les mêmes plages de champ B. Telle est une explication simple de l'effet Hall quantique, du moins à champ suffisamment fort pour qu'il existe des gaps d'énergie dans la fonction densité d'états.

Cependant, ce type de description ne permet pas d'expliquer l'existence des paliers aux champs B intermédiaires. Cette persistance des plateaux de Hall à champ relativement faible a été fréquemment interprétée par l'existence de niveaux localisés, donc non conducteurs, aux bords de chaque niveau de Landau (Prange 1981, 1990). En fait, il existe de nombreuses théories pas forcément contradictoires qui tentent d'expliquer l'effet Hall quantique. Celle reposant sur l'existence d'états d'énergie localisés dans les queues des niveaux de Landau est historiquement l'une des premières à être proposée. Une seconde est liée à l'existence d'inhomogénéités dans la distribution des porteurs de charge dans le système 2D (Woltjer 1989). La tendance actuelle est de montrer que le magnéto-transport dans les systèmes 2D est essentiellement assuré par des états de bord - ie. des canaux conducteurs 1D à la périphérie des échantillons - (Halperin 1982, Beenakken et Van Houten 1991, Haug 1993).

## Chapitre II

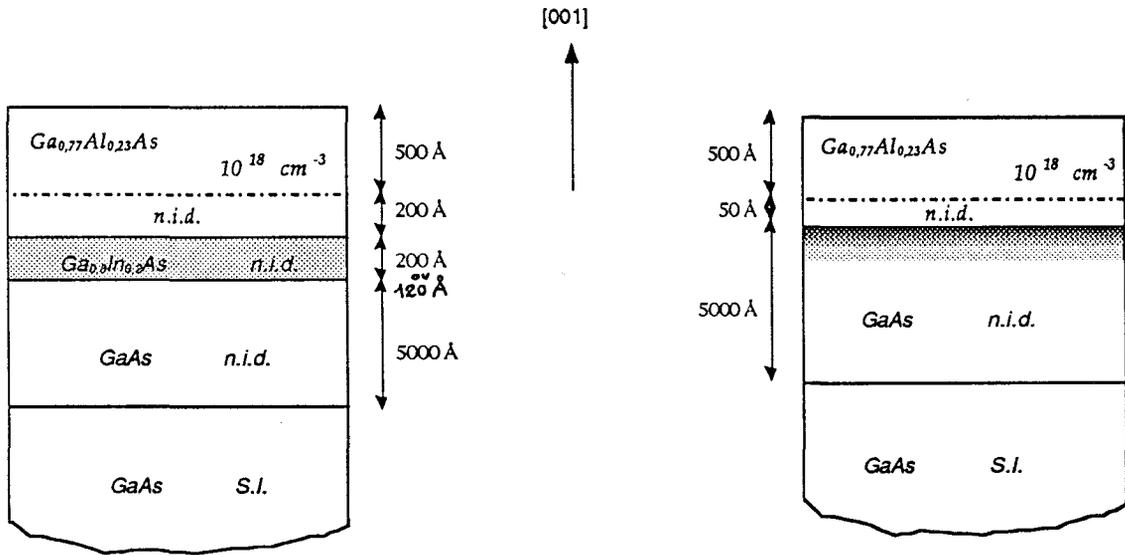
*Introduction de défauts linéaires:  
dislocations et  
rugosité unidimensionnelle*

## Chapitre II

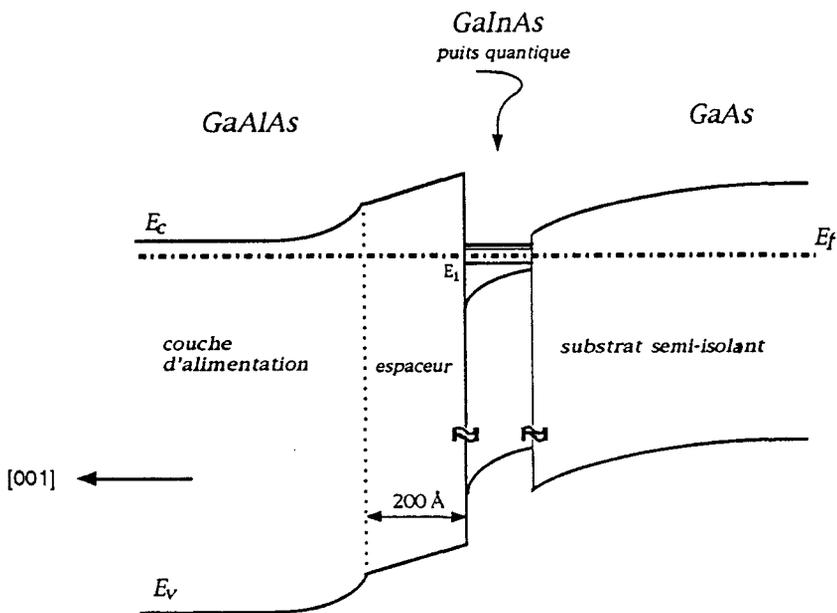
### Introduction de défauts linéaires: dislocations et rugosité unidimensionnelle

---

Dans ce chapitre sont décrits les systèmes électroniques bidimensionnels que nous avons utilisés ainsi que les méthodes et techniques qui nous ont permis d'y introduire des dislocations et, dans certains cas, de la rugosité d'interface unidimensionnelle.



**Figure II.1** - Caractéristiques des deux types d'hétérostructures utilisées.



**Figure II.2** - Schéma de la structure de bande d'une hétérostructure GaAlAs-GaInAs-GaAs.

## II.1 - Caractéristiques des structures utilisées

Les hétérostructures utilisées dans cette étude ont été élaborées par Epitaxie par Jets Moléculaires au département Hyperfréquences et Semiconducteurs (DHS) de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (IEMN). Ce sont soit des hétérojonctions à puits triangulaire GaAlAs/GaAs, soit des puits carrés double hétérojonction GaAlAs/GaInAs/GaAs. Leurs caractéristiques sont schématisées sur la figure II.1.

Dans tous les cas, la couche GaAlAs d'alimentation du puits possède un taux d'aluminium de 23%, ce qui correspond à la valeur communément employée pour la réalisation des TEGFET. Son dopage, choisi à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , est un des paramètres contrôlant le transfert électronique dans le puits. Dans le cas des couches pseudomorphiques employées, la composition en indium visée était de 20%. En réalité des observations en photoluminescence et en double diffraction X (DDX) montrent que suivant la couche épitaxiée, la composition en indium se situe dans la plage [16%,23%] (Vignaud 1994).

Le transfert des porteurs libres est directement lié à la discontinuité de bande de conduction entre le puits et la couche d'alimentation: il est a priori meilleur dans les puits GaInAs que dans les puits GaAs. Afin de disposer d'un système 2D où une seule sous-bande du puits est peuplée (faible densité de porteurs libres), nous avons choisi, dans le cas des puits de GaInAs, une largeur d'espaceur relativement grande (choix finalement fixé à 200 Å).

A titre d'exemple, la densité électronique dans un puits  $\text{Ga}_{0,8}\text{In}_{0,2}\text{As}$  de 120 Å, calculée au moyen du logiciel HELENA mis au point à l'IEMN par Happy (1992), est d'environ  $6.10^{11} \text{ cm}^{-2}$  à 300 K. Un schéma approximatif de la structure de bande correspondante est représentée sur la figure II.2. On pourra trouver dans les thèses de Cordier (1992) et de Alamkan (1993) des études assez complètes sur les caractéristiques du système GaAlAs/GaInAs/GaAs.

Le second type d'hétérostructure utilisé (système GaAlAs/GaInAs/GaAs) est de type pseudomorphique puisqu'il est composé d'une couche de GaInAs dont le paramètre cristallin est différent de celui du substrat ("couche contrainte"). L'emploi de structures possédant une couche contrainte est intéressant car il permet

- d'une part, dans certaines conditions que nous expliciterons dans le prochain paragraphe, de disposer de structures où la contrainte est partiellement

relaxée, présentant de façon naturelle des dislocations de direction bien définie;  
- d'autre part, de favoriser le développement de sous-structures de dislocations (longues, rectilignes, parallèles aux interfaces de croissance) lors de tests de déformation plastique et cela de façon bien plus homogène qu'avec des hétérostructures GaAlAs-GaAs. Ce second point est abordé dans le dernier paragraphe de ce chapitre.

## II.2 - Hétérostructures pseudomorphiques

Dans le secteur de l'ingénierie des composants microélectroniques, l'optimisation des caractéristiques de composants "classiques" ainsi que le développement de nouvelles structures passent aujourd'hui par l'emploi sur une même structure, d'une grande variété de composés et alliages semiconducteurs. En effet, l'ingénierie de structure de bandes qui permet d'ajuster les propriétés optiques et électriques des hétérostructures, est totalement tributaire des différences de structures cristallines. L'intérêt pour de telles hétérostructures s'est surtout développé ces vingt dernières années et aujourd'hui, beaucoup d'entre elles sont assez bien caractérisées (Bauer et al. 1990).

On sait ainsi que la différence de paramètres de maille entre les différentes couches engendre des contraintes de désadaptation de réseau et conduit le plus souvent à l'apparition de défauts cristallins, par exemple des dislocations ou des macles (Fitzgerald 1989). Ces perturbations sont en général associées à une dégradation des propriétés du matériau:

- zones actives de mauvaise qualité cristalline, dont les performances électriques et optiques sont plus faibles que celles attendues.
- distorsion, même homogène, du réseau cristallin qui en modifiant le potentiel périodique du cristal, modifie sa structure de bande: la bande interdite change; on observe une levée de dégénérescence de la bande de valence; la masse effective devient anisotrope et diffère totalement de celle du composé massif correspondant. Une grande partie des caractéristiques du matériau massif ne se retrouvent pas dans le matériau épitaxié.

Toutefois de tels inconvénients peuvent être évités par la croissance de structures complexes où les zones très perturbées peuvent être éloignées des zones actives du composant par addition de structures tampons.

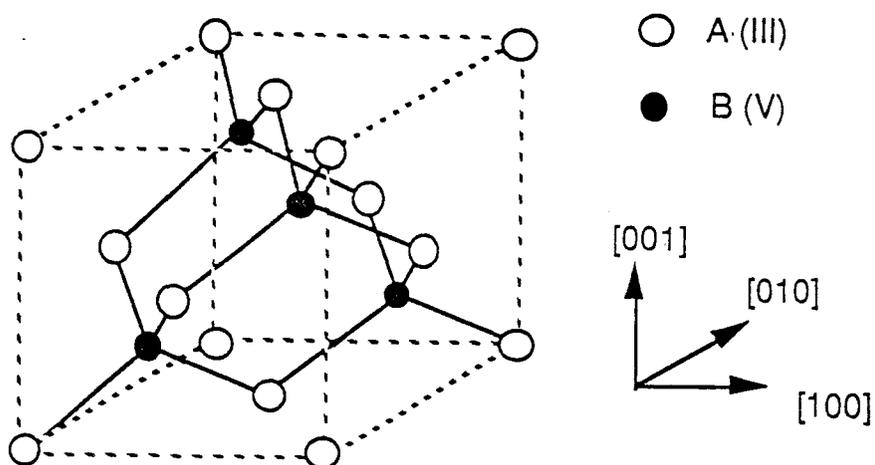


Figure II.3 - Maille élémentaire de la structure spalérite d'un composé III-V.

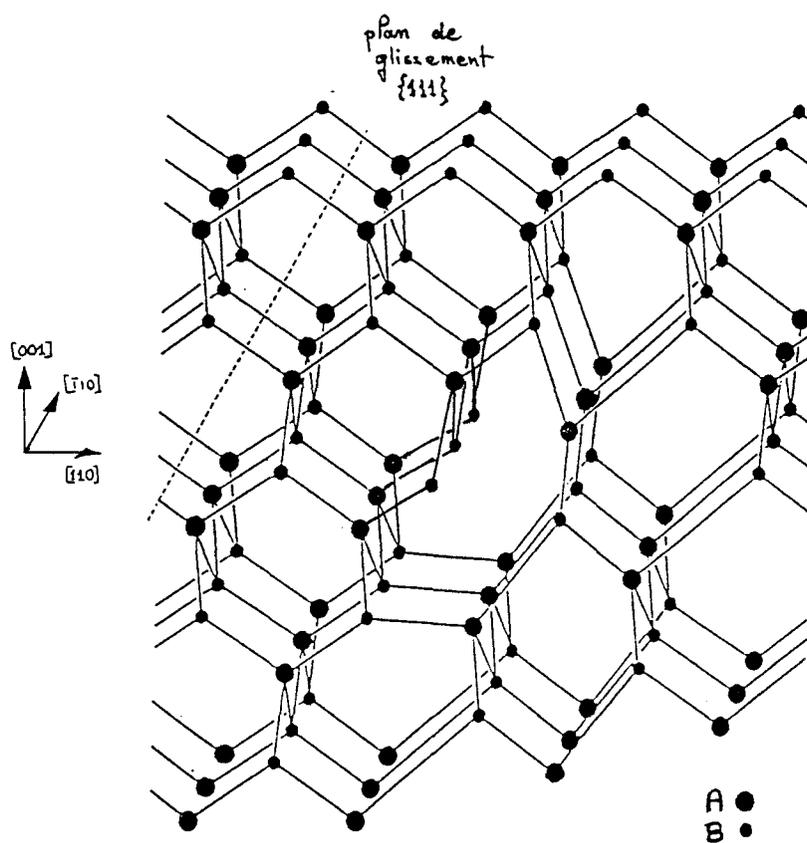


Figure II.4 - Dislocation parfaite de type 60° (mode "shuffle").

Dans notre travail, nous avons mis à profit ces particularités des couches contraintes pour au contraire développer des défauts dans la zone active de la structure, c'est à dire dans le système électronique bidimensionnel. Les quelques rappels de cristallographie des alliages de type III-V et des structures pseudomorphiques qui suivent permettent de justifier notre choix.

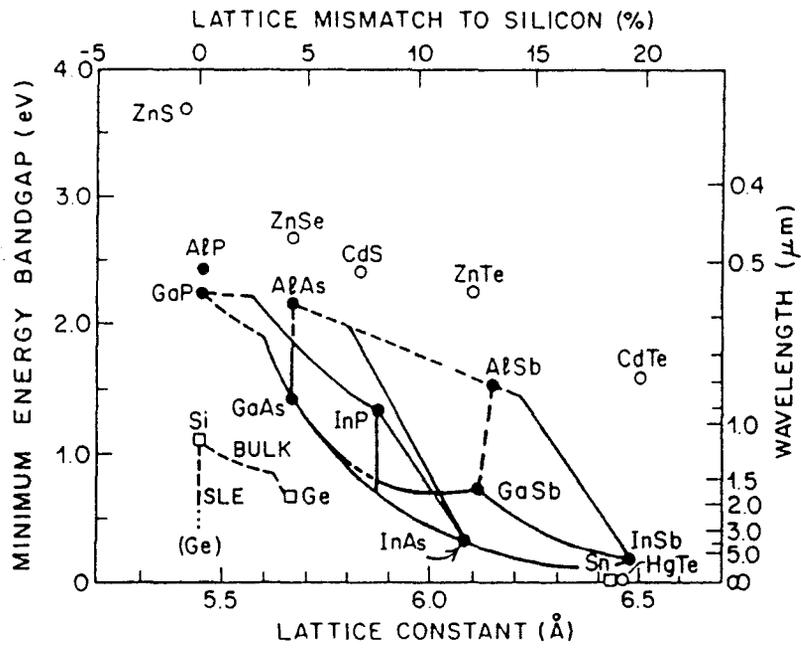
### II.2.1 - Alliages ternaires ou quaternaires - Dislocations

Les éléments des colonnes III et V de la classification périodique de Mendéléiev offrent la possibilité d'élaborer toute une gamme d'alliages semiconducteurs ternaires ou quaternaires ( $A_xA'_{1-x}B_yB'_{1-y}$ ). Comme un bon nombre de composés binaires, ces composés III-V cristallisent dans la structure sphalérite (figure II.3). Le réseau est cubique à faces centrées avec un motif constitué de deux types d'atomes: des atomes trivalents (A,A') en position (0,0,0) et des atomes pentavalents (B,B') en position  $a(1/4,1/4,1/4)$ . Les liaisons interatomiques sont fortement covalentes. Leur caractère ionique partiel est dû à la différence d'affinité électronique entre les éléments trivalents et pentavalents.

Dans la structure sphalérite, les plans de glissement des dislocations sont les plans denses de type  $\{111\}$ . Les lignes de dislocations sont confinées dans les directions denses  $\langle 110 \rangle$  (vallées de Peierls), du moins aux basses températures, et leurs vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}$  sont du type  $a/2\langle 110 \rangle$ . Ainsi les dislocations parfaites sont, soit des dislocations vis ( $\mathbf{b}$  colinéaire à un vecteur unitaire  $\mathbf{l}$  le long de la ligne), soit des dislocations à  $60^\circ$  ( $\mathbf{l}$  et  $\mathbf{b}$  font un angle de  $60^\circ$ ) (figure II.4).

On trouvera en annexe A une présentation rapide sur le détail de la structure de coeur des dislocations  $60^\circ$  (atomes situés à l'extrémité de chaque demi-plan supplémentaire) qui permet, compte tenu de la non centrosymétrie des composés III-V, d'expliquer l'existence de deux types de dislocation  $60^\circ$ , fonction de la nature des atomes de coeur en positions très distordues.

Nous adoptons la dénomination proposée par Alexander et al (1979, convention de Hunfeld). La notation  $\alpha$  (respectivement  $\beta$ ) que nous utilisons correspond, dans cette convention, à des dislocations  $60^\circ$  dont le coeur est constitué d'atomes trivalents (respectivement pentavalents).



**Figure II.5** - Evolution de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre de maille des composés semiconducteurs les plus utilisés.

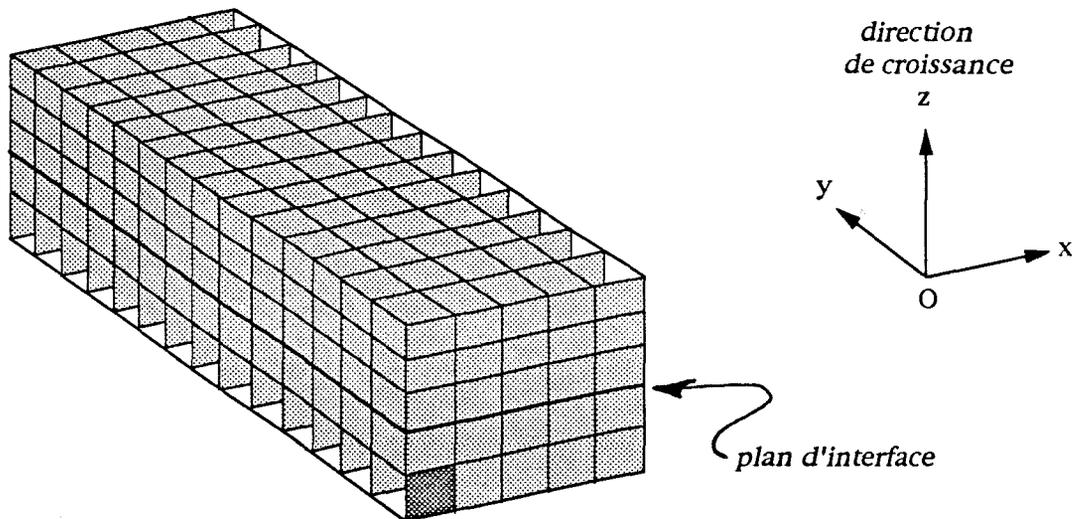
Dans ce type de structure à fort frottement de réseau, il est généralement admis qu'à basse température, le mouvement des dislocations soumises à une contrainte extérieure s'effectue par nucléation et propagation de doubles décrochements contrôlant le passage d'une dislocation d'une vallée de Peierls à la suivante. Les études de plasticité réalisées sur les composés III-V massifs ont montré que la vitesse de glissement des dislocations  $60^\circ$  de type  $\alpha$  est systématiquement supérieure à celle des dislocations  $60^\circ$  de type  $\beta$  ou des dislocations vis, au moins pour les composés non dopés ou dopés n (Ninomiya 1979). Les vitesses de glissement des dislocations individuelles vis,  $\alpha$  et  $\beta$  étant très différentes, il en résulte dans le matériau massif un développement asymétrique des boucles de dislocations qui est à l'origine d'une asymétrie de comportement plastique.

## II.2.2 - Désadaptation de maille - Accommodation élastique

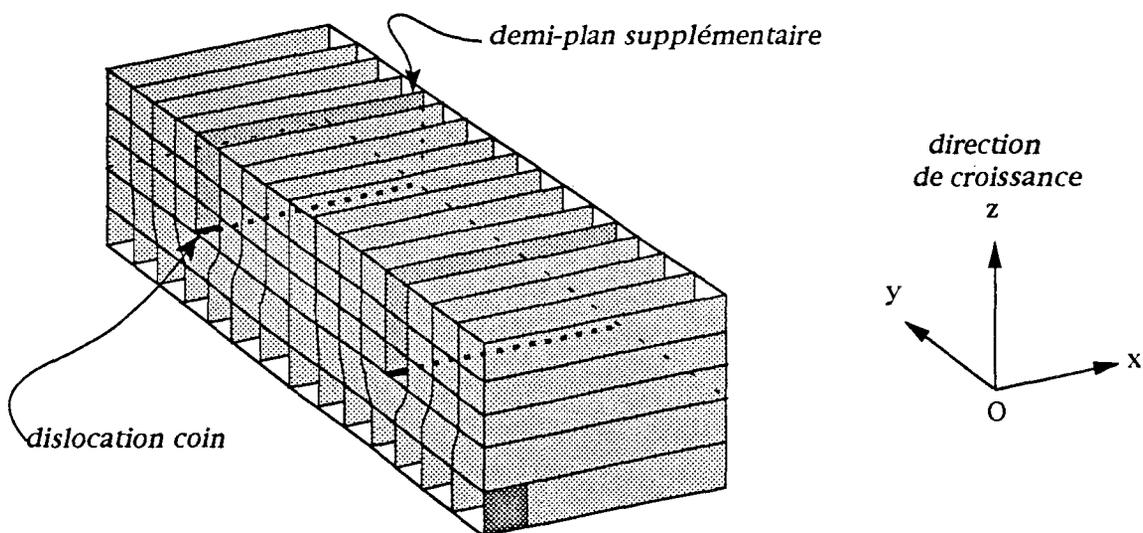
Les composés III-V binaires AB et leurs alliages sont le plus souvent choisis en fonction de la valeur de leur bande interdite. Le diagramme II.5 représente l'évolution de ce paramètre en fonction du paramètre de maille des principaux alliages employés en croissance.

De façon générale, le paramètre de maille des composés ternaires ou quaternaires est une combinaison linéaire des paramètres de maille des constituants binaires de base (comme bon nombre d'autres propriétés physiques). Cette particularité implique qu'il n'existe qu'un petit nombre de compositions d'alliages ternaires ou quaternaires susceptibles d'être épitaxiés sans problème de continuité cristalline sur un substrat binaire. C'est par exemple le cas de  $\text{Ga}_{0,53}\text{In}_{0,47}\text{As}$  sur InP ou du système GaAlAs sur GaAs que nous employons dans ce travail, quasiment adapté en paramètre de maille quel que soit le taux d'aluminium.

En fait, les conditions d'épitaxie d'un matériau sur un autre ne sont pas aussi restrictives que l'on pourrait le supposer. Pour un désaccord de maille donné entre une couche d'alliage épitaxiée et le substrat (mesuré par le rapport  $\varepsilon = (a_{\text{couche}} - a_{\text{substrat}}) / a_{\text{substrat}}$ ) et tant que l'épaisseur de l'alliage reste faible, le matériau épitaxié adopte sans problème le paramètre de maille du substrat dans le plan de croissance et se distord parallèlement à la direction de croissance (figure II.6): la maille cubique devient tétragonale. Le désaccord de maille  $\varepsilon$  est



**Fig. 6** - Croissance pseudomorphique; distorsion de la maille du matériau épitaxié.



**Fig. 7** - Couche épitaxiée partiellement relaxée suivant la direction Oy, par création de deux dislocations de désadaptation de réseau suivant la direction Ox.

**Figures II.6 et II.7** - Epitaxie d'une couche cubique en tension sur un substrat de paramètre de maille supérieur.

entièrement accommodé par déformation élastique de la couche épitaxiée, qui se retrouve ainsi soumise à une contrainte biaxiale dans le plan de croissance. La couche épitaxiée est dite dans ce cas pseudomorphique.

### II.2.3- Relaxation plastique - Epaisseur critique

Pour des épaisseurs de la couche épitaxiée supérieures à une épaisseur critique  $e_c$ , fonction du désaccord de maille  $\epsilon$  et des conditions de croissance telle que la température, la croissance pseudomorphique n'est plus possible. Il devient énergétiquement préférable d'accommoder plastiquement une partie du désaccord de maille par la formation de défauts structuraux tels que les dislocations de désadaptation de réseau (ou de "misfit") à l'interface couche épitaxiée-substrat (Figure II.7). La contrainte de désadaptation est de ce fait partiellement ou totalement relaxée. Dans le cas d'une relaxation totale de la contrainte, on parle de couche épitaxiée métamorphique.

#### II.2.3.1 - Modélisation théorique

Plusieurs modèles ont à ce jour été proposés pour estimer l'épaisseur critique en fonction du désaccord de maille  $e_c(\epsilon)$ . Une revue assez complète est présentée dans la thèse de Herbaux (1989); on pourra également lire l'article de revue de Freund (1992). Le fait majeur est qu'il existe une grande disparité dans les prévisions données par les différents modèles. Ceci est essentiellement lié à la difficulté de quantifier des processus de relaxation plastique complexes et relativement mal compris. Nous donnons, dans ce qui suit, quelques éléments d'analyse car ils nous serviront par la suite pour expliquer le comportement plastique des hétérostructures fléchies (paragraphe II.3).

Les modèles les plus couramment cités pour la détermination de  $e_c$  sont ceux proposés par Matthews et Blakeslee (1974) pour une couche épitaxiée simple et Matthews (1975) pour un superréseau. Dans ces modèles, les dislocations de désadaptation de réseau sont issues soit de la courbure et de l'allongement, à l'interface contraint, de dislocations provenant du substrat, soit de la nucléation et du développement de demi-boucles de dislocations à partir de sources de surface.

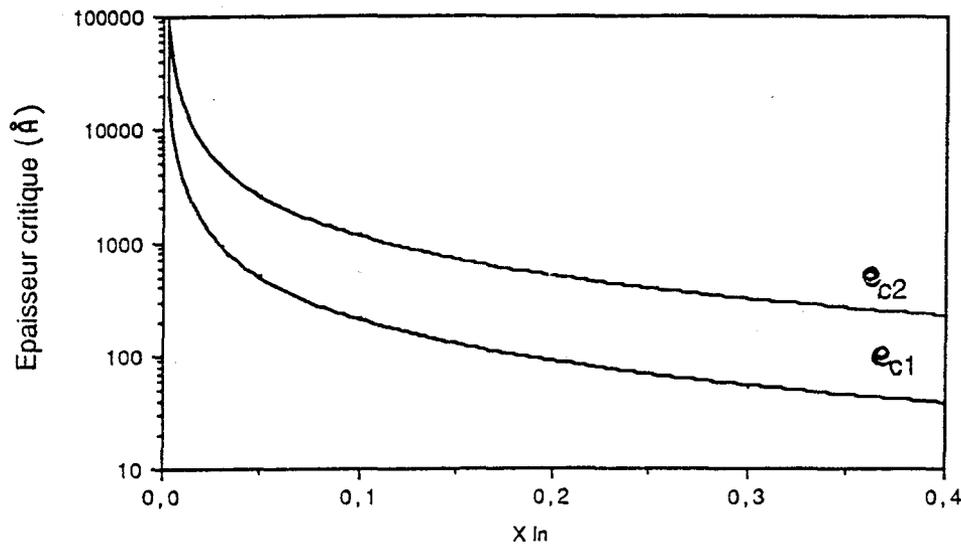
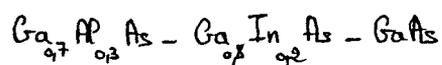


Figure II.8 - Evolution de l'épaisseur critique d'une couche simple ( $e_{c1}$ ) et d'un superréseau ( $e_{c2}$ ) en fonction du taux d'indium (X In).

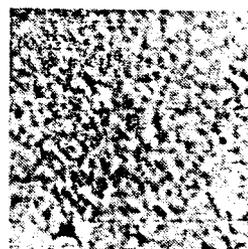
Figure II.9

Asymétrie de la relaxation plastique.

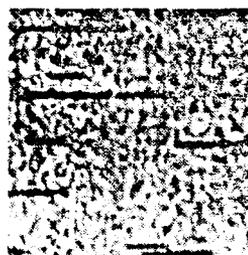
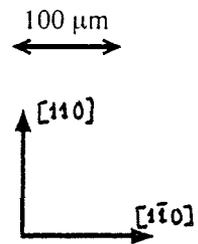
Cathodoluminescence sur des structures



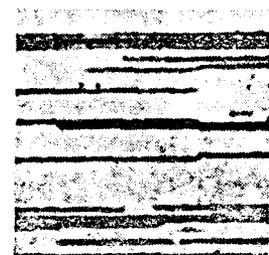
(d'après Schweizer et al. 1991)



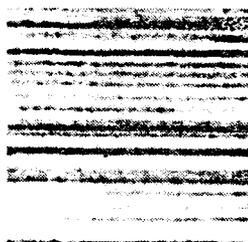
QW width = 15 nm



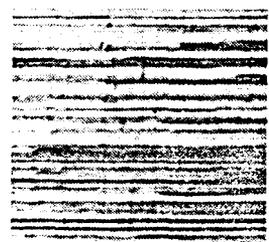
QW width = 17.5 nm



QW width = 20 nm



QW width = 25 nm



QW width = 30 nm

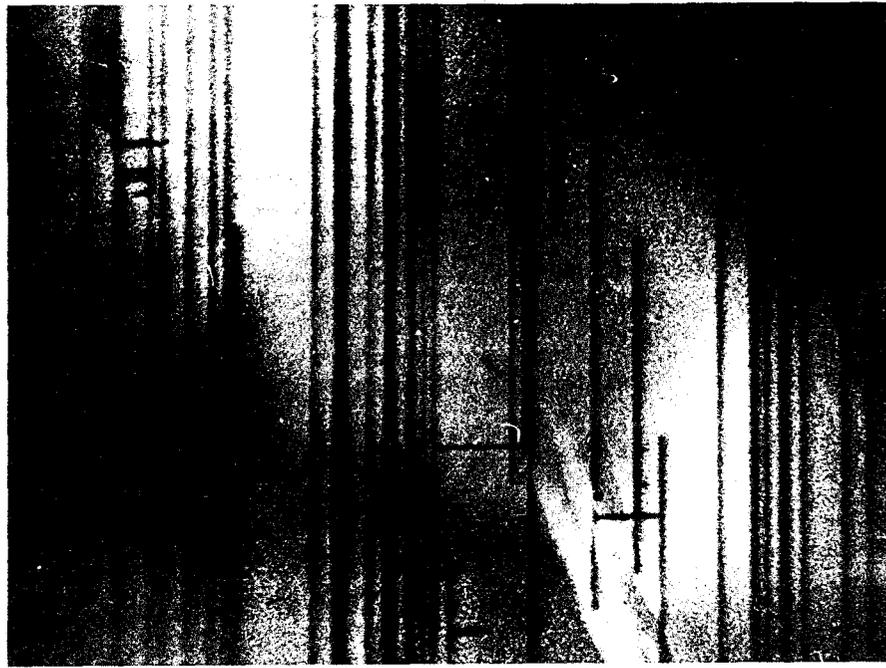
Sur la figure II.8 (Ulhaq-Bouillet 1993) sont représentées, à titre d'exemple, les évolutions  $e_c(\varepsilon)$  dans les cas de couches simples et de superréseaux pour une épitaxie de l'alliage GaInAs sur un substrat de GaAs (second type de système auquel nous nous sommes intéressés dans cette étude).

Dans la littérature, ces modèles sont indifféremment employés pour les cas des couches épitaxiées en compression et des couches épitaxiées en tension alors que dans ce dernier cas (beaucoup moins utilisé à l'heure actuelle et donc moins étudié) la relaxation plastique semble se faire de façon beaucoup plus complexe que dans le cas en compression: les dislocations de désadaptation de réseau, relativement peu nombreuses, sont très souvent dissociées et on observe fréquemment du maillage et de la fissuration (Wagner et al. 1989, 1993).

### II.2.3.2 - Nature des dislocations de désadaptation de réseau

Compte tenu de la structure cristallographique de la couche épitaxiée et du substrat, les dislocations de désadaptation de réseau sont essentiellement alignées parallèlement aux directions  $\langle 110 \rangle$ . Dans le cas des composés de type III-V, la nature des atomes de coeur des dislocations orientées suivant  $[110]$  est différente de celle des dislocations orientées suivant  $[\bar{1}10]$  (annexe A).

Dans le cas d'un alliage III-V épitaxié, contraint en compression, il a fréquemment été observé lors des premiers stades de la relaxation plastique, une asymétrie de la distribution des dislocations de désadaptation de réseau suivant les directions  $[110]$  et  $[\bar{1}10]$  (Kavanagh et al. 1988, Ulhaq-Bouillet et al. 1994). Comme illustré sur la photo II.9, les dislocations parallèles à la direction  $[\bar{1}10]$  sont majoritaires lorsque l'épaisseur épitaxiée n'est que légèrement supérieure à  $e_c$ . Les dislocations parallèles à la direction  $[110]$ , n'apparaissent que pour une épaisseur plus élevée. Enfin au delà d'une certaine épaisseur, les densités des deux types de dislocations deviennent équivalentes. Cette asymétrie plastique est à mettre en relation avec la différence de nature des atomes de coeur des deux types de dislocations mais son interprétation est toujours sujette à controverse. Suivant les auteurs, elle est attribuée soit à des énergies de nucléation des deux types de dislocations distinctes (Ulhaq-Bouillet 1993), soit à des vitesses de développement différentes (Fitzgerald et al. 1988, Fox et Jesser 1990). D'après la convention de Hunfeld, les dislocations de désadaptation de réseau des structures



$[1\bar{1}0]$   
↑  
→  $[110]$

100  $\mu\text{m}$

**Figure II.10** - Dislocations de désadaptation de réseau dans les échantillons issus des structures  $\text{Ga}_{0,77}\text{Al}_{0,23}\text{As} - \text{Ga}_{0,80}\text{In}_{0,20}\text{As} (200 \text{ \AA}) - \text{GaAs}$  imagées par cathodoluminescence.

pseudomorphiques partiellement relaxées sont du type  $\alpha$  dans l'une des deux directions  $\langle 110 \rangle$  et  $\beta$  dans l'autre. Lorsque le matériau épitaxié est contraint en compression les dislocations du type  $\alpha$  et  $\beta$  sont respectivement orientées suivant les directions  $[\bar{1}10]$  et  $[110]$ . C'est typiquement le cas rencontré dans nos structures. Lorsque la couche épitaxiée est en tension (par exemple GaInP-InP) les correspondances sont inversées.

Dans cette étude une partie des structures utilisées sont des structures pseudomorphiques GaInAs/GaAs très faiblement relaxées présentant de façon naturelle une seule famille de dislocations de désadaptation de réseau.

#### II.2.4 - Choix des structures pseudomorphiques

Comme il a été souligné plus haut, la détermination de l'épaisseur critique est assez délicate. Pour la composition en indium visée dans les hétérostructures pseudomorphiques (20%), l'épaisseur critique, d'après le modèle de Matthews (figure II.8), est de l'ordre de 100 Å en utilisant le modèle d'une simple couche épitaxiée, et de 500 Å pour un superréseau, ce qui est loin de représenter notre cas. Il est plus approprié d'utiliser un modèle de couche contrainte enterrée entre deux milieux supposés semi-infinis, même si la couche active GaInAs n'est recouverte que d'une couche de 700 Å. Dans un tel modèle, l'épaisseur critique  $e_c$  se situerait aux alentours de 210 Å. Cette valeur est plus conforme à certains résultats expérimentaux publiés et obtenus à partir de mesures de photoluminescence (Anderson et al. 1987), de mobilité électronique (Fritz et al. 1987) ou de topographie de RX (Green et Tanner 1990), réalisées sur des structures analogues à la nôtre. Ces résultats semblent converger vers une valeur de l'épaisseur critique qui se situerait plutôt au voisinage de 180 Å.

Nous avons utilisé deux séries de couches à puits GaInAs: l'une dont l'épaisseur est de 200 Å, l'autre dont l'épaisseur est de 120 Å.

Les couches ayant un puits de GaInAs de 200 Å correspondent à une situation particulière où l'épaisseur du puits, bien que supérieure à l'épaisseur critique théorique, en reste suffisamment proche pour que des dislocations de désadaptation de réseau se soient développées dans la seule direction  $[1\bar{1}0]$ . (§ II.2.3.2). Il s'agit de structures faiblement relaxées possédant naturellement un réseau de dislocations bien caractérisées (photo II-10).

Quant aux couches ayant un puits de GaInAs de 120 Å, elles correspondent à un matériau non relaxé (épaisseur très inférieure à  $e_c$ ), donc sans dislocations de désadaptation de réseau. Elles pourront constituer, de ce fait, le matériau de référence pour l'étude des propriétés de magnétotransport quantique des hétérostructures GaAlAs-GaInAs-GaAs.

A l'instar des hétérostructures adaptées en paramètre de maille GaAlAs/GaAs, les hétérostructures pseudomorphiques GaAlAs/GaInAs/GaAs dont l'épaisseur du puits était inférieure à l'épaisseur critique ont été utilisées pour les essais de déformation plastique que nous présenterons dans la suite de ce chapitre. Nous montrons en particulier que cette seconde méthode d'introduction de défauts linéaires permet, par le choix des conditions de déformation, de développer sélectivement dans la structure des dislocations de nature  $\alpha$  ou  $\beta$  dans l'une ou l'autre des directions  $[110]$  ou  $[1\bar{1}0]$ .

Les mesures de conductivité et d'effet Hall ont été développées sur tous les types d'échantillons (de référence, déformés et plastiquement relaxés) afin de comprendre l'influence des dislocations sur les propriétés de transport des systèmes électroniques 2D.

Il faut noter que dans le cas des hétérostructures faiblement relaxées GaAlAs/GaInAs/GaAs (puits de 200 Å), il n'existe pas de matériau de référence (matériau qui posséderait des caractéristiques identiques, c'est à dire la même épaisseur du puits, mais sans dislocations) auquel comparer le comportement des couches avec dislocations de désadaptation de réseau. Malgré cet inconvénient majeur, nous montrerons dans la partie étude du magnétotransport de ce travail que l'étude des couches partiellement relaxées nous a permis de mettre en évidence, au moins de manière qualitative, un comportement différent de celui des structures déformées.

## **II.3 - Sous-structure de défauts introduits par flexion encastrée**

Afin d'introduire de façon artificielle des dislocations dans des structures n'en contenant pas initialement, nous avons déformé par flexion encastrée des lamelles découpées dans les hétérostructures. Dans un premier temps, nous montrons que la flexion encastrée est un mode de déformation bien adapté à notre étude et présentons les arguments qui nous ont permis de définir la géométrie des éprouvettes de déformation et les conditions expérimentales. Dans un second temps, les sous-structures de dislocations obtenues sont analysées en s'appuyant sur les résultats donnés par différentes techniques d'imagerie des dislocations.

### **II.3.1 - Choix d'un mode de déformation des hétérostructures**

Nous avons introduit des dislocations par déformation plastique à une température suffisamment élevée pour se situer dans le domaine ductile (d'activation thermique) du matériau ( $>250^{\circ}\text{C}$ ) et suffisamment faible pour ne pas avoir de problème de sublimation de l'élément Arsenic ( $<550^{\circ}\text{C}$ ).

Les méthodes de déformation telles que la compression ou la traction uniaxiales, communément employées sur les composés III-V massifs (voir par exemple Nakata et Ninomya 1977, Ferre 1987), s'appliquent difficilement à des échantillons d'épaisseur aussi faible que celle des hétérostructures étudiées (située entre 330 et 420  $\mu\text{m}$ ). Des essais en tension ont été réalisés au laboratoire. Les premiers résultats de ces essais étaient encourageants mais la consommation importante de matériau liée à la difficulté d'usinage des éprouvettes et à un risque élevé de fissuration au cours de l'essai a été un frein sérieux au développement ainsi qu'à l'utilisation systématique de ce mode de déformation. Des essais de compression viennent de débiter au laboratoire.

A ces deux méthodes (compression et traction), nous avons préféré la déformation par flexion. Ce mode de déformation a souvent été employé dans le matériau massif pour des études sur la vitesse de glissement des dislocations (Pichaud 1986, Burle-Durbec 1989) ou sur leur influence sur les propriétés électriques (pour une revue voir Ferre 1987). La flexion a rarement été utilisée

sur des hétérostructures (Nakashima et al. 1977, Goiran et al. 1993). Des essais de déformation en flexion quatre-points de lamelles découpées dans les hétérostructures ont été abandonnés au profit de la flexion de lamelles encastrées à l'une de leur extrémité. Cette dernière méthode de déformation nous a permis d'obtenir les sous-structures de dislocations les plus homogènes.

Il est important de remarquer que pour générer les dislocations dans nos structures, nous n'avons pas eu recours à l'introduction intentionnelle de sources de surface par quelque méthode que ce soit (indentation, rayure...). Si dans les premiers essais de flexion nous avons utilisé des hétérostructures dont la surface épitaxiée était rayée, nous avons vite abandonnée cette pratique. En effet, nous avons remarqué qu'un certain nombre de dislocations se développaient dans les zones éloignées de la rayure et que leur densité était semblable à celle des dislocations développées à partir de la rayure. Il est probable qu'il existe une quantité de sources intrinsèques aux hétérostructures non négligeable: rugosité de surface, défauts de croissance; on peut également envisager l'activation de sources de volume à partir de résidus de nettoyage aux interfaces substrats-couches ou de défauts dans le substrat. L'existence de telles sources intrinsèques rend inutile la création de sources artificielles.

L'axe de flexion peut être choisi suivant n'importe quelle direction  $\langle uvw \rangle$ ; à chacune d'entre elles correspond une sous-structure de dislocations plus ou moins complexe. Nous avons choisi comme axe de flexion l'une des deux directions  $\langle 110 \rangle$  afin de ne développer de dislocations que dans les deux plans  $\{111\}$  en zone avec cet axe. Il est à noter qu'un tel choix est très intéressant: les directions  $\langle 110 \rangle$  étant des directions faciles de clivage, la découpe des lamelles de flexion (et par la suite des échantillons électriques) est rapide et aisée.

La mise au point du système de déformation ainsi que le choix du domaine de température et des temps de maintien à cette température ont, à eux seuls, nécessité une grande quantité d'essais de flexion. Puisque cette partie du travail n'avait pas pour but d'étudier la plasticité des hétérostructures mais bien de déterminer les conditions suffisantes permettant d'obtenir dans les échantillons de long segments de dislocations sur des plages suffisamment grandes pour pouvoir par la suite y réaliser des composants électriques, nous avons délibérément choisi de ne pas pousser très avant l'optimisation des paramètres de la déformation. Il est probable que, pour des conditions distinctes de celles présentées, les résultats eussent été meilleurs.

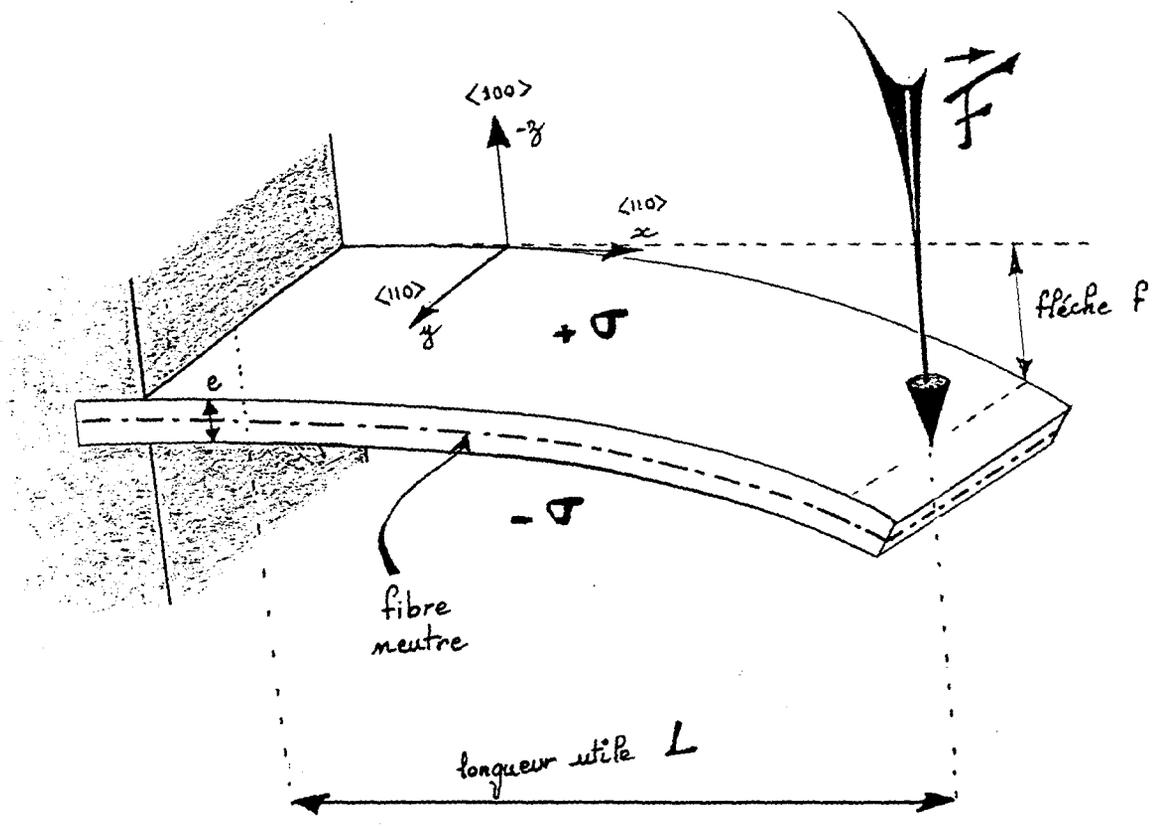


Figure II.11- Schéma d'une lamelle en flexion encastree.

## II.3.2-Déformation des hétérostructures par flexion encastree

### II.3.2.1 - Principe de la flexion encastree

Dans un essai de flexion simple (fig. II.11) d'un matériau homogène, le tenseur des contraintes se réduit à deux composantes non nulles:  $\sigma_{xx}$  et  $\sigma_{xz}$ . La composante  $\sigma_{xz}$  peut être négligée si l'épaisseur de la lame est faible devant les autres dimensions. La flexion selon l'axe de flexion (y) peut donc être assimilée à une traction-compression suivant la direction (x). On montre que cette contrainte de tension-compression  $\sigma_{xx}$  varie linéairement avec x et z:

$$\sigma_{xx} = E z C(x)$$

où E est le module d'Young du matériau fléchi,  
z la distance à la fibre neutre,  
C (x) la courbure de l'échantillon à la distance x de l'encastrement

$$C(x) = 3 f \frac{L-x}{2L^3}$$

L ("longueur utile") est la distance séparant l'encastrement du point d'application de la force et f est la flèche imposée à l'échantillon.

Ainsi, à une distance donnée x de l'encastrement,  $\sigma_{xx}$  est maximum sur les surfaces de l'échantillon et décroît linéairement pour s'annuler à la fibre neutre. Pour une cote z donnée, cette contrainte décroît linéairement à partir d'une valeur maximale atteinte en tête d'encastrement pour s'annuler au point d'application de la force. Si e est l'épaisseur de l'échantillon, l'expression de la contrainte maximale est donnée par la relation:

$$\sigma_{\max} = \frac{3eEf}{2L^2}$$

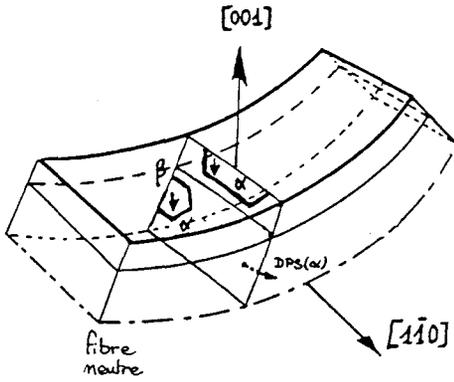
### II.3.2.2 - Orientation des éprouvettes de déformation

Dans un essai de déformation, les boucles de dislocations (ou demi-boucles pour une source de surface) susceptibles de se développer sous l'effet de la contrainte extérieure sont celles pour lesquelles la composante, dans le plan de glissement, de la force de Peach et Koehler est dirigée vers l'extérieur de la boucle.

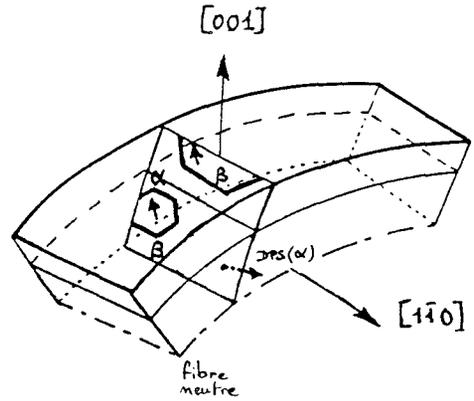
Couches épitaxiées  
sollicitées en COMPRESSION

Couches épitaxiées  
sollicitées en TENSION

Axe de flexion  
 $[1\bar{1}0]$

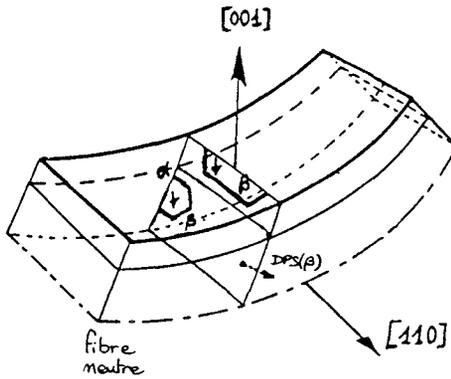


Compression- $\alpha$

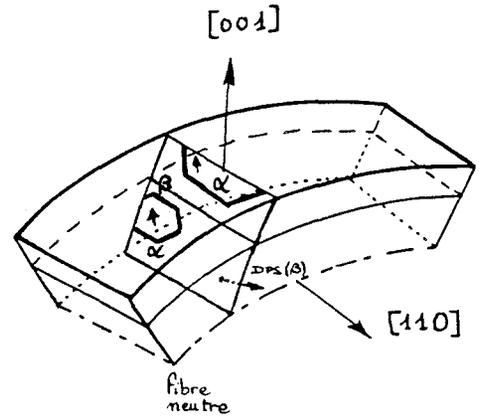


Tension- $\beta$

Axe de flexion  
 $[110]$



Compression- $\beta$



Tension- $\alpha$

**Figure II.12** - Récapitulatif des quatre "orientations de flexion" non équivalentes. Nature des boucles de dislocation émises vers le puits quantique. L'indication DPS donne la direction du demi-plan supplémentaire.

Cette force, définie par:

$$\bar{F} = (\bar{\sigma} \cdot \bar{b}) \wedge \bar{l}$$

où  $\bar{\sigma}$  représente le tenseur des contraintes en tout point de la structure,  
 $\bar{b}$  le vecteur de Burgers de la dislocation,  
 $\bar{l}$  le vecteur unitaire le long de la ligne de dislocation,

permet de déterminer les systèmes de glissement susceptibles d'être activés dans une géométrie donnée. Dans ce qui suit, nous nous intéressons au voisinage des interfaces du puits quantique.

En choisissant de fléchir les éprouvettes suivant un axe  $\langle 110 \rangle$ , nous répondons à l'un des objectifs fixés, à savoir introduire dans une seule direction des dislocations de type  $60^\circ$ , parallèles au plan des interfaces de croissance. En effet, dans cette géométrie, quatre systèmes de glissement - deux dans chacun des plans  $\{111\}$  en zone avec l'axe de flexion-, sont également activés avec le même facteur de Schmid  $\Phi = 0,41$ . Pour chacun de ces systèmes de glissement, toutes les boucles (demi-boucles) de dislocations présentent deux (un) segments de dislocations parallèles aux interfaces. Ces segments de dislocation sont:

- tous parallèles à l'axe de flexion,
- tous de type  $60^\circ$ ,
- leur caractère  $\alpha$  ou  $\beta$  est complètement déterminé par le choix du triplet: i) direction  $\langle 110 \rangle$  choisie pour l'axe de flexion, ii) signe de la contrainte extérieure et iii) vecteur de Burgers de la boucle de dislocation.

La possibilité de choisir à la fois le sens de la flexion et la direction de l'axe de flexion conduit à quatre situations différentes dont nous allons montrer qu'elles ne sont pas équivalentes. En ce qui concerne la localisation des sources, elles sont a priori des deux types: de surface et de volume. Les quatre orientations de flexion sont représentées sur la figure II.12. Dans chaque cas, il est indiqué la nature des boucles et demi-boucles de dislocation se développant en direction du puits quantique.

Pour une flexion autour de la direction  $[110]$  et à condition de mettre la couche épitaxiée en tension, les segments de dislocations  $60^\circ$  résultant du développement d'une demi-boucle à partir d'une source voisine de la surface sont de caractère  $\alpha$  (voir figure II.12-a). Si la source de dislocations est dans le volume, les segments de dislocations se propageant vers la surface (vers le puits quantique) sont de type  $\beta$ .

Axe de flexion	[110]		[1 $\bar{1}$ 0]	
Etat de contrainte de la couche épitaxiée	Tension	Compression	Tension	Compression
Systèmes de glissement activés (n,b)	(1 $\bar{1}\bar{1}$ ) [ $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$ ] (1 $\bar{1}\bar{1}$ ) [01 $\bar{1}$ ] ( $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ) [0 $\bar{1}\bar{1}$ ] ( $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ) [10 $\bar{1}$ ]	(1 $\bar{1}\bar{1}$ ) [101] (1 $\bar{1}\bar{1}$ ) [0 $\bar{1}$ 1] ( $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ) [011] ( $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ) [ $\bar{1}$ 01]	(111) [0 $\bar{1}$ 1] (111) [ $\bar{1}$ 01] ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) [011] ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) [101]	(111) [01 $\bar{1}$ ] (111) [10 $\bar{1}$ ] ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) [0 $\bar{1}\bar{1}$ ] ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ) [ $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$ ]
Caractère des segments 60° émis par une surface	$\alpha$	$\beta$	$\beta$	$\alpha$
Aptitude des segments 60° parallèles aux interfaces à relaxer la contrainte de désadaptation.	Non	Oui	Non	Oui

Tableau II.1

Il est aisé de montrer que dans une orientation de flexion, si on change l'un ou l'autre des deux éléments du couple axe de flexion/sens de flexion, on change également le caractère des segments  $60^\circ$ .

Nous avons reporté dans le tableau II.1 les systèmes de glissement activés et le caractère  $\alpha$  ou  $\beta$  des segments de dislocations  $60^\circ$  des demi-boucles émises à partir de la surface pour les quatre orientations de flexion possibles. Il faut noter que ce caractère  $\alpha$  ou  $\beta$  est le même quelle que soit la surface considérée (face épitaxiée ou face arrière du substrat) puisque, dans une expérience de flexion, le signe de la contrainte extérieure change au passage de la fibre neutre.

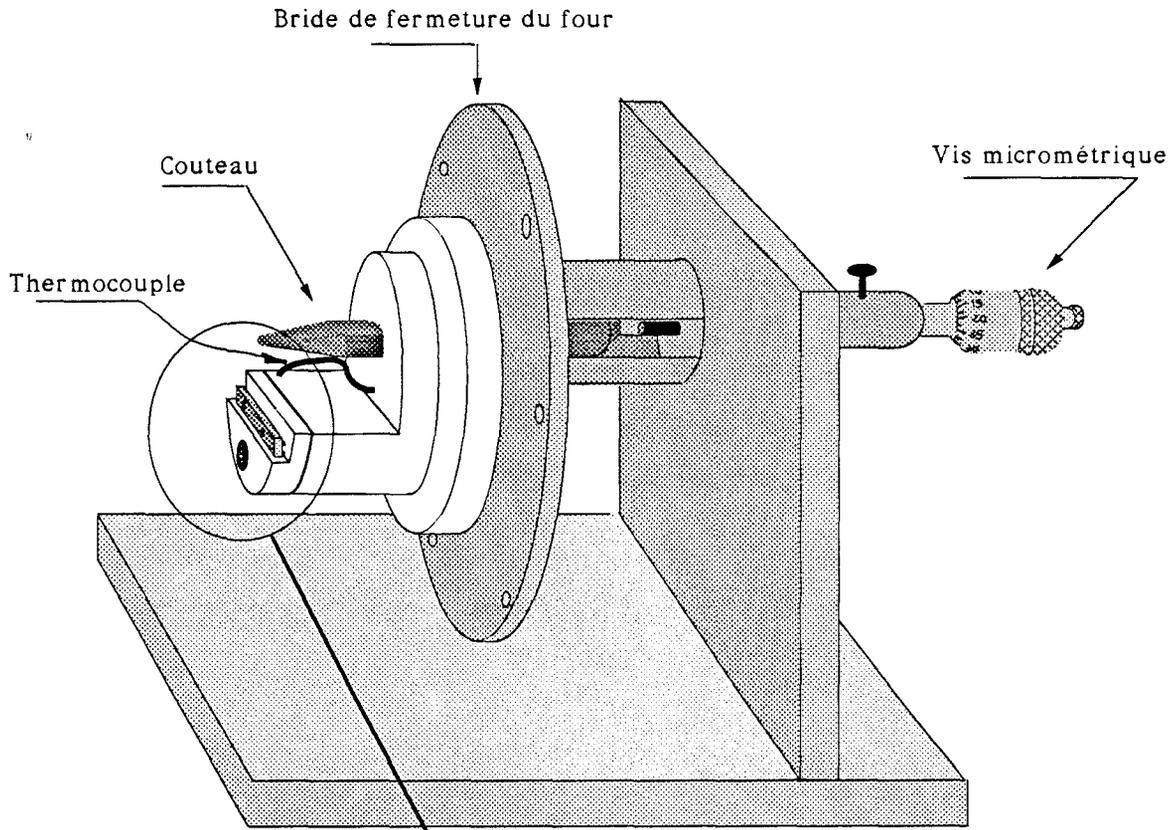
La ligne du tableau intitulée "Aptitude des segments  $60^\circ$  parallèles aux interfaces à relaxer la contrainte de désadaptation" ne concerne que le cas des hétérostructures pseudomorphiques GaAlAs-GaInAs-GaAs pour lesquelles la couche GaInAs est ("pré")contrainte en compression. L'information, donnée sous la forme "oui" ou "non", tient en fait compte, pour une dislocation  $60^\circ$  parallèle au plan de l'interface mais émise à partir de la face épitaxiée, de l'orientation du demi-plan supplémentaire correspondant. Pour les segments de dislocation en provenance d'une source de volumé, compte tenu de l'orientation opposée de son demi-plan supplémentaire, la conclusion précédente est inversée. Ainsi, si pour un système de glissement, les segments issus des sources de surface sont incapables de relaxer la contrainte de désadaptation, les segments en provenance du substrat le seront.

Dans la mesure où:

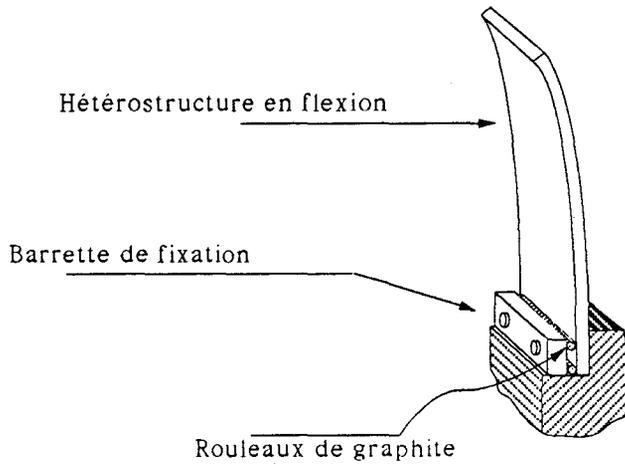
- la quantité de sources de surface est plus importante que celles de volume
- l'activation de sources de surface " $\alpha$ " et " $\beta$ " n'est pas équivalente

il résulte de l'ensemble de la précédente analyse qu'au moins pour les couches pseudomorphiques, les quatre orientations de flexion (couple axe de flexion/sens de flexion) ne sont effectivement pas équivalentes et que les sous-structures de dislocations obtenues dans chacun de ces cas pourront être différentes. C'est ce que nous tentons de démontrer dans la suite de ce travail.

(a)



(b)



**Figure II.13**- Schéma du montage de flexion encastrée.

### II.3.2.3- Conditions expérimentales

Des éprouvettes de flexion de dimensions 20 mm\*5 mm sont clivées suivant les directions  $\langle 110 \rangle$  dans des hétérostructures de normale  $\langle 001 \rangle$ . Ces lamelles sont ensuite montées sur un système de flexion encastrée: les lamelles sont fixées à une extrémité et une flèche variable est imposée en poussant l'autre extrémité au moyen d'un couteau relié à une vis micrométrique (figure III.13-a). Deux précautions sont prises afin de réduire les risques de clivage accidentel lors de la mise en place:

- des rouleaux de graphite sont intercalés entre l'échantillon et la barrette de fixation (figure III.13-b)

- une flèche faible (environ 100  $\mu\text{m}$ ) est imposée à l'échantillon à température ambiante.

La partie utile de l'éprouvette de déformation s'étend sur 13mm à partir de l'encastrement.

L'ensemble échantillon et porte-échantillon est ensuite chemisé par un four permettant de fixer la température de l'essai à une valeur comprise entre 350 et 400°C (domaine thermiquement activé). Un système de balayage d'azote gazeux permet de travailler sous atmosphère inerte afin d'éviter toute oxydation de la surface des lamelles de flexion. La faible inertie thermique du montage permet des montées en température d'une dizaine de minutes. La vis micrométrique est déplacée progressivement de 300  $\mu\text{m}$  supplémentaires quand l'équilibre thermique du montage est atteint. La flèche imposée à l'échantillon est donc égale à 400 $\mu\text{m}$ : elle correspond à une contrainte maximale  $\sigma_{max}$  (cf §II.3.2.1) de l'ordre de 130 MPa à l'encastrement pour une épaisseur de l'hétérostructure de 420  $\mu\text{m}$ . Cette valeur est suffisamment grande pour permettre la nucléation et le développement de dislocations dans une expérience de type "relaxation plastique de contrainte", mais elle est suffisamment faible pour éviter le clivage de l'échantillon à l'encastrement. Aux conditions de contrainte et de température -donc de vitesse des dislocations- choisies, un maintien à haute température pendant un temps supérieur à deux heures n'augmente pas de manière significative la longueur des segments de dislocations parallèles aux interfaces de croissance. Nous avons donc fixé à deux heures la durée de tous les essais. Finalement, la lamelle est refroidie sous contrainte par ouverture du four à l'air ambiant. Cela permet de geler les dislocations dans la configuration atteinte à haute température.

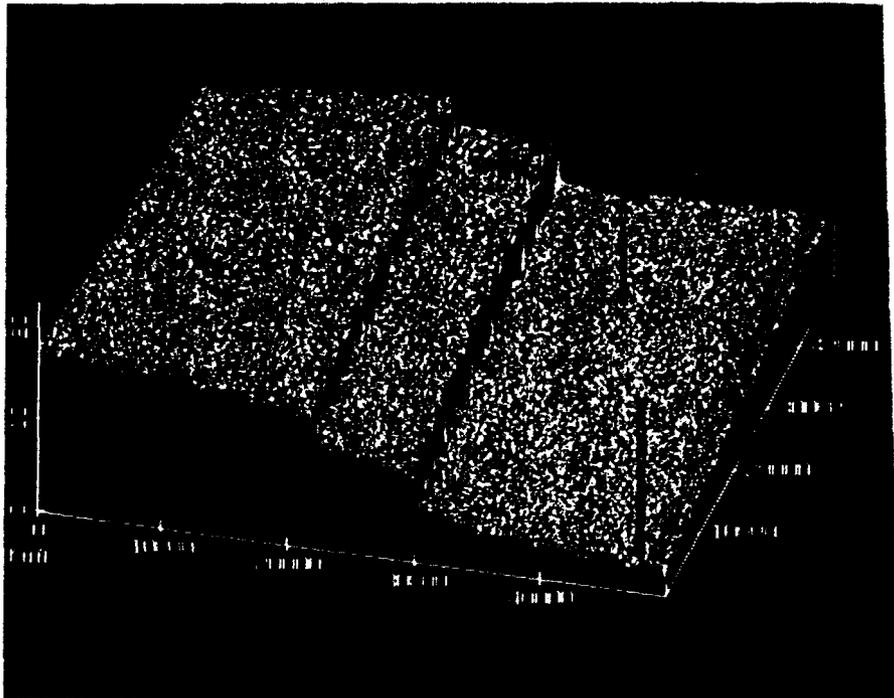
Des essais préliminaires de maintien à la température de l'essai de déformation, pendant plus de deux heures, d'échantillons non fléchis ont montré qu'aucun événement plastique ne se produisait du seul fait de la température.

En fait, il s'est avéré que la contrainte initiale, définie par la flèche imposée, est en grande partie relaxée par pliage au niveau de l'encastrement. C'est la raison pour laquelle il est inutile de maintenir les échantillons en flexion trop longtemps. En effet, la flexion imposée aux échantillons est loin d'être réductible au modèle présenté en II.3.2.1. Ceci est lié aux imperfections du système de fixation. Malgré tout le soin apporté au montage de l'échantillon, la majorité des lamelles fléchies présentent un pliage plus ou moins sévère à l'encastrement et des zones plastiquement déformées peu étendues (typiquement 4 à 6 mm de la partie utile). Il doit se produire à l'encastrement une concentration de contraintes induisant une déformation préférentielle de l'échantillon par pliage; ceci au détriment de la déformation plastique par relaxation de la contrainte dans la zone utile.

L'une des façons les plus satisfaisantes d'obtenir des échantillons déformés de façon relativement homogène sur toute l'étendue de leur zone utile, a été d'adopter pour la déformation la procédure suivante :

- chaque lamelle est fléchie par encastrement de l'une de ses extrémités,
- elle est ensuite fléchie, dans les mêmes conditions, mais cette fois-ci en encastrant la seconde extrémité.

Dans le cas des hétérostructures pseudomorphiques, les mesures des propriétés galvanomagnétiques ont été faites sur des échantillons déformés selon cette procédure.



***Figure II.14*** - Microscopie de force atomique.  
Lignes de glissement consécutives au cisaillement.

### II.3.3 - Caractérisation de la sous-structure par imagerie

Dans ce qui suit, vont être exposés les résultats des observations faites sur des hétérostructures fléchies dans les conditions de flexion décrites dans la section précédente, pour les quatre orientations de flexion possibles. Il s'agira essentiellement de résultats obtenus sur les structures GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs, car les densités de dislocations obtenues par flexion étaient, de loin, moins importantes dans les structures non contraintes GaAlAs-GaAs. Il sera également fait référence à quelques essais réalisés sur des structures GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs, c'est à dire présentant déjà des dislocations de relaxation de réseau.

#### II.3.3.1 - Etude de l'état de surface

La surface des échantillons déformés (face épitaxiée (001)) a systématiquement été observée au microscope optique en contraste interférentiel Nomarski. Cette analyse a révélé la présence de nombreuses traces de glissement (lignes et bandes) toutes parallèles à l'axe de flexion  $\langle 110 \rangle$ . Ces traces étaient d'autant plus visibles, c'est-à-dire d'autant plus profondes, que la zone observée était proche des zones encastrees. Ces lignes ou bandes de glissement, de densité variable, sont caractéristiques du développement durant la flexion de boucles de dislocations sur l'un ou l'autre des deux plans de glissement de type  $\{111\}$  en zone avec l'axe de flexion.

Lors de la flexion, la contrainte résolue étant plus grande dans les zones proches des encastremements, l'activité des sources et le développement des boucles de dislocations y est plus intense. Les traces de plans de glissement ou "marches" de surface y sont nettes. Plus on s'éloigne de l'encastrement, plus ces traces deviennent fines et peu contrastées; au delà de quelques millimètres, elles sont invisibles en microscopie optique. L'observation en microscopie de force atomique de certains des échantillons fléchis (figure II.14) a permis non seulement de visualiser des marches dans des zones où la microscopie optique devenait inopérante, mais aussi de mesurer leur hauteur. Dans une zone de l'échantillon où seules quelques lignes très fines étaient visibles en microscopie optique, la hauteur des marches observées en microscopie de force atomique variait de la dizaine à la centaine d'Å.

Dans le cas des hétérostructures pseudomorphiques, l'étude systématique de la densité ainsi que la répartition des traces de glissement dans les quatre orientations de flexion a permis de dégager certaines tendances quant à l'efficacité de la déformation plastique dans chacun des cas. Il ressort de ces observations que la distribution des lignes de glissement est plus dense et répartie de façon plus homogène dans la zone utile lorsque la flexion imposée sollicite les couches épitaxiées en compression. Dans le cas des échantillons dont les couches épitaxiées sont sollicitées en tension, la déformation plastique se fait de façon plus hétérogène: la partie utile présente peu de lignes de glissement alors que l'examen des zones encastrées révèle que le pliage  $\gamma$  est beaucoup plus prononcé que dans les échantillons sollicités en compression. Ainsi, les contributions à la relaxation de la contrainte appliquée, du pliage à l'encastrement et de la déformation plastique dans la partie utile de l'éprouvette dépendent fortement du signe de la contrainte appliquée.

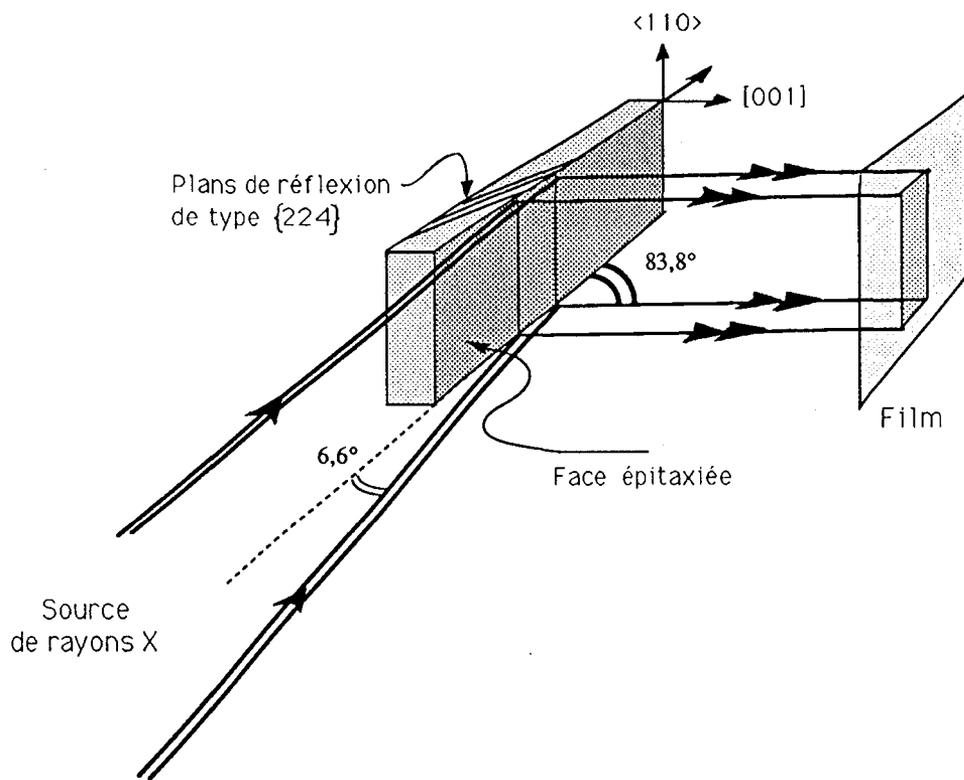
Nous avons également observé une dissymétrie de comportement plastique, pour un signe donné de la contrainte, lorsque l'on passe d'un axe de flexion à l'autre. La déformation plastique dans la zone utile des éprouvettes est toujours plus homogène dans le cas où les segments de dislocations  $60^\circ$  se développant à partir de la surface sont de type  $\alpha$ . Cette dissymétrie semble correspondre à des phénomènes de nucléation (ou de propagation) plus faciles pour des demi-boucles dont les segments de dislocations  $60^\circ$  sont de type  $\alpha$ . Les études antérieures de plasticité dans des composés non centrosymétriques massifs avaient déjà conduit aux mêmes observations.

L'étude en topographie de rayons X de la distribution des dislocations introduites par flexion confirme ces réflexions.

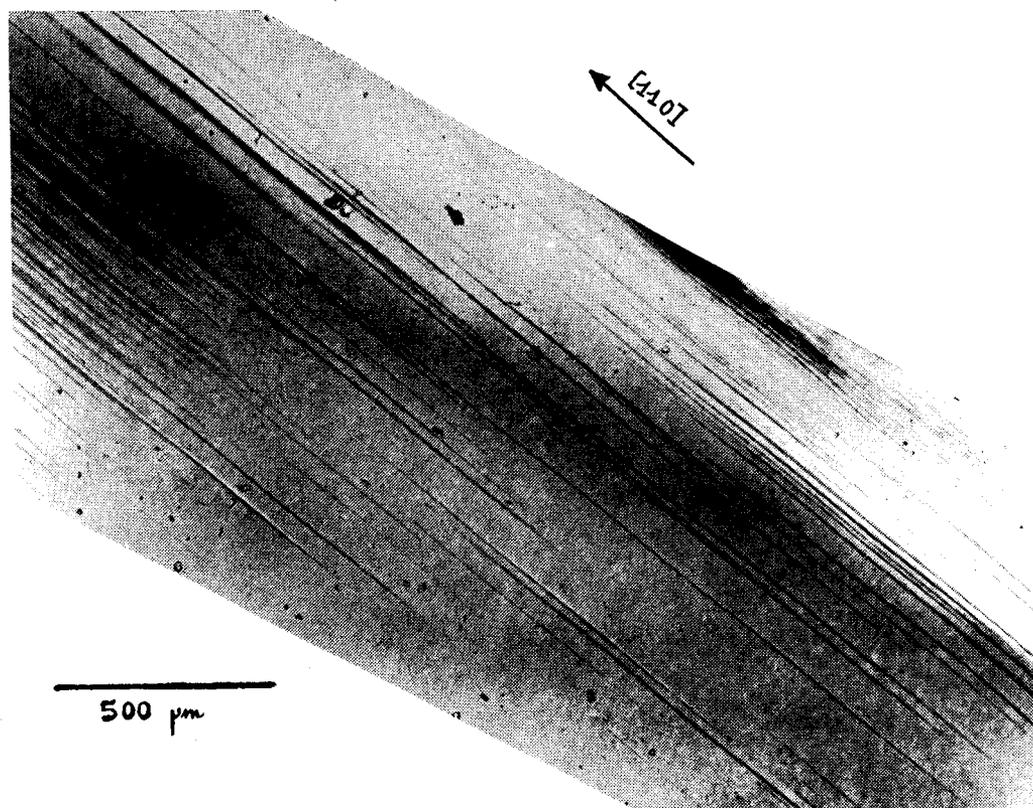
### II.3.3.2 - Topographie aux rayons X en réflexion

#### A - Conditions d'étude

La topographie aux rayons X en réflexion (voir par exemple Petroff et al. 1980, Tanner et Bowen 1980) est une méthode d'imagerie non destructive qui permet d'imager tous les défauts de type étendu présents dans les premiers micromètres sous la surface observée, à condition toutefois que leur densité ne



**Figure II.15** - Topographie aux rayons X.  
Echantillon en position de réflexion {224}.



**Figure II.16** - Topographie aux rayons X d'une hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs fléchie en tension  $\alpha$ . Distribution de dislocations développées par flexion.

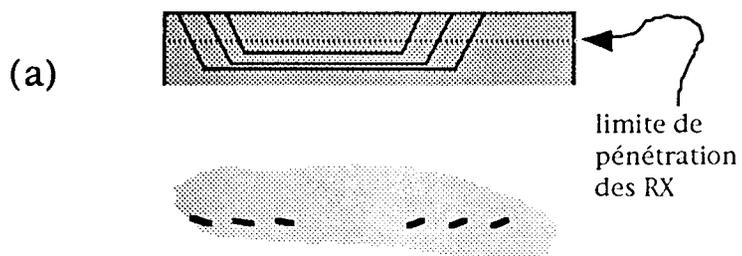
dépasse pas  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ . Cette condition est effectivement remplie pour tous nos échantillons. Cette technique d'observation non destructive est la seule méthode sûre dont nous disposons qui permet de visualiser les dislocations introduites par flexion (la cathodoluminescence ne permet d'imager que les défauts électriquement actifs). C'est pour cette raison qu'elle a été systématiquement mise en oeuvre sur les échantillons déformés de façon satisfaisante pour être étudiés en magnétotransport.

En règle générale, nous avons utilisé la réflexion du type  $\{224\}$  (figure II.15), dont le signal réfléchi est l'un des plus intenses. Un tel choix permet de diminuer les temps de pose et de limiter le rapport signal sur bruit. De plus, la réflexion  $\{224\}$  correspond à une orientation en incidence rasante, ce qui permet d'imager une grande surface de l'échantillon. L'information recueillie sur les "clichés RX" (film Industrex ou plaques nucléaires) cumule les signaux provenant d'une profondeur d'une dizaine de microns, c'est-à-dire des couches épitaxiées et de la partie superficielle du substrat.

Compte tenu de la limite de résolution de la méthode ( $5\mu\text{m}$ ), et de la profondeur de pénétration du faisceau de rayons X, le contraste des dislocations imagées (noir et/ou blanc sur fond grisé) sera plus ou moins fin et plus ou moins intense. Il dépendra de la proximité des dislocations entre elles (il peut s'agir soit d'une dislocation isolée soit plutôt d'un paquet de dislocations issues d'une même source ou de sources voisines), de leur localisation en profondeur ainsi que de l'état de contrainte local. L'analyse qualitative du contraste des défauts devrait donner une information sur leur localisation.

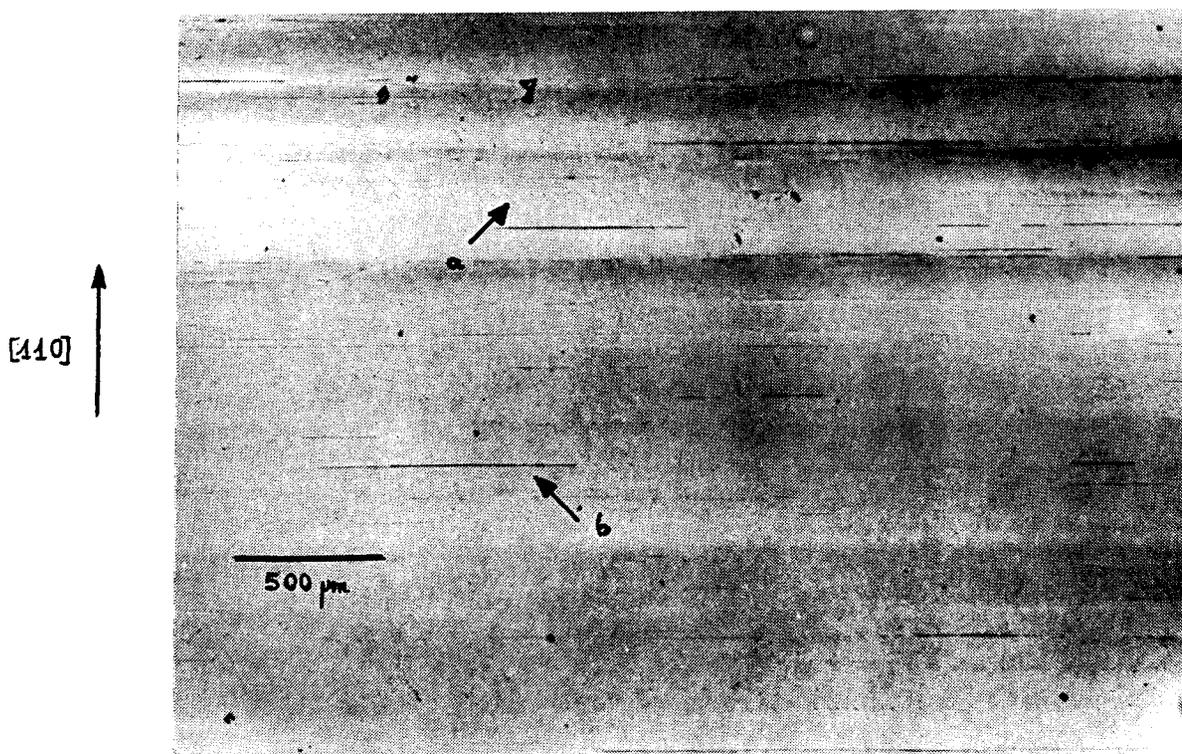
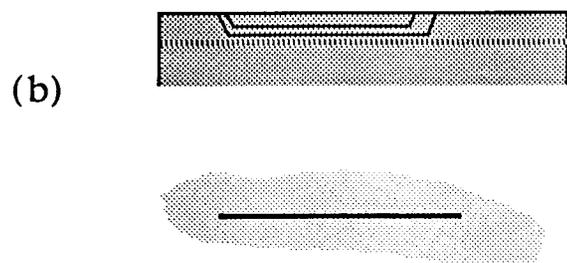
## **B - Nature des dislocations**

De façon générale, les clichés de topographie aux rayons X obtenus sur des échantillons déformés montrent que les sous-structures de dislocations introduites par flexion sont essentiellement constituées de segments de dislocations tous parallèles à l'axe de flexion, extrêmement longs et parfaitement rectilignes (Figure II.16). Leur distribution est aléatoire et leur densité varie d'une orientation de flexion à l'autre mais, dans tous les cas, elle décroît lorsque l'on s'éloigne des zones encastrées vers la partie centrale de la zone utile. Leur longueur peut atteindre le millimètre.



**Figure II.17**

Schéma des images de dislocations obtenues par topographie aux RX suivant leur localisation en profondeur.



**Figure II.18** - Topographie aux rayons X d'une hétérostructure GaAlAs-GaInAs(120 Å)-GaAs fléchée en compression  $\alpha$ .

Plusieurs orientations de réflexion des RX ont été testées afin d'éteindre le contraste de diffraction lié à ces dislocations. Ces tentatives révèlent que les dislocations ne sont ni des dislocations coins ni des dislocations vis. Elles sont donc très probablement, comme prévu (cf.II.3.2.2), de type 60°, même si, en topographie aux RX, aucune extinction correspondante n'a pu être réalisée.

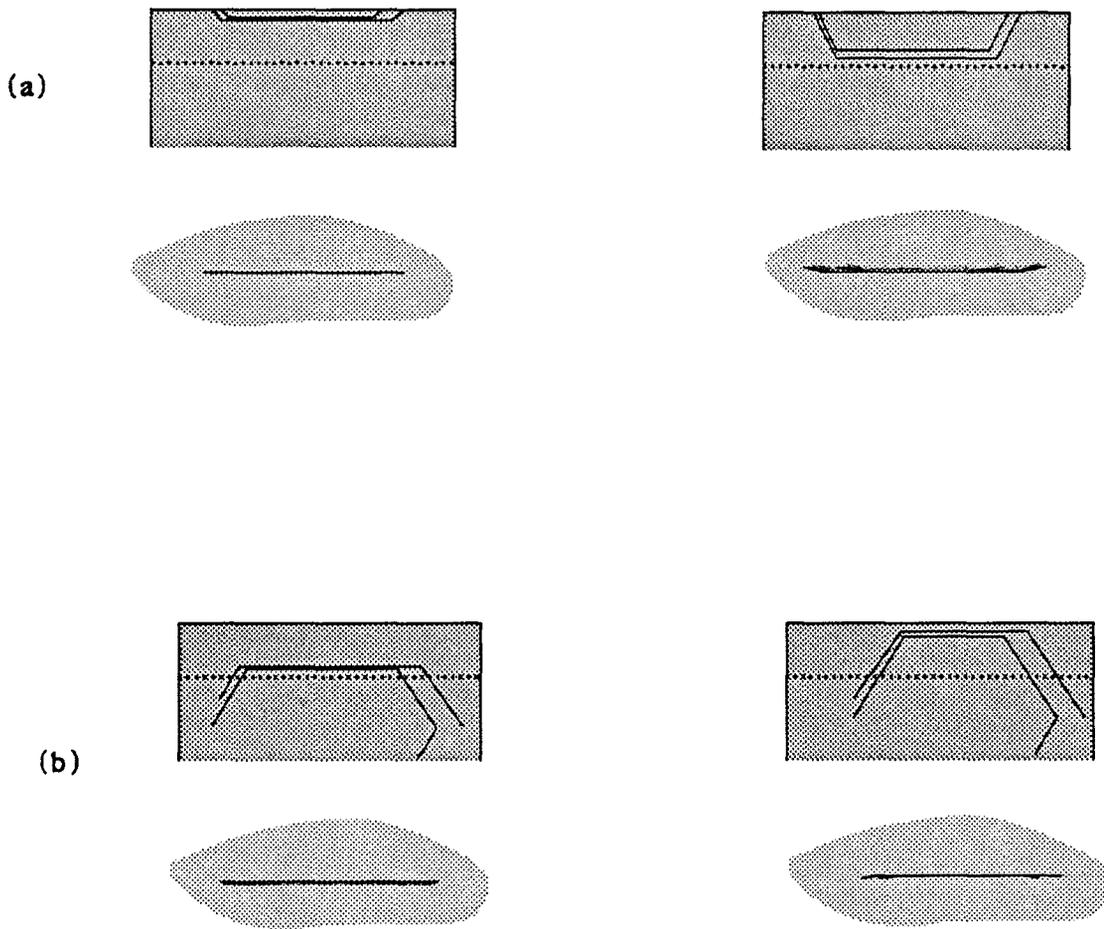
Le fait d'imager de tels longs segments rectilignes montre que de nombreuses (demi-)boucles de dislocations se sont allongées préférentiellement dans la direction de l'axe de flexion et au voisinage du puits quantique. En effet les (demi-)boucles de dislocations dont tous les segments se seraient développées de façon symétrique auraient été soit imagées par de très petits traits si leur taille ne dépasse pas quelques micromètres, soit représentées sur le cliché par deux petits segments obliques relativement éloignés, alignés avec l'axe de flexion si elles s'étaient étalées en profondeur (figure II.17). On observe parfois ce type d'images dans certains échantillons déformés (figure II.18).

L'observation de longs segments rectilignes révèle que, lors de la flexion, il s'est produit soit un processus de piégeage du segment horizontal des boucles de dislocations à faible profondeur (à l'une des interfaces de la couche GaInAs), soit un glissement très rapide des segments de dislocations émergents.

Conformément aux conclusions tirées à partir des observations de surface, nous avons observé un comportement plastique asymétrique surtout pour les lamelles de flexion issues des hétérostructures pseudomorphiques. La densité de dislocations est systématiquement plus grande et la distribution plus uniforme dans le cas des flexions sollicitant les couches épitaxiées en compression que dans les cas de flexions sollicitant les couches en tension.

La localisation en profondeur des segments de dislocations parallèles aux interfaces peut être déterminée par l'exploitation conjointe du contraste des segments horizontaux et de la présence ou non de segment(s) oblique(s) à leur(s) extrémité(s). Bien sûr, l'étude du contraste des dislocations en topographie étant relativement complexe, on se contente ici de déductions qualitatives.

Ainsi (Figure II.19) une ligne noire sans segment oblique à ses extrémités est située à la limite de pénétration des rayons X si elle a un contraste flou et épais, ou alors très proche de la surface (probablement à un interface) si son contraste est net et fin. Dans le premier cas il s'agira d'une dislocation (ou paquet de



**Figure II.19** - Schéma du contraste de topographie aux RX des dislocations suivant leur localisation en profondeur et leur origine: (a) source de surface ou (b) source de volume.

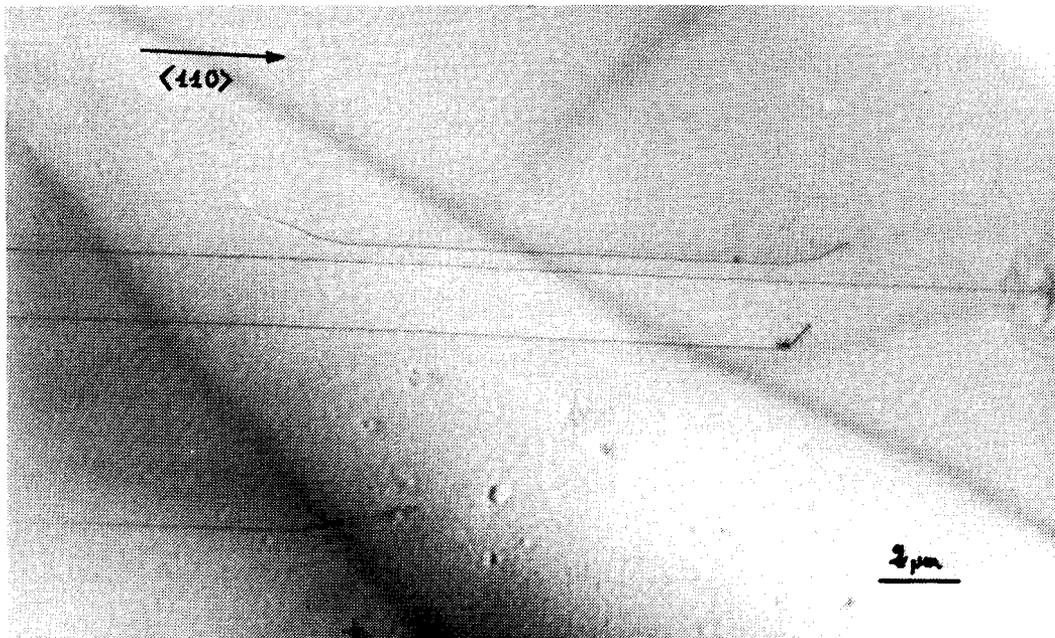
dislocations) issue(s) d'une source de volume; dans le second cas il s'agira d'une dislocation issue d'une source de surface et bloquée près du puits ou à une interface (probablement l'interface GaInAs/GaAs-couche tampon). Si par contre cette ligne noire présente des segments obliques, la(les) dislocation(s) correspondante sera, dans le premier cas, issue d'une source de surface et aurait traversé les différents interfaces pour s'arrêter à une profondeur voisine de la limite de pénétration des rayons X; dans le second cas elle serait issue d'une source de volume et serait venue se piéger à l'un des interfaces.

L'analyse, par ce type de raisonnement, des différents clichés ne permet pas de dégager de tendance systématique. Beaucoup des lamelles présentent de façon statistique la totalité des configurations énoncées. Toutefois on observe une certaine prédominance de la configuration correspondant à des paquets de dislocations issues de sources de surface ou peu profondes (donc voisines des couches épitaxiées).

Ceci semble confirmé par l'analyse de clichés de topographie X réalisés avec la réflexion  $(\bar{1}13)$  - correspondant à une plus faible profondeur de pénétration (de l'ordre du micron) - sur lesquels les densités de défauts imagés ne semblent pas beaucoup modifiées par rapport à celles observées sur les clichés réalisés en réflexion  $\{224\}$ .

En résumé, nous pouvons estimer qu'une bonne fraction des dislocations développées par flexion est répartie de façon aléatoire dans les quelques premiers micromètres de profondeur. Si la topographie des rayons X ne permet pas de déterminer la proportion exacte de dislocations contenues dans le voisinage immédiat du puits quantique (couche GaInAs ou interface GaAlAs-GaAs), elle permet de constater qu'il y en a tout de même une densité appréciable.

Le recours à une autre méthode d'imagerie telle que la Microscopie Electronique en Transmission (MET) apporte quelques éléments de réponse complémentaires.



***Figure II.20*** - Microscopie électronique en transmission.  
"Plan view" d'une hétérostructure GaAlAs-GaAs fléchie.

### II.3.3.3 - Microscopie Electronique en Transmission

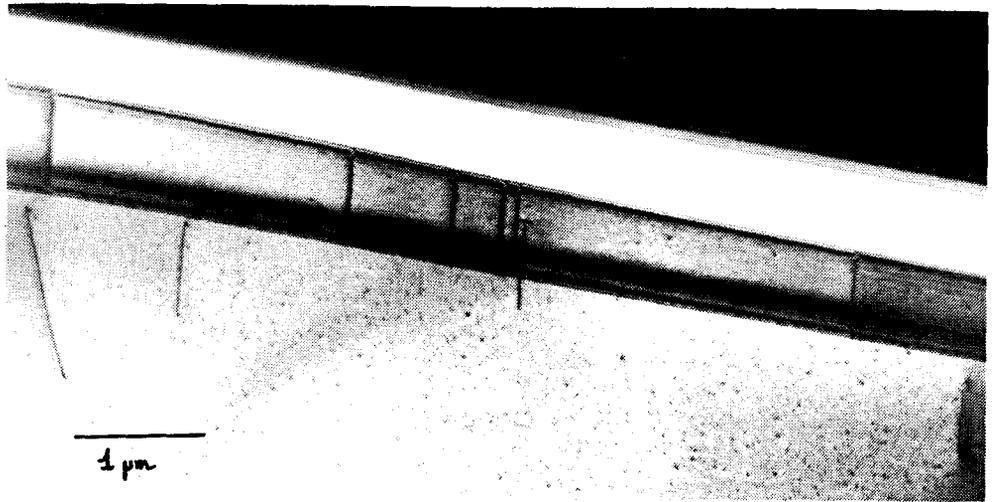
La principale source de perturbation des propriétés de transport électronique dans le puits quantique étant, comme on peut le supposer, associée à la présence de dislocations dans le puits, il est important de disposer d'une technique d'imagerie fine permettant d'obtenir des informations à la fois sur la localisation des dislocations et sur leur nature. Bien que la Microscopie Electronique en Transmission (MET) ne soit pas très adaptée au cas des densités de dislocations aussi faibles que celles introduites par flexion dans nos hétérostructures, nous allons montrer que des observations faites sur des échantillons amincis soit parallèlement aux interfaces ("plan view"), soit perpendiculairement aux interfaces (vues sur la tranche, "cross section"), nous ont apporté des renseignements que la topographie aux rayons X ne nous avait pas fournis.

#### A - "Plan-view"

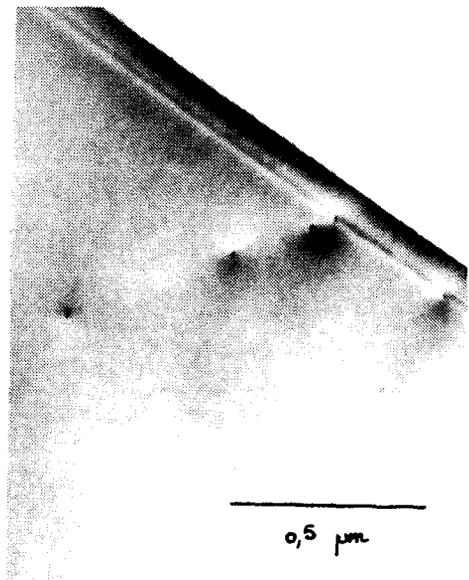
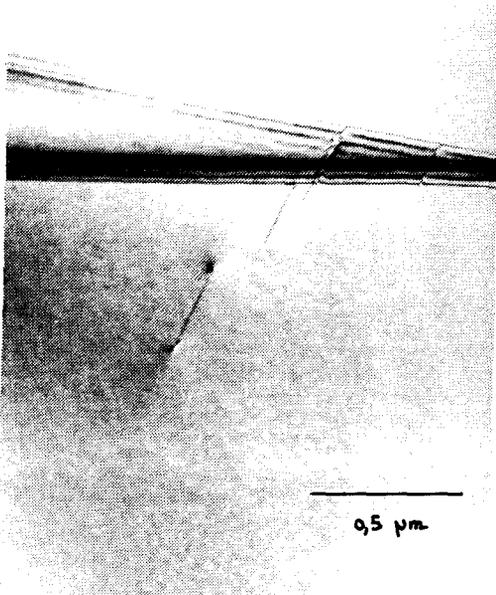
L'épaisseur des zones minces transparentes en MET étant en moyenne de 1000 Å, l'information recueillie sur les "plan-view" provient en majeure partie des couches épitaxiées. Cette méthode permet ainsi d'analyser sélectivement les dislocations au voisinage immédiat et à l'intérieur du puits quantique.

Dans les échantillons fléchis, nous retrouvons, à l'échelle nanométrique, le caractère très rectiligne des longues dislocations parallèles aux interfaces (figure II.20). Compte tenu du petit nombre de dislocations observées, si l'estimation de leur densité a un sens, elle serait de l'ordre de  $10^2$  à  $10^3 \text{ cm}^{-1}$ .

L'étude du contraste oscillant des segments de dislocations, inclinés par rapport au plan de la lame mince et situés aux extrémités des dislocations parallèles aux interfaces, révèle qu'il y a aussi bien des dislocations résultant du développement d'une boucle à partir d'une source de surface que des dislocations résultant du développement d'une boucle à partir d'une source de volume, voire même de l'allongement, dans le plan d'une interface, de répliques du substrat. Malheureusement, les dislocations parallèles aux interfaces étant très longues, leurs extrémités se trouvent le plus souvent en dehors de la zone transparente aux électrons et nous avons rarement pu obtenir une information sur l'orientation de leurs émergences.



**Figure II.21** - Microscopie électronique en transmission. "Cross section" d'une hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs fléchée en compression  $\alpha$ . Dislocations de type  $\alpha$  piégées à l'interface GaInAs-GaAs.



dislocations  $\beta$  "debouts" dans un plan de glissement  $\{111\}$ .

**Figure II.22** - Microscopie électronique en transmission. "Cross section" d'une hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs fléchée en tension  $\alpha$ . Dislocations de type  $\beta$  piégées à l'interface GaInAs-GaAs.

## B - "Cross-section"

Les observations en vue sur la tranche, se sont révélées plus riches en informations. Elles ont montré sans ambiguïté que notre méthode de déformation permettait de piéger des dislocations à l'interface GaInAs/GaAs. Ceci est illustré par la photo de microscopie II.21 qui image une zone située à trois millimètres de l'encastrement. On y distingue une distribution de dislocations à l'interface GaInAs-GaAs, toutes parallèles à l'axe de flexion et en relativement grande densité. Plus loin de l'encastrement, les sous-structures de dislocations sont identiques mais les densités observées sont plus faibles.

La recherche des vecteurs de diffraction, de type  $\langle 202 \rangle$ , permettant leur extinction a permis de conclure que ces dislocations sont de type  $60^\circ$  et s'apparentent à des dislocations de désadaptation de réseau (les hétérostructures de départ n'en présentaient aucune).

On observe également des dislocations situées dans le substrat. Certaines sont parallèles à l'axe de flexion et de type  $60^\circ$ , d'autres sont d'orientation et de caractère quelconque; elles seraient plutôt le résultat du développement sous la contrainte de flexion des dislocations de la structure cellulaire pré-existante.

Du point de vue de la plasticité des hétérostructures pseudomorphiques, le résultat le plus important est le suivant: les dislocations  $60^\circ$  piégées à l'interface GaInAs/GaAs, sont de type  $\alpha$  ou de type  $\beta$ , suivant l'orientation de flexion, mais elles correspondent toujours aux dislocations capables de relaxer partiellement la contrainte de désadaptation de la couche GaInAs perpendiculairement à la direction de l'axe de flexion. Ceci est illustré par les deux photographies II.21 et II.22 qui reprennent chacune une orientation de flexion et l'identification des dislocations piégées correspondantes.

Par exemple, dans le cas d'un échantillon fléchi face épitaxiée en tension avec un axe de flexion parallèle à la direction  $[110]$ , on a effectivement observé des dislocations  $\beta$  dans l'interface GaInAs/GaAs. D'après le modèle de développement de boucles de dislocations présenté en II.3.2.2, ces dislocations ne peuvent s'être développées qu'à partir de sources de volume. Ceci est en effet confirmé par la disposition des dislocations sur la photo de microscopie II.22: l'empilement de dislocations de type  $\beta$  dans leur plan de glissement est apparemment issu d'une source voisine de l'interface GaAs-substrat/GaAs-couche tampon. Cette

observation confirme qu'il existe bel et bien des sources de dislocations de volume capables d'être activées par flexion.

Les observations faites sur deux des quatre orientations de flexion, que ce soit sur les plan-views ou les cross-sections, confirment l'existence d'une asymétrie du comportement plastique. La densité de dislocations observée est toujours plus grande dans les lamelles fléchies face épitaxiée en compression que dans celles fléchies face épitaxiée en tension. Ce résultat mériterait d'être vérifié dans les deux orientations de flexion restantes.

#### II.3.3.4 - Remarque: cisaillement des hétérostructures

L'observation, par microscopie électronique en transmission, d'échantillons en vue sur la tranche permet également de contrôler la planéité des interfaces. En effet, aux nombreuses marches visibles en microscopie optique à la surface des éprouvettes doivent correspondre des cisaillements des interfaces créés par le glissement des dislocations au cours de la flexion. Des cisaillements de ce type ont effectivement été observés par Goiran et al. (1993) mais dans des conditions de déformation beaucoup plus sévères que les nôtres.

Tant que les cisaillements sont faibles, la continuité du gaz électronique bidimensionnel dans le puits quantique est préservée mais les marches d'interface créent une rugosité unidimensionnelle qui peut être à l'origine d'un mécanisme de diffusion électronique efficace.

Si les cisaillements sont grands (supérieurs à la largeur du puits quantique), il y a coupure du gaz électronique bidimensionnel, rendant toute mesure des propriétés de transport impossible. Afin d'éviter ces situations physiquement sans intérêt, nous avons soigneusement évité de découper des échantillons de mesures électriques dans les zones fortement cisillées au voisinage immédiat de l'encastrement.

Il faut toutefois noter que pour les échantillons observés par microscopie électronique en transmission, nous n'avons pas mis en évidence de cisaillement des interfaces; le nombre des observations faites reste cependant trop faible pour affirmer que ces cisaillements n'existent pas. C'est pourquoi nous tiendrons compte, dans le quatrième chapitre, de l'influence d'une éventuelle rugosité 1D des interfaces sur la mobilité électronique.

## II.3.4 - Origine probable de l'asymétrie observée

### II.3.4.1 - Bilan des observations

Les informations dégagées à partir de l'ensemble de l'analyse précédente sont nombreuses:

- La déformation des hétérostructures par flexion encastree permet de développer des sous-structures de dislocations essentiellement constituées de segments de dislocation extrêmement longs et parfaitement rectilignes de type  $60^\circ$ , tous parallèles à l'axe de flexion et statistiquement répartis en profondeur.

- Dans le cas des hétérostructures pseudomorphiques avec puits de 120 Å fléchies, les dislocations piégées à l'interface GaInAs-GaAs ont les caractéristiques voulues (direction de ligne, vecteur de Burgers) pour relaxer partiellement la contrainte de désadaptation de réseau; elles sont de caractère  $\alpha$  pour un axe de flexion  $[1\bar{1}0]$  et  $\beta$  pour un axe de flexion  $[110]$ ,

\* pour un échantillon sollicité face épitaxiée en compression, elles résultent du développement de boucles de dislocations à partir de sources de surface,

\* pour un échantillon sollicité face épitaxiée en tension, elles résultent du développement de boucles de dislocations à partir de sources de volume.

Dans les deux cas, on peut également envisager la contribution apportée par l'allongement de répliques dans le plan de l'interface (un processus analogue à celui proposé dans le modèle de Matthews (1975) pour expliquer l'origine des dislocations de désadaptations de réseau).

- La déformation plastique des échantillons est toujours plus homogène (et donc la relaxation de la contrainte par pliage de l'extrémité encastree réduite) pour une flexion autour de la direction  $[1\bar{1}0]$ , la couche épitaxiée étant sollicitée en compression. Cette particularité est à mettre en étroite relation avec le caractère composite du matériau déformé. En effet, les essais préliminaires de déformation que nous avons réalisé sur des substrats nus (sans couche épitaxiée) se sont soldés par un échec: la relaxation de la contrainte de flexion s'y faisait essentiellement par pliage aux encastrements. Nous avons alors (Bougrioua 1990) argumenté

qu'une fraction de la contrainte appliquée avait été relaxée par le cisaillement associé au mouvement élastique du réseau de dislocations de croissance (réseau de Frank), au détriment de la nucléation et de la propagation de nouvelles dislocations.

Pour les essais de déformation des hétérostructures, nous avons signalé précédemment qu'aucune rayure ou indentation n'avait été faite intentionnellement sur la surface, dans le but de créer artificiellement des sources de dislocations: le comportement plastique observé dépend donc uniquement des possibilités de nucléation et de propagation des dislocations intrinsèques aux hétérostructures.

Ces différents points sont repris dans la section qui suit pour tenter de montrer que l'origine du comportement plastique est associée à la présence d'une couche pseudomorphique en compression.

### Remarque

La flexion d'hétérostructures contenant, avant déformation, des dislocations de désadaptation de réseau, nous a permis d'observer que la longueur et la densité de dislocations présentes dans ces structures avaient augmenté de façon extraordinaire après déformation. Cette observation rend ainsi plausible l'idée selon laquelle la couche contrainte joue un rôle important dans les mécanismes de déformation par flexion des hétérostructure pseudomorphiques.

### II.3.4.2 - Rôle de la couche contrainte

Le modèle de développement de boucles de dislocations dans un essai de déformation en flexion encadrée, repose sur l'hypothèse d'un matériau homogène. Or le système pseudomorphique que nous avons étudié est un système hétérogène composé de l'empilement d'une couche légèrement contrainte en tension (GaAlAs), d'une couche fortement contrainte en compression GaInAs (typiquement, pour un taux d'indium de 20%, la contrainte est de l'ordre de 1600 MPa) et d'un substrat non contraint.

Nous allons considérer, en appliquant le principe de superposition des contraintes, que, en première approximation, le tenseur des contraintes dans la couche non adaptée en paramètre de maille (GaInAs) est, lors de la flexion, égale à la somme du tenseur des contraintes de désadaptation ( $\sigma_{des}$ ) et du tenseur des contraintes de flexion ( $\sigma_{ext}$ ) :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{ext} + \sigma_{des} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{des} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

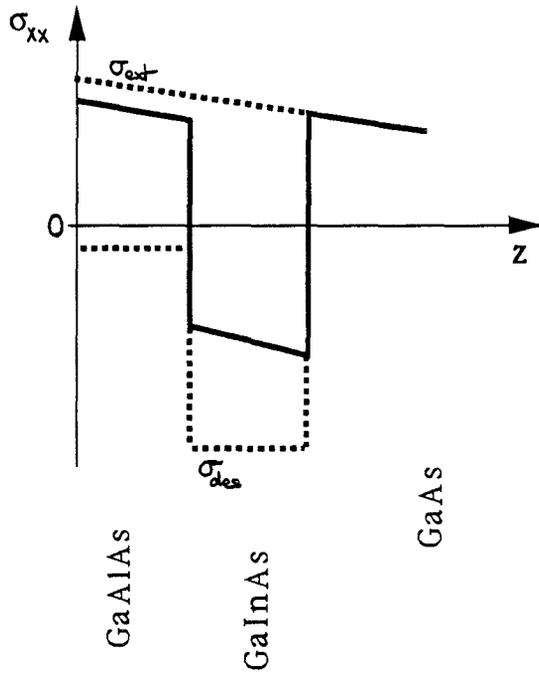
Pour la géométrie de déformation choisie, seule la composante  $\sigma_{xx}$  du tenseur a une incidence sur le mouvement des dislocations. La composante  $\sigma_{yy}$  pourrait agir à des températures très élevées dans des processus de glissement dévié; elle est cependant inactive aux températures auxquelles nous avons déformé.

La contrainte  $\sigma_{xx}$  agissant sur une dislocation au cours de son mouvement à travers les différentes couches d'une hétérostructure pseudomorphique GaAlAs-GaInAs-GaAs varie de la façon suivante:

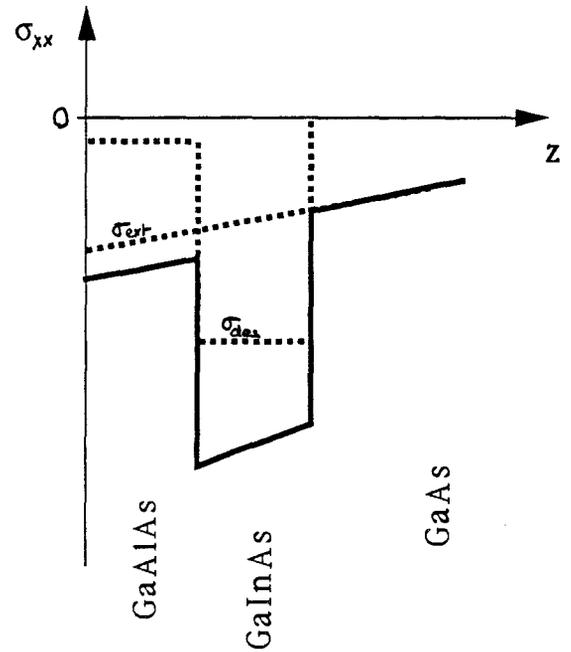
- couche d'alimentation + espaceur GaAlAs :  $\sigma_{xx} = \sigma_{ext} + \sigma'$
- couche pseudomorphique GaInAs:  $\sigma_{xx} = \sigma_{ext} + \sigma_{des} \gg \sigma_{ext}$
- couche tampon + substrat GaAs:  $\sigma_{xx} = \sigma_{ext}$

$\sigma_{des}$  est la contrainte de compression de la couche GaInAs; nous la prendrons constante dans toute l'épaisseur de la couche et nulle ailleurs. L'expression de  $\sigma_{ext}$  a été donnée en II.3.2.1.  $\sigma'$  est la faible contrainte de compression de la couche GaAlAs, (de l'ordre d'une centaine de MPa).

Couches épitaxiées sollicitées  
en tension ( $\sigma_{ext} > 0$ )



Couches épitaxiées sollicitées  
en compression ( $\sigma_{ext} < 0$ )



**Figure II.23** - Evolution de la contrainte totale  $\sigma_{xx}$  dans l'épaisseur d'une hétérostructure pseudomorphique soumise à une contrainte extérieure.

La variation de  $\sigma_{xx}$  est schématisée sur la figure II.23 pour des structures fléchies couches épitaxiées sollicitées en compression, et pour des structures fléchies couches épitaxiées sollicitées en tension; les ordres de grandeur y ont été respectés. Quel que soit le signe de la sollicitation extérieure (couches épitaxiées en tension ou en compression), on observe une discontinuité de la contrainte totale au passage des interfaces de la couche désadaptée.

On notera que le même raisonnement s'applique à des couches peu contraintes par rapport au substrat (cas d'une couche épitaxiée de GaAlAs sur un substrat GaAs) mais que la discontinuité de contrainte au passage de l'interface est alors faible. Dans ce cas, la présence d'une contrainte de désadaptation n'affecte que très peu la distribution de contrainte extérieure.

Dans le cas des hétérostructures pseudomorphiques GaAlAs-GaInAs-GaAs, ayant un puits de 120 Å, deux situations différentes peuvent être considérées suivant que la contrainte extérieure et celle de désadaptation de réseau sont de même signe ou de signes opposés:

-a) pour une sollicitation extérieure des couches épitaxiées en tension ( $\sigma_{ext} > 0$ ):  
la contrainte totale peut subir un changement de signe au passage des interfaces de la couche contrainte (fig.II.23). Ceci peut rendre difficile la traversée de la couche GaInAs par une dislocation incidente dont le mouvement à l'extérieur de la couche contrainte était lié à l'existence d'une contrainte positive. D'où la possibilité d'un processus de ralentissement ou même de blocage des dislocations aux interfaces de GaInAs. Un tel processus de blocage peut favoriser la formation d'amas de dislocations et conduire à une déformation hétérogène.

-b) pour une sollicitation extérieure des couches épitaxiées en compression ( $\sigma_{ext} < 0$ ):

la contrainte totale ne change pas de signe au passage de l'interface, elle est beaucoup plus grande dans la couche GaInAs que dans la couche GaAlAs et la déformation plastique des lamelles de flexion en est facilitée, ceci pour au moins deux raisons. D'une part, l'absence de changement de signe de la contrainte permet de penser qu'il n'y aura pas de phénomène de blocage, même si un effet de piégeage devait subsister aux interfaces du puits lorsque, par exemple, les dislocations ont les caractéristiques voulues pour accommoder la contrainte de désadaptation de réseau. D'autre part, l'augmentation, du fait de la contrainte extérieure appliquée, de l'énergie élastique  $\epsilon_{el}$  emmagasinée dans la couche

pseudomorphique, place artificiellement le système dans un état où la couche contrainte serait au delà de son épaisseur critique. Des mécanismes de nucléation/propagation analogues à ceux qui conduisent à l'apparition des dislocations de désadaptation de réseau (cf. II.2.3.2) peuvent alors devenir efficaces.

Nous pouvons pousser plus loin l'analogie que nous venons de faire entre la déformation plastique d'une hétérostructure dont les couches épitaxiées sont sollicitées *en compression* et le développement des dislocations de désadaptation de réseau au cours de la croissance lorsque la couche contrainte atteint son épaisseur critique.

Nous avons, en effet, déjà signalé que les dislocations de désadaptation de réseau de type  $\alpha$  apparaissent dans la direction  $[1\bar{1}0]$  avant l'apparition des dislocations  $\beta$  dans la direction orthogonale, probablement parce que l'énergie nécessaire à leur nucléation est moindre (cf. II.2.3.2). Nous pouvons alors comprendre la difficulté de développer une densité importante de dislocations pour le choix d'un axe de flexion suivant  $[1\bar{1}0]$  puisque cette orientation favorise le développement de segments  $60^\circ$  de caractère  $\beta$ . Toutes choses étant égales par ailleurs, la contrainte extérieure nécessaire pour obtenir le même taux de déformation que pour le choix d'un axe de flexion suivant  $[110]$  devrait être plus grande pour cette orientation. Mais *pour notre système de flexion* il n'est pas utile d'imposer aux échantillons de flexion une flèche plus importante puisque la relaxation de la contrainte est alors essentiellement assurée par pliage à l'encastrement.

Les observations que nous venons de faire au sujet de l'importance de la couche contrainte permettent de classer les quatre orientations de flexion par ordre d'efficacité. Ainsi, pour notre système de flexion l'orientation de flexion la moins favorable au développement d'une zone plastiquement déformée relativement grande est le cas de la tension- $\beta$  (voir figure II.12 pour la définition). Par contre l'orientation compression- $\alpha$  semble être l'orientation la plus performante même si elle ne permet pas forcément de piéger un grand nombre de dislocations aux interfaces du puits quantique. Les orientations compression- $\beta$  et tension- $\alpha$  donnent des résultats similaires, compromis des deux cas extrêmes précédemment cités. Si nous étions capable de contrôler la distribution des sources, il serait préférable de fléchir les échantillons dans l'orientation tension- $\alpha$  plutôt qu'en compression- $\alpha$  car nous pensons que le changement du signe de la contrainte aux interfaces de la couche pseudomorphique est un élément déterminant pour le piégeage des dislocations aux interfaces.

### II.3.5 - Conclusion

Pour les conditions de déformation définies au début de ce paragraphe, la flexion encastrée d'hétérostructures pseudomorphiques GaAlAs-GaInAs-GaAs non relaxées, permet d'introduire de façon sélective et reproductible des dislocations de type  $\alpha$  ou  $\beta$ , majoritairement parallèles à l'axe de flexion. Dans les deux cas, les dislocations qui restent piégées aux interfaces du puits quantique GaInAs sont celles capables de relaxer la contrainte de désadaptation de la couche pseudomorphique.

Les différentes observations réalisées sur les lamelles fléchies révèlent que:

- l'efficacité des sources de dislocation de surface est plus grande que celles des sources de volume.

- lorsque les sources de surface sont de type  $\alpha$ , le développement et la multiplication des dislocations sont favorisés au détriment de la relaxation de la contrainte de flexion par pliage au niveau de l'encastrement.

- le comportement plastique en compression est interprété en terme d'un déclenchement artificiel, dû à la flexion, d'un processus de relaxation de la couche contrainte, l'énergie élastique  $\epsilon_{el}$  emmagasinée dans la couche pseudomorphique devenant suffisamment grande pour permettre une relaxation plastique partielle. La déformation plastique plus facile pour des géométries de flexion favorisant le développement de segments  $60^\circ \alpha$  à partir de la surface, est cohérente avec l'asymétrie de création des dislocations de désadaptation de réseau  $\alpha$  et  $\beta$  observée lors de la croissance des hétérostructures partiellement relaxées (Kavanagh 1988).

Il semble que la situation la plus favorable au développement homogène de longues dislocations au voisinage du puits consiste à déformer des hétérostructures pseudomorphiques avec une couche contrainte dont l'épaisseur est légèrement en deçà de l'épaisseur critique; le signe de la contrainte extérieure étant choisi de manière à augmenter l'énergie élastique stockée dans la couche. Les conclusions auxquelles nous arrivons résultent d'un travail réalisé sur des hétérostructures GaInAs/GaAs où la couche désadaptée est contrainte en compression; il serait intéressant de travailler sur des couches contraintes en tension de manière à confirmer ou infirmer les résultats présentés ici.

Dans le chapitre qui suit, outre les mesures de magnéto-transport réalisées sur les systèmes plastiquement relaxés GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs, sont présentées les mesures réalisées sur des structures déformées en tension- $\alpha$  GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs et GaAlAs-GaAs.

## Chapitre III

### *Etude expérimentale du magnétotransport*

*"Both, the sample preparation and the measurement technique  
are more reproducible under virtual reality environment  
of a computer, than in a real laboratory"*

Hebert KROEMER (1993).

# Chapitre III

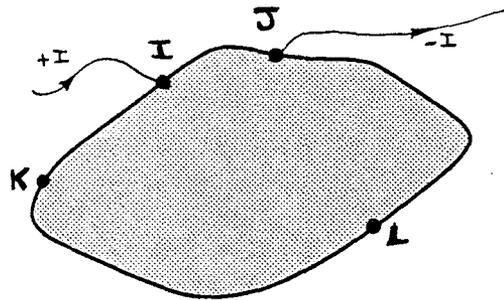
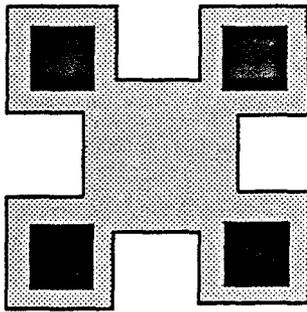
## Etude expérimentale du magnétotransport

---

Les défauts linéaires introduits dans les systèmes 2D sont tous parallèles à une direction  $\langle 110 \rangle$  unique. Cette distribution asymétrique de défauts anisotropes conduit à des propriétés de transport anisotropes. Les axes propres de tels systèmes sont simplement donnés par la direction des défauts et par la direction normale à ces défauts.

En choisissant de travailler à basse température et compte tenu du dopage des structures utilisées, seule la première bande du puits devrait être occupée et le transport parallèle dans la couche d'alimentation est négligeable. Ces deux conditions permettent une étude des propriétés de magnétotransport du seul système 2D, facilitant ainsi le travail d'analyse théorique et le dépouillement expérimental.

Après avoir présenté la méthode d'analyse associée à la géométrie de Van der Pauw des échantillons de mesure et le montage expérimental utilisé, nous exposons les résultats expérimentaux obtenus sur des structures références, déformées et plastiquement relaxées.



$$R_{IJKL} = \frac{V_{KL}}{I_{IJ}} = \frac{V_K - V_L}{I_{IJ}}$$

**Figure III.1** - (a) Géométrie de Van Der Pauw.  
(b) Définition des résistances  $R_{IJKL}$ .

### III.1 - Choix de la géométrie de Van der Pauw

Si la géométrie en croix de Lorraine (cf. figure I.10) est bien adaptée à l'observation des comportements quantiques dans un matériau isotrope, son utilisation dans un cas anisotrope oblige, pour déterminer l'ensemble des termes du tenseur de résistivité, à travailler sur deux échantillons distincts, orientés respectivement parallèlement et perpendiculairement aux axes propres du système.

Compte tenu de la nature de nos échantillons:

- lamelles de flexion dont la sous-structure de défauts linéaires est difficilement reproductible,
- échantillons avec dislocations de désadaptation de réseau, découpés dans des plaquettes de croissance dont la relaxation plastique peut varier d'un endroit à l'autre,

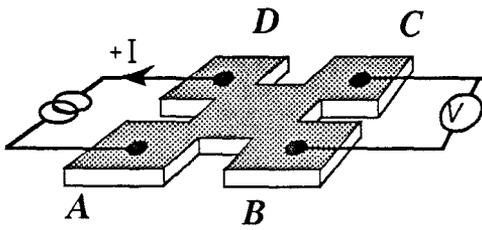
il nous a semblé préférable de choisir une géométrie d'échantillons électriques nous permettant la réalisation de l'ensemble des mesures de transport (conductivité électronique mesurée parallèlement et perpendiculairement aux défauts linéaires, et effet Hall) sur le même échantillon, c'est-à-dire pour la même distribution de centres diffuseurs.

La géométrie du trèfle à quatre feuilles de Van der Pauw (1958), présentée sur la figure III.1-a, remplit cette exigence. La méthode d'exploitation associée permet d'accéder aux résistivités longitudinales et de Hall de chaque échantillon étudié.

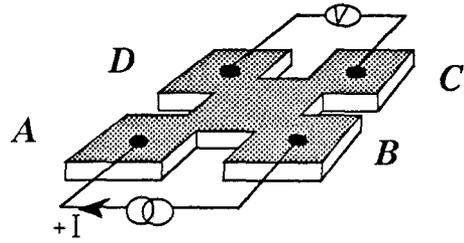
Il existe toutefois deux inconvénients liés à cette méthode:

- d'une part, contrairement à la géométrie classique en croix de Lorraine où les résistivités sont directement déduites des mesures de courant et tension, la géométrie de Van der Pauw ne nous permet pas d'accéder directement aux grandeurs recherchées. Nous présentons dans ce qui suit une procédure de déconvolution basée sur les travaux de Price (1973).

- d'autre part, la méthode de dépouillement de la résistivité n'a été développée que pour des mesures sans champ magnétique. Nous justifions la validité de ce type de dépouillement en présence d'un champ magnétique.



$$R_{ADBC} = \frac{V_{DC}}{I_{AD}}$$



$$R_{ABDC} = \frac{V_{DC}}{I_{AB}}$$

Figure III.2 - Résistances de Van der Pauw

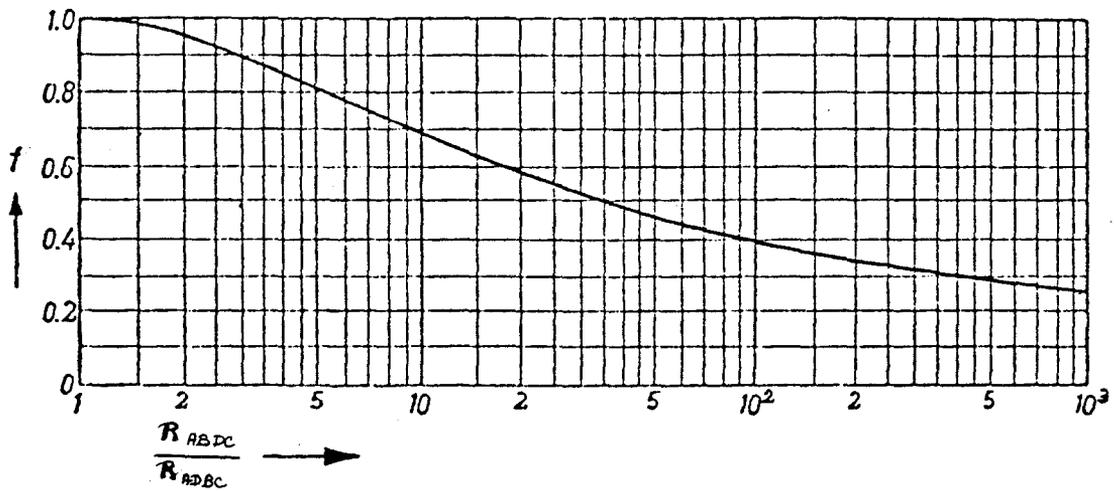


Figure III.3 - Fonction de Van der Pauw

### III.1.1 - Matériau isotrope

La méthode de Van der Pauw (VDP) permet d'accéder à la résistivité  $\rho$  d'un matériau isotrope à partir de la mesure de deux résistances 4 points (résistances de Van der Pauw) indépendamment de la forme de l'échantillon (figure III.1-b), pourvu que les contacts électriques soient ponctuels et situés à la périphérie de l'échantillon (Van der Pauw 1958). Soient I,J,K,L ces contacts, on notera  $R_{IJKL}$  le rapport de la tension  $V$  mesurée entre les contacts  $k$  et  $l$  au courant  $I$  injecté entre  $i$  et  $j$ . La géométrie en trèfles à quatre feuilles (figure. III.1-a), est proposée par Van der Pauw afin de s'affranchir des conditions sur les contacts électriques.

#### III.1.1.1 - Résistivité longitudinale

Van der Pauw a montré que, pour un échantillon possédant quatre contacts A,B,C,D (voir la figure III.2 pour les orientations), la résistivité du matériau et les résistances  $R_{ABDC}$  et  $R_{ADBC}$  satisfont à la relation:

$$e^{\pi R_{ABDC} d/\rho} + e^{-\pi R_{ADBC} d/\rho} = 1$$

où  $d$  est l'épaisseur de l'échantillon;  $\rho/d$  est couramment appelée résistance carrée.

Pour un système bidimensionnel la relation est simplement:

$$e^{-\pi R_{ABDC}/\rho} + e^{-\pi R_{ADBC}/\rho} = 1 \quad (III.1)$$

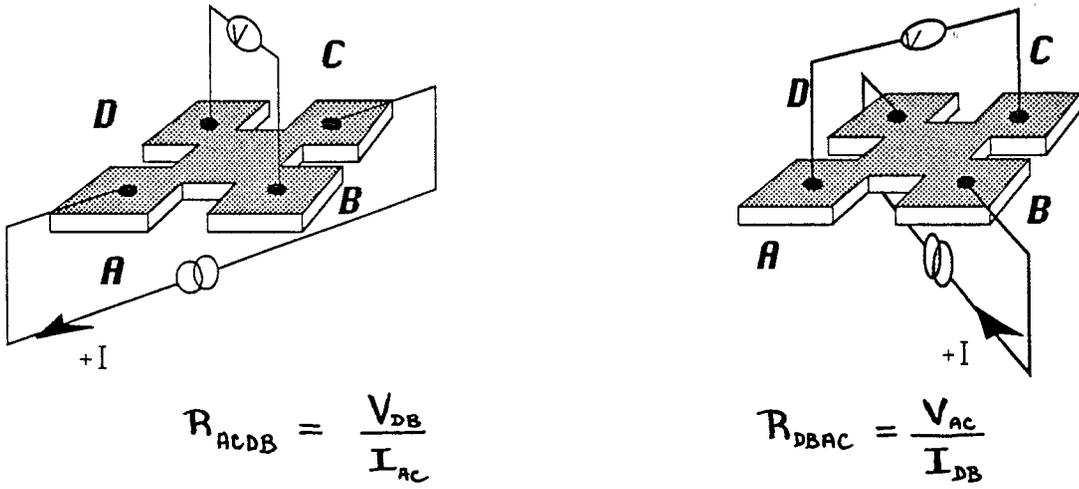
L'inversion de cette relation permet d'accéder à la résistivité:

$$\rho = \frac{\pi}{\ln 2} \frac{R_{ABDC} + R_{ADBC}}{2} f\left(\frac{R_{ABDC}}{R_{ADBC}}\right) \quad (III.2)$$

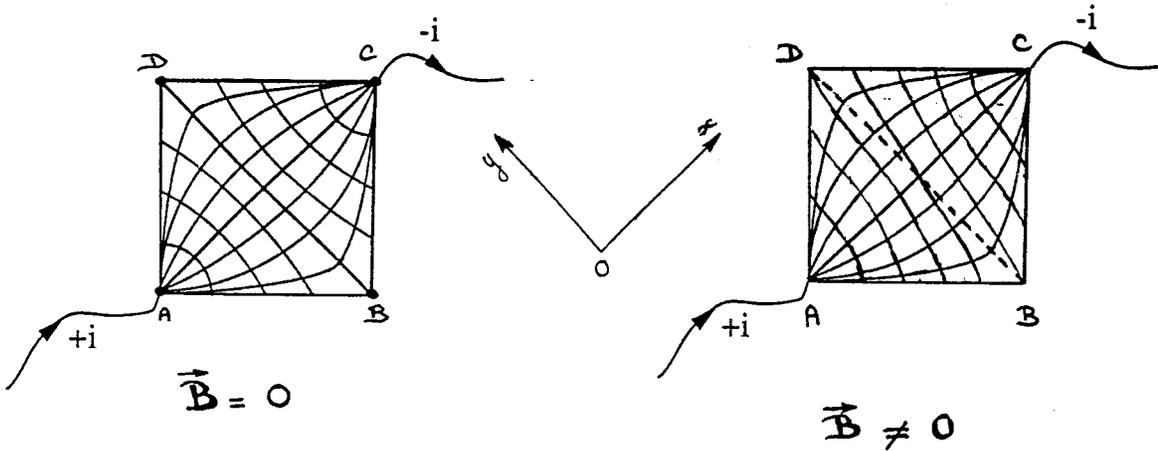
où  $f$  est la fonction non analytique de Van der Pauw. Cette fonction est représentée sur la figure III.3.

Il est bien évident que, pour un échantillon isotrope de forme parfaitement carrée, les deux résistances de Van der Pauw sont égales, ce qui conduit à:

$$\rho = \frac{\pi}{\ln 2} R_{ABDC}$$



*Figure III.4* - Résistances transverses



*Figure III.5* - Distribution des lignes de courant et des équipotentiels dans un matériau isotrope lors d'une mesure d'effet Hall.

Dans le cas contraire, anisotropie de résistivité ou géométrie particulière des échantillons, la détermination de la résistivité  $\rho$  peut également se faire numériquement en utilisant la méthode d'analyse numérique de Newton. Cette possibilité est intéressante lorsque le nombre des données à dépouiller est important, ce qui est le cas lorsqu'on étudie l'évolution en fonction du champ magnétique des résistances de Van der Pauw d'échantillons anisotropes.

### III.1.1.2 - Composante de Hall

Dans des échantillons en forme de trèfles parfaits, les deux résistances transverses  $R_{ACDB}$  et  $R_{DBAC}$  (figure III.4,  $R_{ACDB} = V_{DB} / I_{AC}$ ), sont bien évidemment nulles à champ magnétique nul.

L'application d'un champ magnétique induit une composante de Hall  $\rho_{xy}$  transverse antisymétrique. La densité de courant et le champ électrique ne sont plus colinéaires et la relation  $E = \rho \cdot j$  s'écrit dans un système d'axes quelconques Oxy:

$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_x \\ j_y \end{bmatrix}$$

Pour un courant injecté suivant une diagonale AC du trèfle (figure III.5), la différence de potentiel aux bornes de l'autre diagonale (DB) est donnée par:

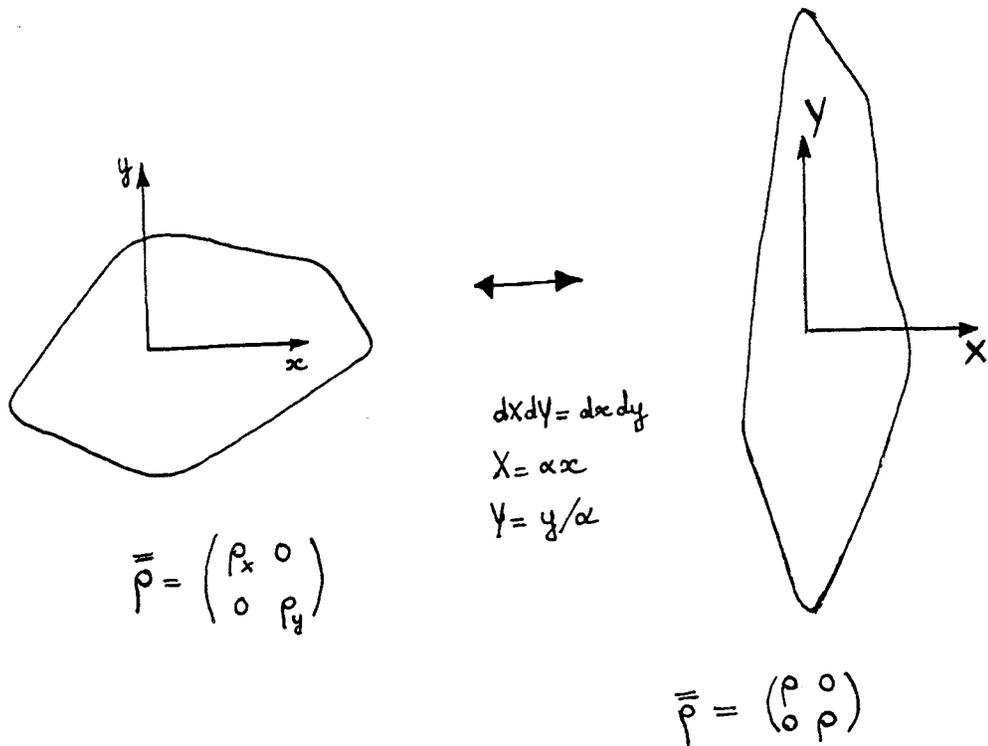
$$V_{DB} = - \int_{BD} E \cdot dl = - \int_{BD} \rho_{yx} j_x dy - \int_{BD} \rho_y j_y dy$$

Si Ox et Oy sont orientés suivant les deux diagonales AC et DB, le second terme vaut zéro puisque la composante  $j_y$  est nulle en tout point du chemin d'intégration DB. Le premier terme est égal à  $-\rho_{yx}I$  où I est l'intensité du courant traversant l'échantillon. Ainsi, les deux résistances transverses donnent directement la mesure des résistivités de Hall:

$$\begin{aligned} R_{ACDB} &= -\rho_{yx} = \rho_{xy} \\ R_{DBAC} &= -\rho_{xy} \end{aligned} \quad (III.3)$$

Ceci permet - dans le régime de transport à bas champ magnétique - d'accéder directement à la densité de porteur libre  $n_s$  (hypothèse d'un système 2D unique et d'un seul type de porteurs libres):

$$\rho_{xy} = -B/n_s e$$



**Figure III.6** - Principe de l'équivalence entre un système anisotrope et un système isotrope par changement de métrique.

(où B est la valeur algébrique du champ).

Il faut noter que pour un matériau isotrope, le tenseur de résistivité est conservé dans tout changement d'axes et en particulier pour un système d'axes Oxy où les axes sont parallèles aux côtés AB et AC du carré. Cette remarque prendra tout son sens lorsque nous traiterons le cas du matériau anisotrope, au paragraphe suivant.

### III.1.2 - Méthode d'exploitation pour un matériau anisotrope

Dans le cas général d'un matériau anisotrope, la résistivité (à B=0) du matériau est définie par un tenseur diagonal:

$$\begin{bmatrix} \rho_{xx} & 0 \\ 0 & \rho_{yy} \end{bmatrix}$$

Un changement de métrique approprié permet de ramener le cas du matériau anisotrope, défini par les deux résistivités  $\rho_{xx}$  et  $\rho_{yy}$ , (que nous noterons dans la suite:  $\rho_x = \rho_{xx}$  et  $\rho_y = \rho_{yy}$ ) au cas d'un matériau isotrope de résistivité  $\rho$  (fonction de  $\rho_x$  et de  $\rho_y$ ), auquel on pourra appliquer la méthode de Van der Pauw (figure IV.6).

Pour un courant électrique I imposé, la distribution du vecteur densité de courant  $j$  est complètement déterminée. La distribution du potentiel électrique se déduit à partir de la relation:

$$\text{grad}(V) = -E = -\rho j$$

Le principe de conservation du courant nous permet d'écrire  $\text{div } j = -\partial q / \partial t$  (en régime statique  $\partial q / \partial t = 0$ ) c'est à dire:

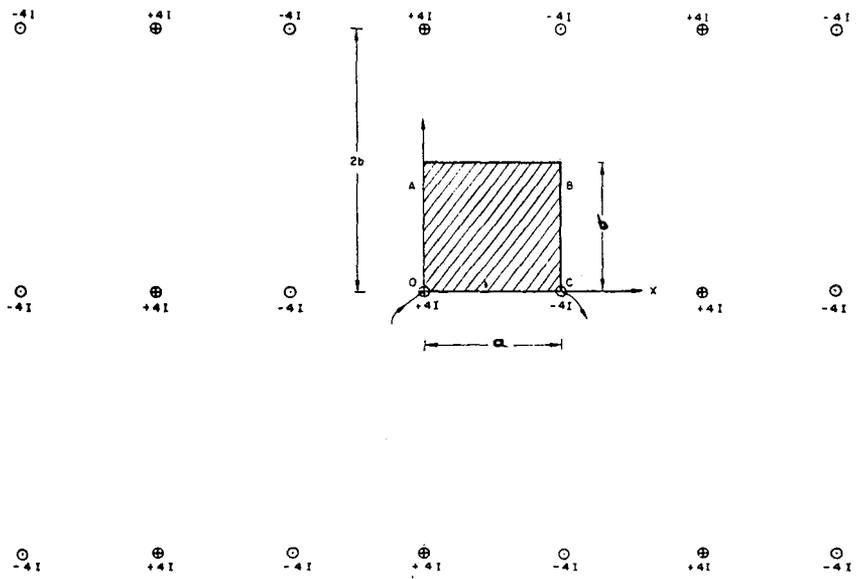
$$\frac{1}{\rho_x} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho_y} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = + \frac{\partial q}{\partial t} \quad (\text{III.4})$$

En opérant le changement de métrique:

$$X = \alpha x \text{ et } Y = \beta y$$

et en remarquant que la nouvelle métrique ne pourra décrire le même système que si la surface totale de l'échantillon est conservée:

$$dX.dY = dx.dy$$



**Figure III.7** - Système "image" équivalent à un échantillon rectangulaire  $a \cdot b$ .

on constate que la relation (III.4) est équivalente à celle obtenue pour un système isotrope:

$$\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right) = + \frac{\partial q}{\partial t}$$

à condition de poser:

$$\alpha = \frac{1}{\beta} = \left( \frac{\rho_x}{\rho_y} \right)^{1/4} \quad (\text{III.5})$$

et de prendre:

$$\rho = \sqrt{\rho_x \rho_y}$$

L'idée de la démarche que nous présentons ci-dessus fut proposée par Price (1972) dans le cas particulier  $B=0$ . Mais Price commençait son analyse avec le tenseur de conductivité et aboutissait donc à un résultat liant les conductivités du système anisotrope à celle de son équivalent isotrope:  $\sigma = \sqrt{\sigma_x \sigma_y}$ . Contrairement à Price, notre démarche correspond à une situation expérimentale où c'est le courant  $j$  qui est imposé. Elle mène ainsi directement à la condition  $\rho = \sqrt{\rho_x \rho_y}$  et non pas à une condition sur les conductivités. Cette nuance est importante: elle nous permet, dans le prochain paragraphe, de montrer que la condition  $\rho = \sqrt{\rho_x \rho_y}$  reste identique même en présence d'un champ magnétique; ce qui ne peut pas être démontré par la démarche de Price.

Ainsi, la relation de Van der Paw (III.1) devient pour un matériau anisotrope:

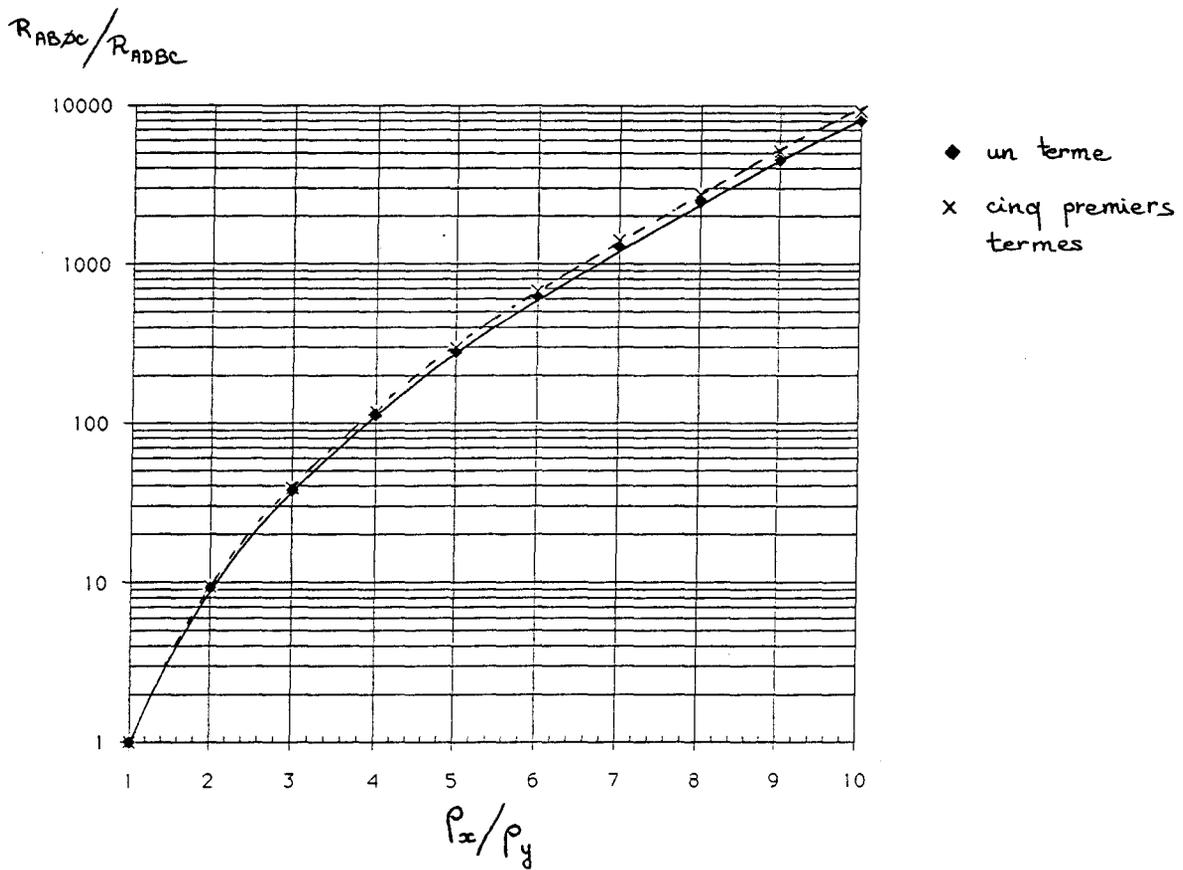
$$\exp(-\pi R_{ABDC} / \sqrt{\rho_x \rho_y}) + \exp(-\pi R_{ABDC} / \sqrt{\rho_x \rho_y}) = 1 \quad (\text{III.6})$$

et permet d'accéder à  $\sqrt{\rho_x \rho_y}$ .

Bien sûr, la seule relation ci dessus ne suffit plus à la détermination séparée de chaque composante  $\rho_x$  et  $\rho_y$  du tenseur de résistivité .

Dans un second article, Price (1973) détermine la distribution des potentiels dans un échantillon *rectangulaire a\*b anisotrope orienté suivant les axes propres*, dans lequel un courant  $I$  est injecté par deux coins adjacents.

En utilisant la méthode des images, il détermine la distribution du potentiel de cet échantillon rectangulaire en calculant celle d'un échantillon infini constitué de répliques de l'échantillon initial disposés de façon symétrique (figure III.7). Il



**Figure III.8** - Evolution du rapport des deux resistances de Van Der Pauw en fonction du rapport des resistivités propres  $\rho_x / \rho_y$ .

montre alors que les expressions des résistances de Van der Pauw  $R_{ABDC}$  et  $R_{ADBC}$  se mettent sous forme de séries infinies rapidement convergentes et fonction des deux quantités  $\sqrt{\rho_x \rho_y}$  et  $\sqrt{\rho_x/\rho_y}$ :

$$\begin{aligned} R_{ABDC} &= -\frac{8}{\pi} \sqrt{\rho_x \rho_y} \sum_n^{\infty} \ln \left[ \tanh \left( \sqrt{\frac{\rho_y}{\rho_x}} \frac{b}{a} (2n+1) \frac{\pi}{2} \right) \right] \\ R_{ADBC} &= -\frac{8}{\pi} \sqrt{\rho_y \rho_x} \sum_n^{\infty} \ln \left[ \tanh \left( \sqrt{\frac{\rho_x}{\rho_y}} \frac{a}{b} (2n+1) \frac{\pi}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

Limitées au premier ordre, les relations  $R_{ABDC}$  et  $R_{ADBC}$  peuvent être inversées, ce qui permet d'exprimer simplement le rapport  $\sqrt{\rho_x/\rho_y}$  à partir de la mesure des résistances de Van der Pauw ( $a=b$ ):

$$\sqrt{\frac{\rho_y}{\rho_x}} = -\frac{1}{\pi} \ln \left[ \tanh \left( \frac{\pi R_{ABDC}}{16\sqrt{\rho_x \rho_y}} \right) \right]$$

et

$$\sqrt{\frac{\rho_x}{\rho_y}} = -\frac{1}{\pi} \ln \left[ \tanh \left( \frac{\pi R_{ADBC}}{16\sqrt{\rho_x \rho_y}} \right) \right] \quad (\text{III.8})$$

Le produit de ces deux quantités, calculées chacune à partir d'une des résistances de Van der Pauw, doit être voisin de 1. Si le rapport des résistances de Van der Pauw est très grand, l'une des séries (III.7) converge moins vite que la seconde. On ne peut plus utiliser la relation inversée correspondante. Cependant la relation (III.8) contenant la plus grande des résistances de Van der Pauw sera toujours valable.

Le graphe III.8 représente le rapport des résistances de Van der Pauw (relations (III.7)) en fonction du rapport des résistivités, lorsque le premier terme est pris seul en compte et lorsque les cinq premiers termes sont considérés. A un rapport de résistances de VDP important, correspond en réalité un rapport d'anisotropie  $\rho_x/\rho_y$  moyen.

D'autres travaux traitant de la détermination du rapport d'anisotropie à partir du rapport de résistances de Van der Pauw ont été proposées dans la littérature. On citera, par exemple, les études antérieures à celles de Price, proposées par Wasscher (1969) ou Montgomery (1971); l'étude de Montgomery ayant été récemment employée dans le cas de systèmes 2D par Radulescu (1988). En fait les

trois modèles cités mènent à des ordres de grandeur voisins, du moins pour des anisotropies raisonnables. Nous avons utilisé la méthode de Price car elle nous a semblé la plus convaincante dans sa formulation; les deux autres modèles se fondent, en effet, sur un changement de métrique erroné.

La connaissance conjointe de  $\sqrt{\rho_x \rho_y}$  et de  $\sqrt{\rho_x/\rho_y}$  par deux méthodes indépendantes (Van Der Pauw et Price) permet d'accéder aux deux résistivités propres:

$$\begin{aligned}\rho_x &= \sqrt{\rho_x \rho_y} \cdot \sqrt{\frac{\rho_x}{\rho_y}} \\ \rho_y &= \sqrt{\rho_x \rho_y} \cdot \sqrt{\frac{\rho_y}{\rho_x}}\end{aligned}\quad (\text{III.9})$$

### III.1.3 - Dépouillement en présence d'un champ magnétique

Considérons maintenant un trèfle de Van der Pauw soumis à un champ magnétique  $B$  statique. La méthode de dépouillement de Van der Pauw -Price est-elle toujours valable? En présence d'un champ  $B$  normal au système 2D, il apparaît des termes antisymétriques de Hall hors diagonale dans le tenseur de résistivité. Chacune des composantes du tenseur résistivité devient une fonction plus ou moins complexe de  $B$  (effet Shubnikov de Haas et effet Hall quantique).

Deux questions se posent alors:

- les résistances de Van der Pauw dépendent-elles à présent des composantes  $\rho_{xy}$  ?
- le changement de métrique est-il toujours applicable dans les mêmes conditions?

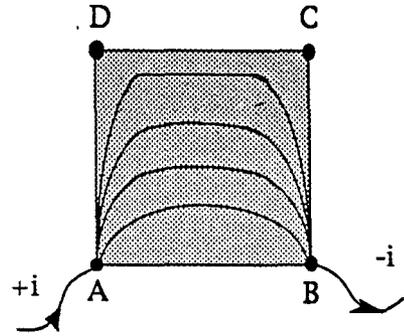
La réponse à la première question est immédiate:

$$R_{ABDC} = \frac{1}{I} \int_{DC} \rho_{xx} j_x dx + \frac{1}{I} \int_{DC} \rho_{xy} j_y dx$$

La composante  $j_y$  de la densité de courant est évidemment nulle en tout point du chemin d'intégration DC (figure III.9). D'où:

$$R_{ABDC} = \frac{\rho_{xx}}{I} \int_{DC} j_x dx$$

**Figure III.9** - Distribution des lignes de courant dans un matériau lors d'une mesure d'une résistances de Van Der Pauw



Cette résistance est totalement indépendante de  $\rho_{xy}$ : elle est exactement de la même forme que son homologue à champ magnétique nul; la dépendance en B est implicitement contenue dans  $\rho_x$ . La valeur de l'intégrale n'est pas calculable sous cette forme. Une analyse du type de celle de Price nous permettrait de calculer  $R_{ADBC}$ , sans avoir à évaluer l'intégrale, pourvu que ce type d'analyse soit toujours valable à champ magnétique non nul.

Voyons plus en détail le second problème. Puisque B est statique la relation  $\text{div } j = 0$  ainsi que l'équation de Poisson restent toujours valables: l'application d'un champ magnétique ne perturbe pas la distribution des lignes de courant dans un échantillon de dimensions finies. Il ne fait que modifier la répartition des équipotentielles. Le potentiel en un point sera la somme de deux contributions: la première est liée à l'existence du courant et la seconde à l'accumulation, due au champ B, d'une certaine quantité de porteurs sur les bords de l'échantillon.

On peut noter, dans les axes principaux Oxy:

$$E_x = E_{xD} + E_{xH} = \rho_{x(B)} j_x + \rho_{xy(B)} j_y = \frac{\partial V_D}{\partial x} + \frac{\partial V_H}{\partial y}$$

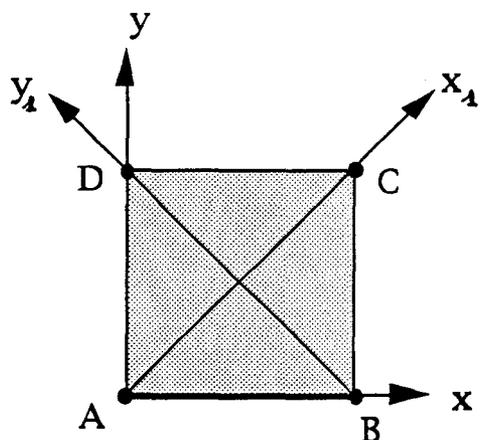
et

$$E_y = E_{yH} + E_{yD} = -\rho_{xy(B)} j_x + \rho_{y(B)} j_y = -\frac{\partial V_H}{\partial x} + \frac{\partial V_D}{\partial y}$$

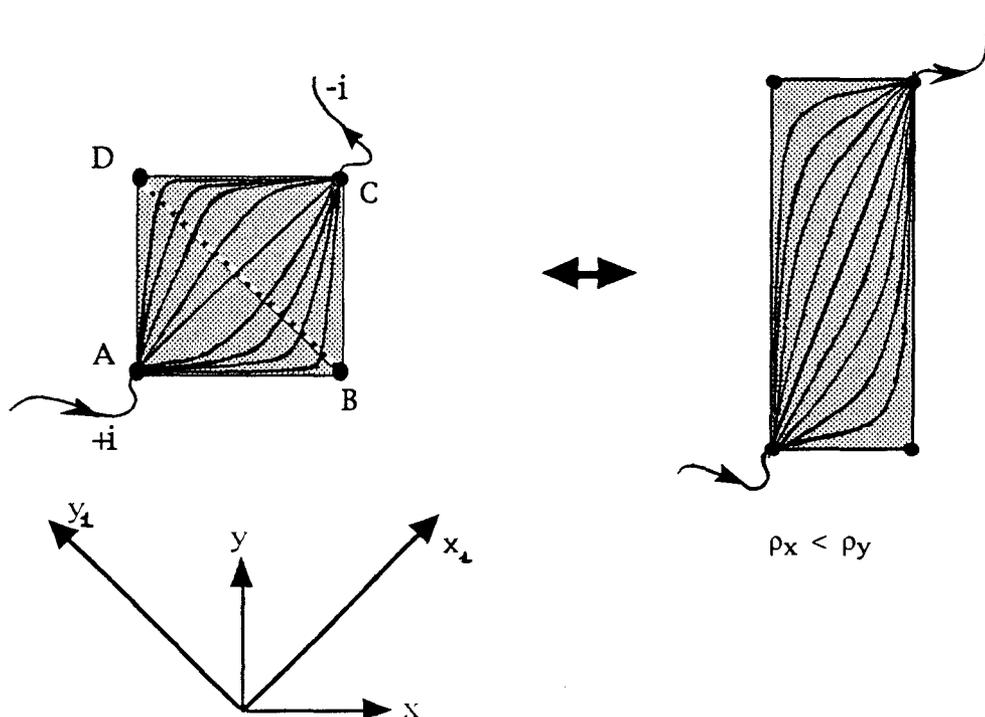
où la composante due au courant est indiquée D (comme dissipatif) et la composante antisymétrique transverse est indiquée H (comme composante de Hall).

La relation  $\text{div } j$  devient:

$$\frac{1}{\rho_x} \frac{\partial^2 V_D}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho_y} \frac{\partial^2 V_D}{\partial y^2} = 0$$



**Figure III.10** - Repères (Oxy) et (Ox<sub>1</sub>y<sub>1</sub>).



**Figure III.11** - Distribution des lignes de courant dans un matériau anisotrope lors d'une mesure de la résistance transverse  $R_{ACDB}(B)$ .  
Cas représenté:  $\rho_x < \rho_y$ .

et conduit exactement à la même relation (III.4) que celle trouvée pour B=0. On constate que la composante de Hall s'élimine et n'apporte donc aucune condition supplémentaire sur le changement de métrique (III.5). Le système isotrope équivalent continue ainsi à être caractérisé par une résistivité

$$\rho(B) = \sqrt{\rho_x(B) \rho_y(B)}$$

On peut donc appliquer d'une part la relation de Van der Pauw (évaluation de  $\sqrt{\rho_x(B) \rho_y(B)}$ ) et d'autre part celles de Price (évaluation de  $\sqrt{\rho_x(B)/\rho_y(B)}$ ) pour déterminer les composantes propres  $\rho_x$  et  $\rho_y$  à partir des relations (III.9).

### III.1.4 - Résistances transverses $R_{ACDB}$ et $R_{DBAC}$

En ce qui concerne les résistances transverses  $R_{ACDB}$  et  $R_{DBAC}$ , elles ne sont plus simplement définies par la résistivité de Hall  $\rho_{xy}$  (cf. relation III.3). La mesure se faisant suivant des axes  $(Ox_1, Oy_1)$  tournés de  $45^\circ$  par rapport au repère propre (figure III.10), il apparaît des termes supplémentaires. Après changement d'axes approprié, le tenseur de résistivité est donné par:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{x_1} & \rho_{x_1 y_1} \\ \rho_{y_1 x_1} & \rho_{y_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\rho_y + \rho_x) & \rho_{xy} + \frac{1}{2}(\rho_y - \rho_x) \\ -\rho_{xy} + \frac{1}{2}(\rho_y - \rho_x) & \frac{1}{2}(\rho_y + \rho_x) \end{bmatrix} \quad (III.10)$$

L'expression de  $R_{ACDB}$ , vérifie:

$$R_{ACDB} = -\frac{1}{I} \int_{BD} \rho_{y_1 x_1} j_{x_1} dy_1 - \frac{1}{I} \int_{BD} \rho_{y_1} j_{y_1} dy_1$$

Soit

$$R_{ACDB} = \rho_{xy} - \frac{1}{2}(\rho_y - \rho_x) - \frac{1}{2}(\rho_y + \rho_x) \frac{1}{I} \int_{BD} j_{y_1} dy_1 \quad (III.11)$$

La seconde résistance transverse vérifie quant à elle:

$$R_{DBAC} = -\rho_{xy} - \frac{1}{2}(\rho_y - \rho_x) - \frac{1}{2}(\rho_y + \rho_x) \frac{1}{I} \int_{CA} j_{x_1} dx_1$$

Dans le cas d'un matériau anisotrope (que B soit nul ou pas), les lignes de courant ne croisent plus la diagonale (DB ou AC selon la mesure) à angle droit (figure III.11). Les intégrales apparaissant dans les relations précédentes n'ont

aucune raison d'être nulles (contrairement au cas isotrope) et il n'existe aucun moyen simple d'évaluer ces contributions géométriques analytiquement. Cependant, par raison de symétrie ces deux intégrales sont identiques.

Il vient donc:

$$R_{ACDB} = \rho_{xy} + R_{GEOM}$$

$$R_{DBAC} = -\rho_{xy} + R_{GEOM}$$

en posant:

$$R_{GEOM} = -\frac{1}{2}(\rho_y - \rho_x) - \frac{1}{2}(\rho_y + \rho_x) \frac{1}{l} \int_{CA} j_{x1} dx_1$$

Il est alors relativement simple de s'affranchir du problème posé par la résistance  $R_{GEOM}$ , en mesurant expérimentalement les deux résistances transverses et en les retranchant l'une à l'autre: la demi différence est alors exactement identique à la composante antisymétrique du tenseur résistivité:

$$\rho_{xy} = (R_{ACDB} - R_{DBAC})/2 \quad (III.12)$$

Il est également possible d'accéder à cette composante antisymétrique en effectuant deux mesures sur la même diagonale respectivement pour chacun des deux sens possibles du champ magnétique. Puisqu'un tel changement n'influe que sur la composante antisymétrique, la demi somme  $(R_{ACDB(+B)} - R_{ACDB(-B)})/2$  donne directement  $\rho_{xy}$ .

Il est, dans la pratique, utile de disposer de l'expression théorique de  $R_{GEOM}$  afin de pouvoir accéder à  $\rho_{xy}$  dans le cas particulier où la mesure de l'une des résistances transverses n'est pas accessible expérimentalement. Cette détermination théorique de la composante géométrique  $R_{GEOM}$  nécessite la recherche d'une méthode d'estimation autre que celle consistant à calculer les intégrales des relations (III.11). Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode des images, dans une démarche analogue à celle de Price (1973). Notre calcul conduit à une expression de  $R_{GEOM}$  sous la forme d'une série infinie, fonction des deux quantités  $\sqrt{\rho_x \rho_y}$  et  $\sqrt{\rho_x/\rho_y}$ :

$$R_{GEOM} = -\frac{4\sqrt{\rho_x \rho_y}}{\pi} \sum_n (-1)^n \ln \left[ \frac{\text{ch}\left(\frac{2\pi}{\alpha^2 + \alpha^{-2}}\right)(n + \frac{1}{2}) - \cos\left(\frac{\pi}{1 + \alpha^4}\right)(1 + 2n)}{\text{ch}\left(\frac{2\pi}{\alpha^2 + \alpha^{-2}}\right)(n + \frac{1}{2}) - \cos\left(\frac{\pi\alpha^4}{1 + \alpha^4}\right)(1 + 2n)} \right] \quad (III.13)$$

où  $\alpha$  est le coefficient de changement de métrique  $(\rho_x/\rho_y)^{1/4}$

La série converge moins rapidement que dans le cas du calcul des résistances de type Van der Pauw, mais le calcul des six ou sept premiers termes suffit en général. L'évolution de  $R_{\text{GEOM}}$  avec le champ  $B$  sera due à la dépendance implicite en  $B$  des composantes principales de résistivité  $\rho_x$  et  $\rho_y$ .

### Conclusion:

La mesure expérimentale des résistances  $R_{\text{ACDB}}(B)$ ,  $R_{\text{DBAC}}(B)$ ,  $R_{\text{ABDC}}(B)$  et  $R_{\text{ADCB}}(B)$  est a priori suffisante pour déterminer, individuellement et sans équivoque, toutes les composantes  $\rho_x$ ,  $\rho_y$  et  $\rho_{xy}$  du tenseur résistivité qu'il y ait un champ magnétique ou pas.

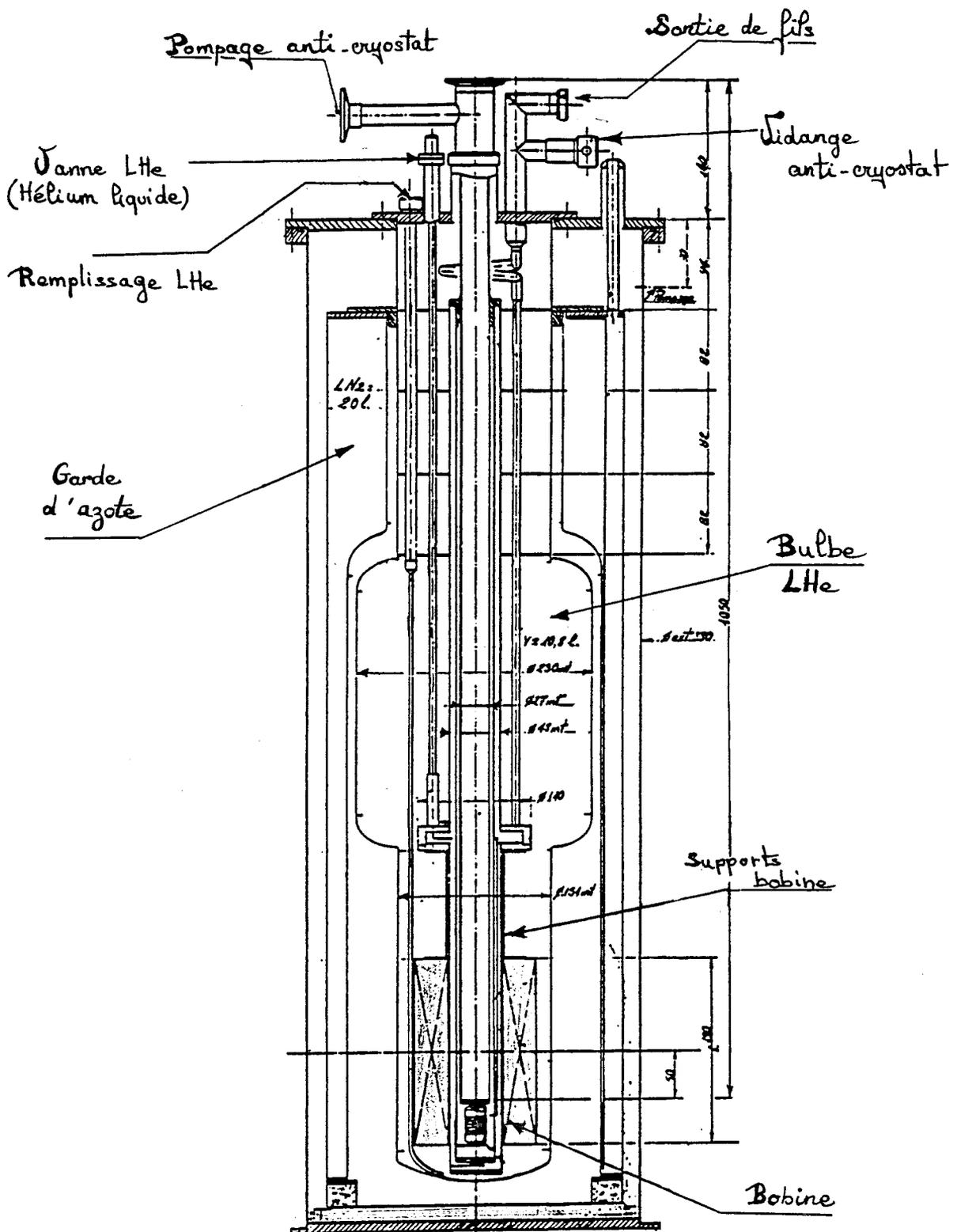


Figure III.12 - Schéma du montage cryomagnétique TBT.SMC

## III.2 - Dispositif de mesure

### III.2.1 - Banc de mesure

Les mesures de magnétotransport à basse température nécessitent un dispositif de mesure spécifique. Un banc de mesure cryomagnétique est fonctionnel au laboratoire depuis 1988.

Le dispositif comprend un cryostat de la marque TBT-SMC équipé d'une bobine supraconductrice en NbTi permettant d'obtenir des champs magnétiques continus pouvant atteindre 8 Teslas, et d'un anticryostat central à température variable de 1,6 K à 300 K, de diamètre utile 24 mm (figure III.12).

La bobine supraconductrice est immergée dans l'hélium liquide; elle est alimentée par une source de courant continu stabilisée de type HP 6260B, elle même pilotée par un programmeur de montée en courant de type AMI 401A. Le champ peut varier linéairement à une vitesse comprise entre 0 et  $0,164 \text{ A.s}^{-1}$ .

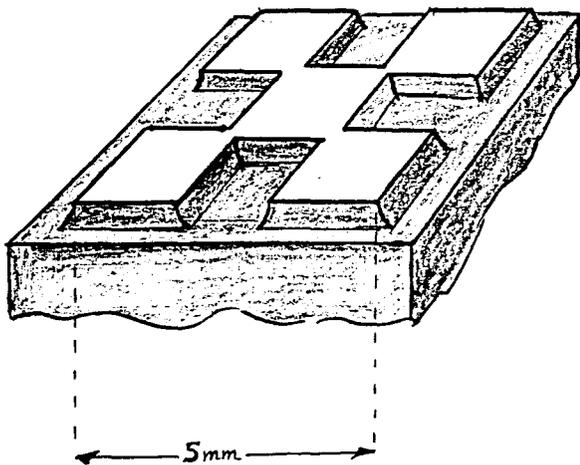
Deux cannes différentes sont utilisées pour placer les échantillons à mesurer au centre de la bobine: la première, conçue pour un seul échantillon, possède un support d'orientation variable par rapport à la direction du champ magnétique; la seconde, d'orientation fixe, permet le montage simultané de plusieurs échantillons.

La température à l'intérieur de la chambre de mesure peut varier entre 1,6K et la température ambiante, soit par pompage sur le bain d'hélium à travers une vanne aiguille en dessous de 4,2K, soit par régulation de la température d'un flux d'hélium gazeux au dessus de 4,2K. La mesure de la température au niveau de l'échantillon se fait à l'aide d'une sonde Carbon Glass (cgr1-100 Lake Shore Cryotronics, Inc) montée à l'extrémité de la canne.

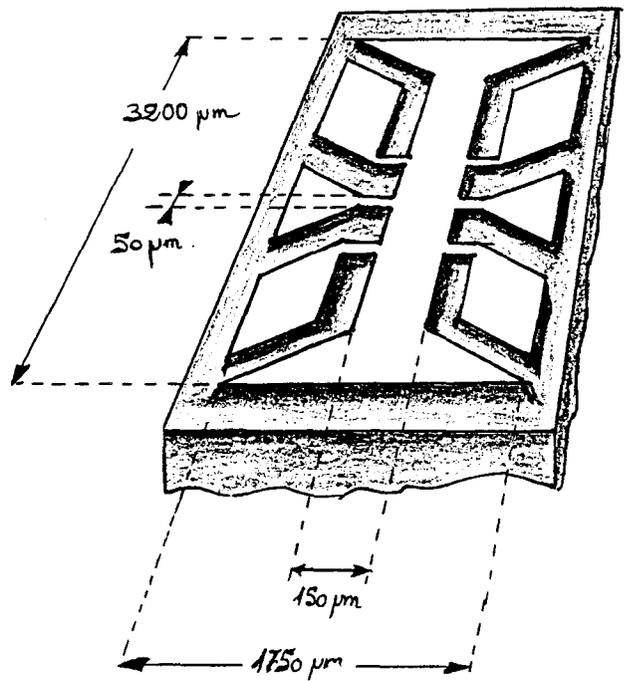
### III.2.2 - Préparation des échantillons

Les échantillons destinés aux mesures électriques sont réalisés à partir de plaquettes découpées par clivage, suivant les directions  $\langle 110 \rangle$ , dans les hétérostructures de référence ou contenant des défauts linéaires que nous avons présentées dans le précédent chapitre. Ils sont ensuite élaborés, le plus souvent sous forme de trèfles de Van der Pauw et dans quelques cas, sous forme de croix de Lorraine.

(a) Gréfle de  
Van der Pauw



(b) Croix de Lorraine



**Figure III.13** - Géométries des échantillons réalisées par photolithographie.

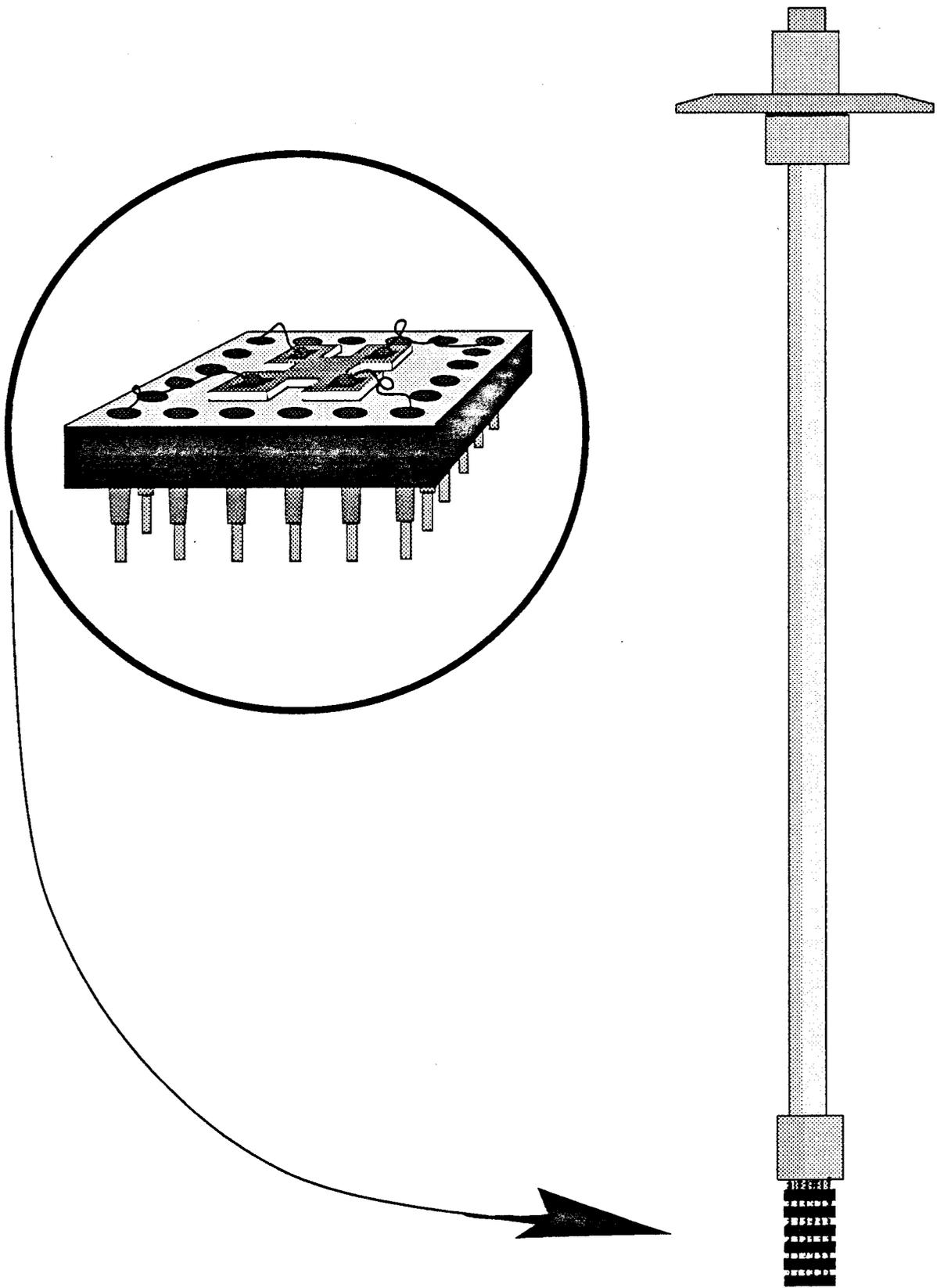
Les formes en trèfle de Van der Pauw et en croix de Lorraine (figure III.13) sont réalisées par photolithographie ("résinage", recuit, masquage, insolation, révélation, attaque méso). Les contacts ohmiques sont des métallisations Au/Ni/Ge, réalisées dans un bâti d'évaporation. Dans le cas de trèfles de Van der Pauw, des billes d'indium sont ensuite alliées à la structure pour permettre la reprise de contact vers les portes-échantillons (1 minute de recuit sous atmosphère réductrice  $H_2+N_2$  à  $450^\circ$ ). Pour les échantillons en forme de croix de Lorraine, le relais des contacts est assuré par des fils d'or soudés par thermocompression. Ces étapes technologiques ont été réalisées à la centrale de technologie de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord.

Si la technologie utilisée est bien maîtrisée pour la réalisation de composants électriques à partir de structures planaires, elle devient inadaptée pour la majorité des échantillons déformés en raison justement de leur non planéité.

Ceci explique, en partie, le taux d'échec élevé que nous avons eu en préparant les échantillons de mesures électriques, en particulier les croix de Lorraine réalisées sur des structures déformées. Dans ce dernier cas, la très petite taille du motif (figure III.13-b) rend les mesures électriques très dépendantes de la moindre hétérogénéité des hétérostructures introduite par déformation plastique (taille des canaux menant aux plots des contacts latéraux du même ordre de grandeur que la largeur de certaines bandes de glissement). De telles structures ont fréquemment conduites à un comportement erratique des mesures électriques.

Il faut également noter que la difficulté de faire des mesures de transport sur les échantillons déformés n'est pas uniquement liée à leur courbure: les sous-structures induites par la déformation plastique sont essentiellement hétérogènes et présentent des bandes de glissement qui peuvent correspondre à un cisaillement du cristal égal ou supérieur à la largeur du puits quantique (cf. §II.3). Pour étudier les propriétés de transport du gaz 2D, il importe donc que de telles bandes ne traverse pas le trèfle de Van der Pauw ou la croix de Lorraine; mais ces situations sont difficiles à éviter et là encore le taux de réussite pour la préparation des échantillons est faible.

Les échantillons sont enfin collés au vernis cryogénique sur des supports de microprocesseurs embrochables de marque Précidip et fixés à l'extrémité de la canne de mesure (figure III.14). Les connections entre l'échantillon et les fils d'amenée de courant ou de mesure de tension sont réalisées avec des fils de cuivre de petite section soudés à l'étain.



***Figure III.14*** - Montage des échantillons sur la canne de mesure.

Le générateur de courant pour les mesures électriques est un Keithley, modèle 224 permettant d'injecter des courants aussi faibles qu'une dizaine de nA, tandis que le voltmètre digital est un multimètre Keithley, modèle 195A à très haute impédance d'entrée relié à un micro-ordinateur au moyen d'un interface IEEE 488. L'acquisition des données sur fichier permet leur traitement numérique ultérieur.

Avant d'effectuer les mesures à basse température, nous avons testé pour chaque échantillon, à température ambiante et à 77K, la qualité des contacts ohmiques en vérifiant:

- que le sens du courant  $I$  injecté entre deux contacts ne change pas la valeur de la tension mesurée,
- que la caractéristique  $I(V)$  est linéaire, au moins dans un certain domaine de valeurs du courant,
- que sur les trèfles de Van der Pauw on a les égalités  $R_{ABDC}=R_{DCAB}$  et  $R_{ADBC}=R_{BCAD}$  et, pour les échantillons de référence,  $R_{BDAC}=R_{ACDB} = \rho_{xy}$ .

Nous avons pu constater que si ces différents points, et en particulier le troisième, n'étaient pas satisfaits, les mesures à basse température étaient inutiles, le comportement de l'échantillon étant en général non reproductible.

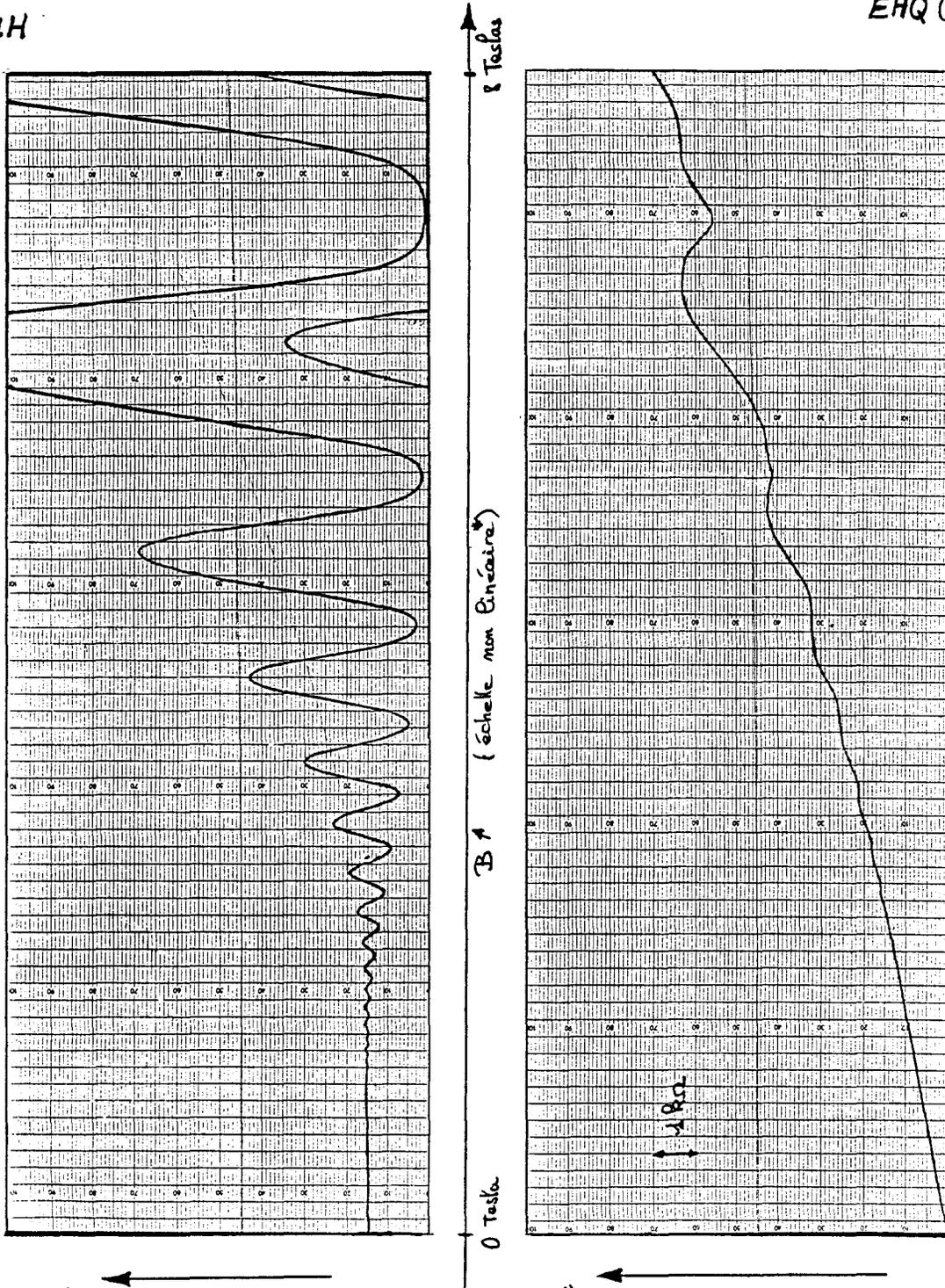
Nous avons effectué des mesures de Shubnikov-De Haas (mesure des résistances de Van der Pauw) et d'effet Hall quantique (mesure des résistances transverses) pour des champs variant de 0 à 8 Teslas à une température de 4,2 K. La vitesse de montée et de descente du courant d'alimentation de la bobine supraconductrice étant faible (0,15 A/s  $\Leftrightarrow$  0,93 T/min), le champ magnétique peut être considéré comme un champ statique au moment où s'effectue la mesure (échantillonnage toutes les 0,7 secondes). Le courant électrique  $I$  imposé est généralement compris entre 0,1 et 10  $\mu$ A.

# Figure 15 - Hétérostructure GaAlAs-GaAs

échantillon de référence

(a)  $SdH$

EHQ (b)



(\*) mesures réalisées avec un champ magnétique décroissant

### III.3 - Résultats expérimentaux

Compte tenu du caractère exploratoire de ce travail, un certain nombre d'échantillons n'ont finalement pas pu être étudié en transport pour les raisons évoquées plus hauts. Nous n'avons consigné ici que les *comportements typiques* observés sur les trois catégories d'échantillons étudiées: échantillons références, échantillons déformés et échantillons plastiquement relaxés. Nous présentons dans chacun des cas, les mesures de magnéto-transport de quelques échantillons représentatifs et en soulignons les caractéristiques; ces mesures ne possèdent cependant pas de caractère statistique.

Une exploration plus systématique (diversification des cas types observés: contrôle de la densité de défauts 1D, de leur nature (rugosité, dislocation  $\alpha$  ou  $\beta$ ) et test de reproductibilité) et plus complète devrait être effectuée lorsque les différentes techniques que nous avons employées seront optimisées.

#### III.3.1 - Données brutes

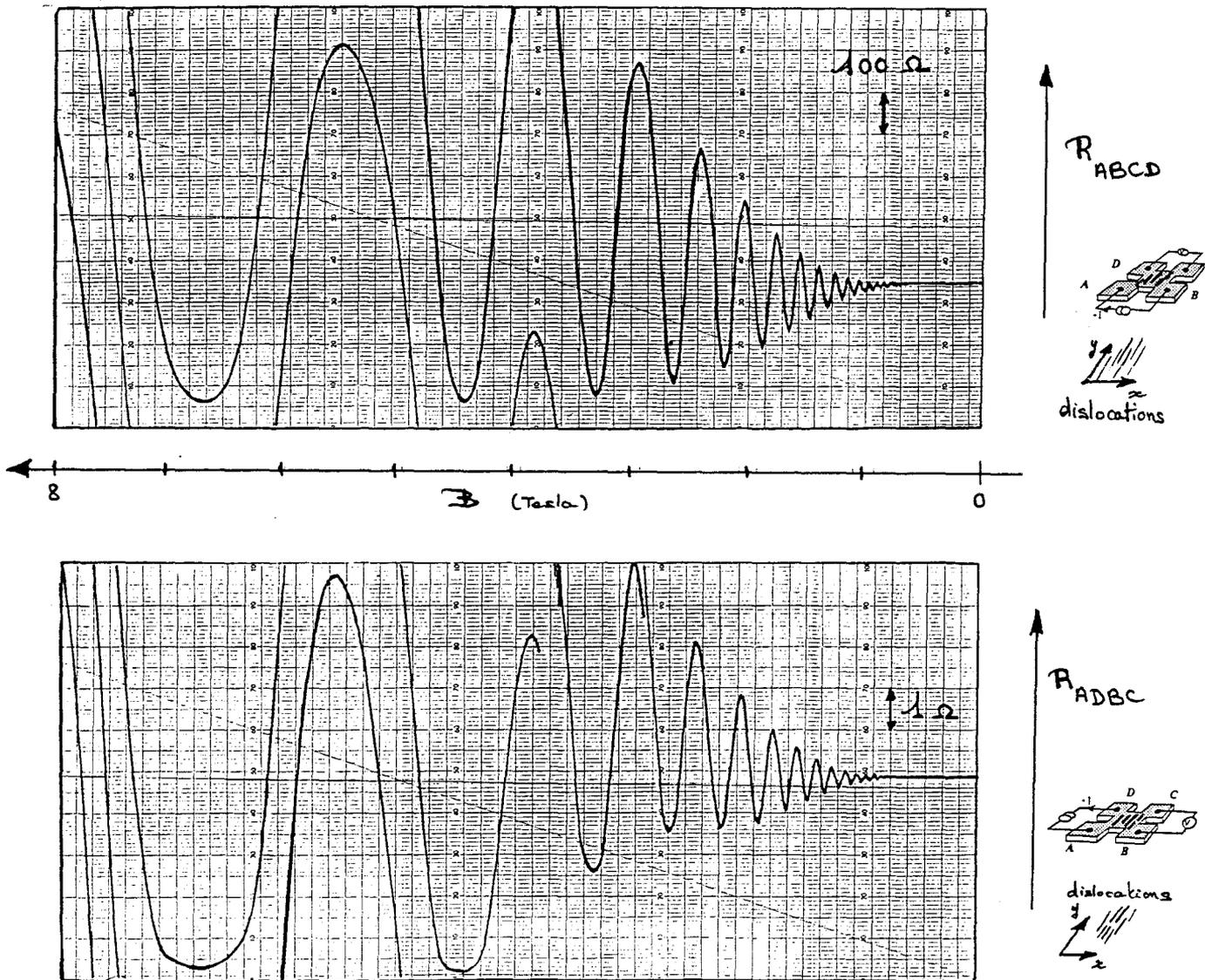
Les données brutes des mesures par la méthode de Van der Pauw, à savoir:  $R_{ABDC}(B)$  (et éventuellement  $R_{ADCB}(B)$  pour les échantillons déformés) ainsi que  $R_{ACDB}(B)$  (et éventuellement  $R_{DBAC}(B)$ ), obtenues sur cinq échantillons types sont représentées sur les figures III.15, III.16, III.17 et III.18. Elles correspondent aux cinq types de structures suivants (cf. II.1):

1 - Hétérostructure GaAlAs-GaAs de référence. (figure III.15)

2 - Hétérostructure GaAlAs-GaAs fléchie dans l'orientation "tension  $\alpha$ " et présentant une densité de dislocations relativement faible (de l'ordre de  $2.10^2 \text{ cm}^{-1}$ ) si on la compare à une structure pseudomorphique déformée. Les courbes présentées (figure III.16) correspondent à l'un des rares échantillons de cette catégorie pour lequel une modification notable des propriétés électriques est observée. La majorité des autres échantillons, possédant des densités de défauts voisines, a montré un comportement quasiment identique à celui des échantillons de référence. Nous attribuons cette disparité de comportements à des sous-structures de défauts linéaires différemment distribuées dans la structure.

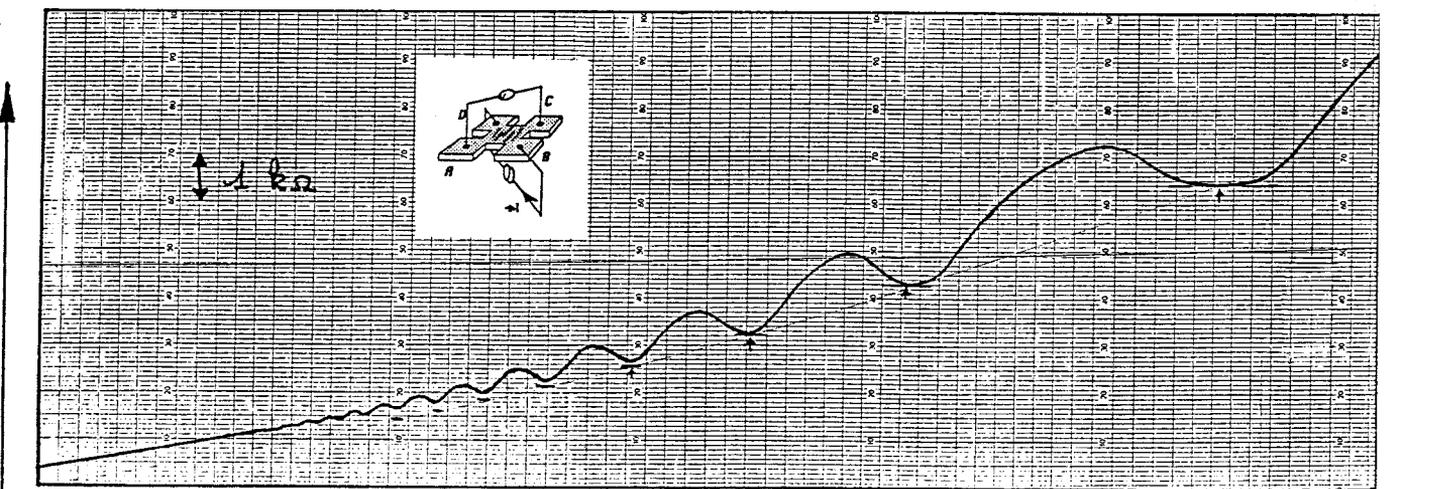
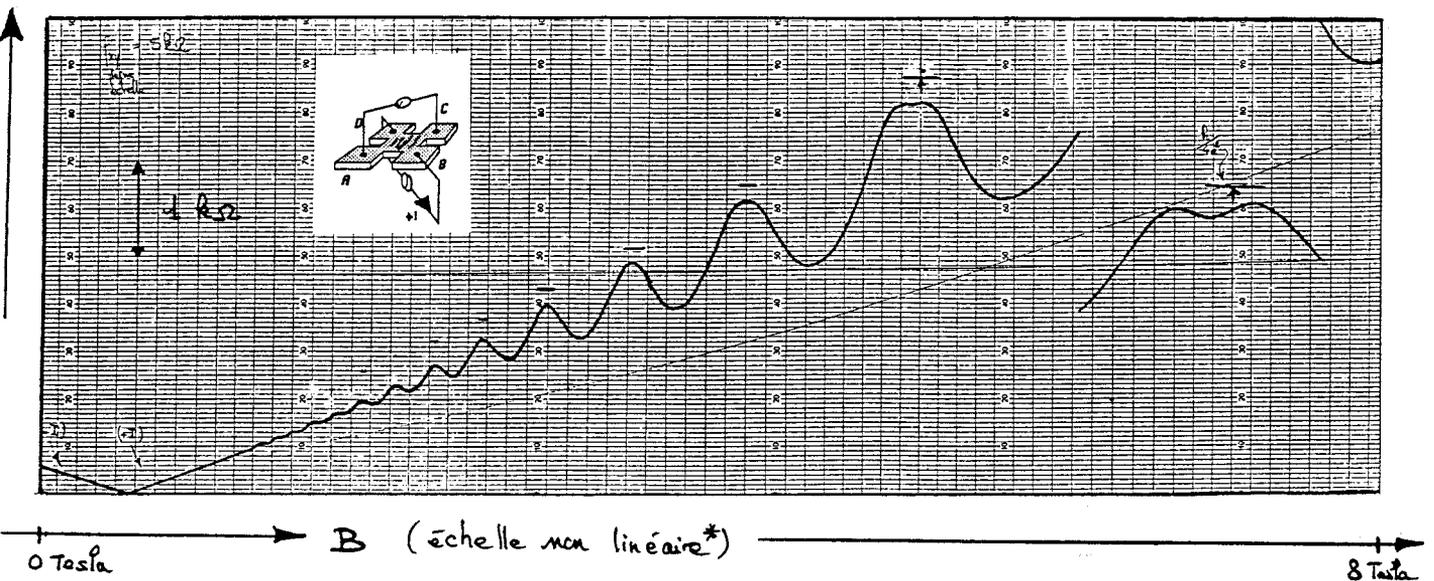
Figure 16 - Hétérostructure GaAlAs - GaAs déformée

a) Mesures des résistances de Van der Pauw



## b) Mesures des résistances transverses

BDAC

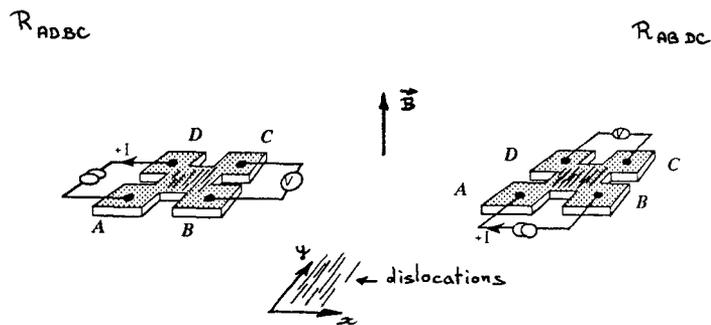
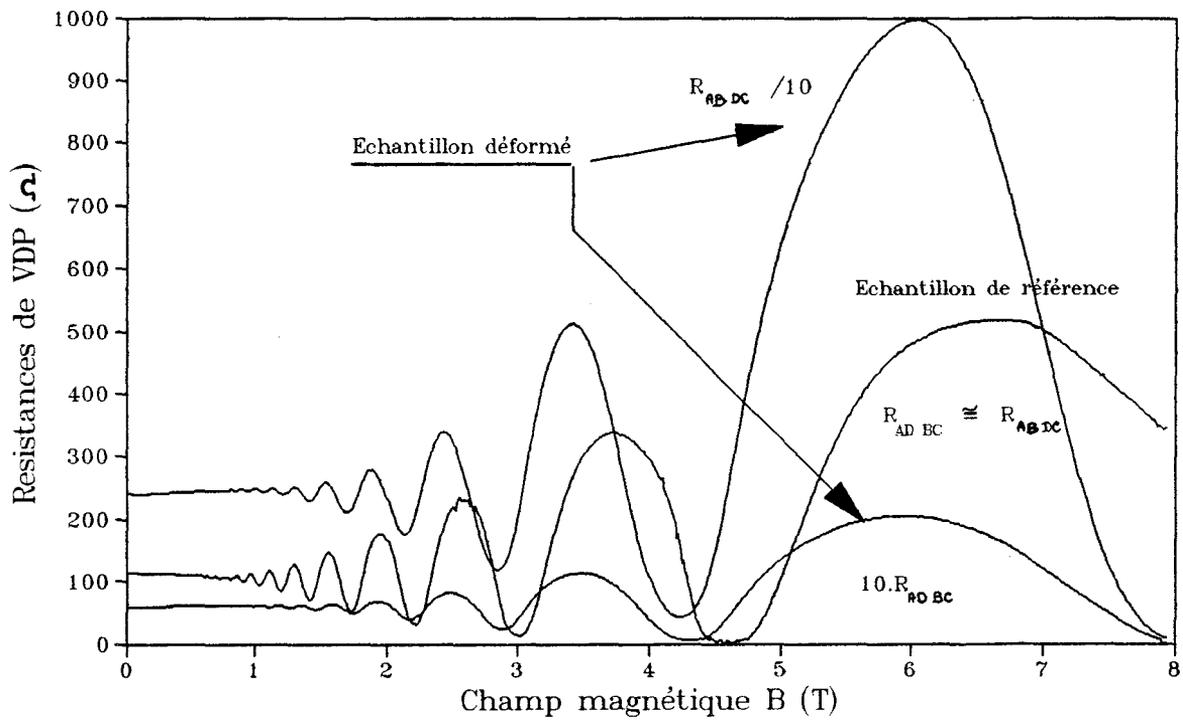


DBAC

(\* ) mesures réalisées avec un champ magnétique décroissant

Figure 17 – Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs

a) Mesures des résistances de Van Der Pauw



b) Mesures des résistances transverses

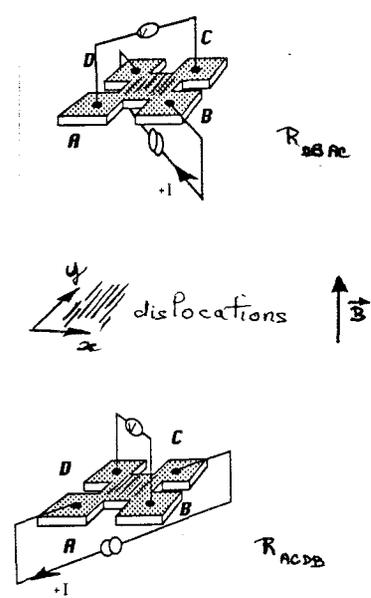
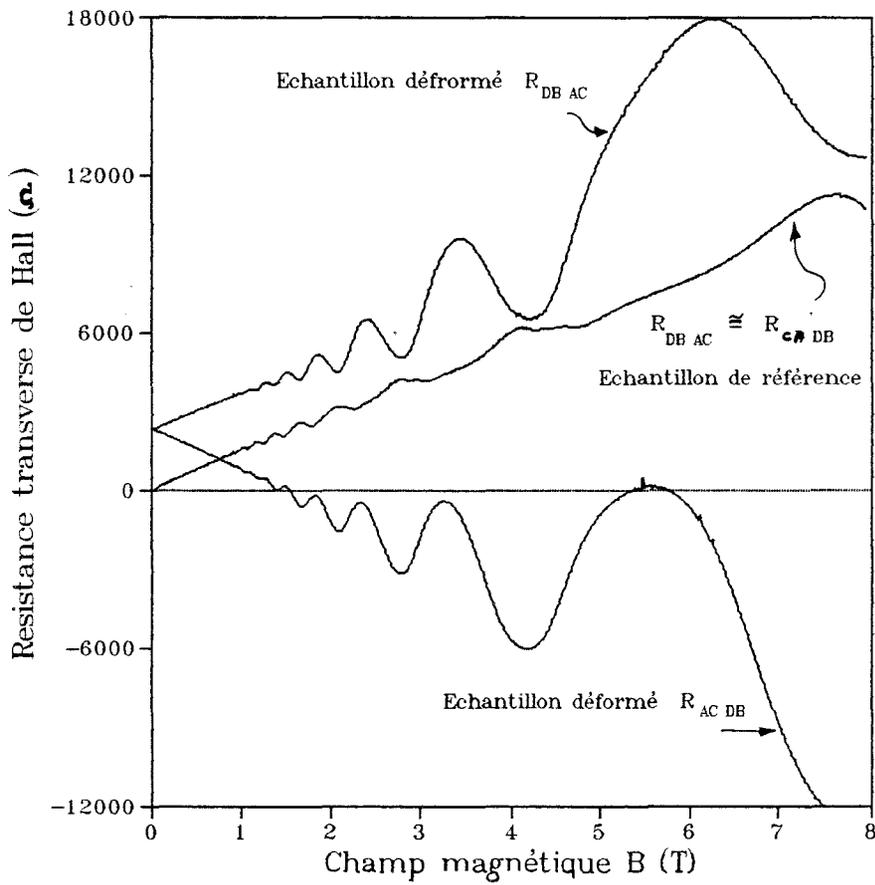
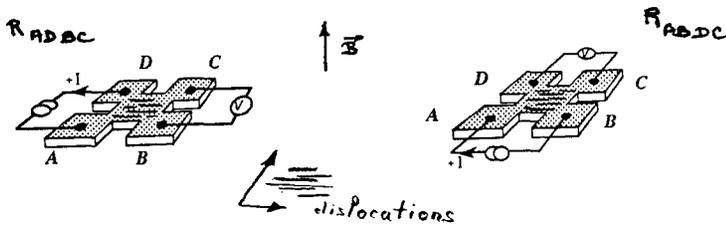
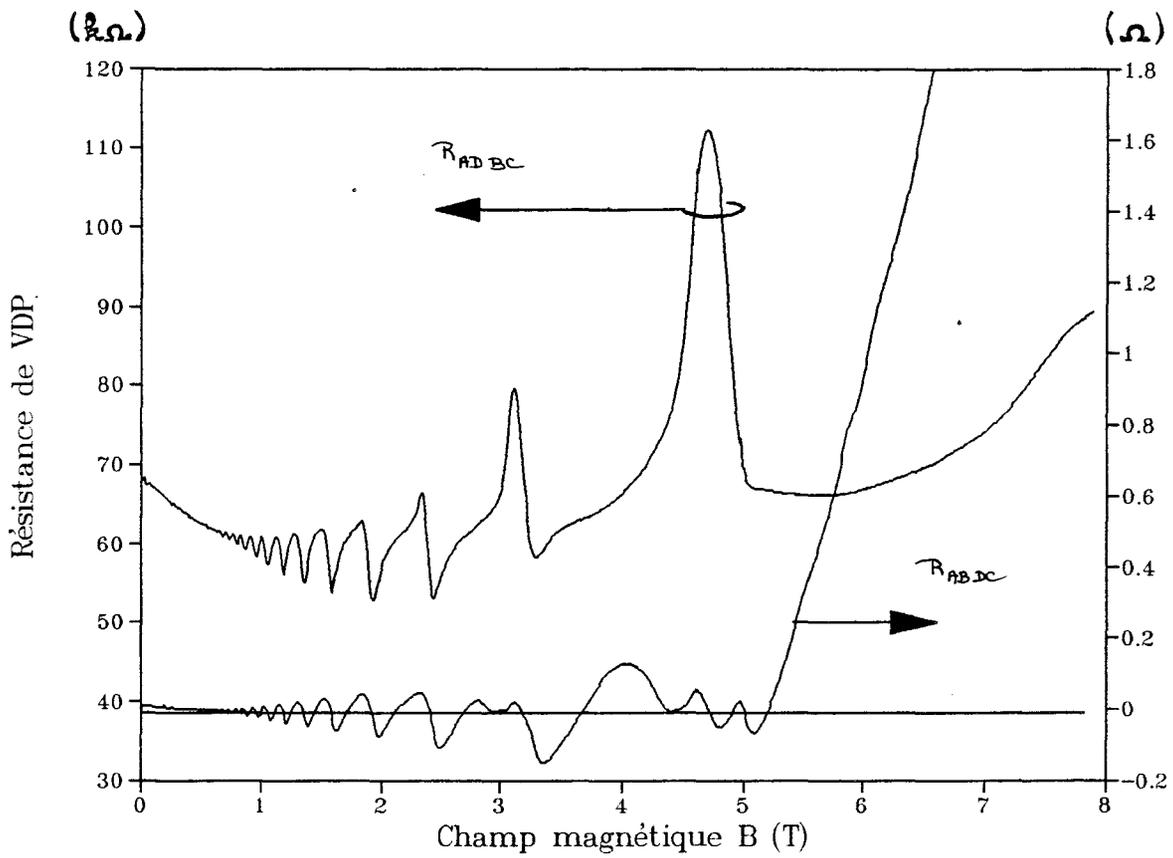
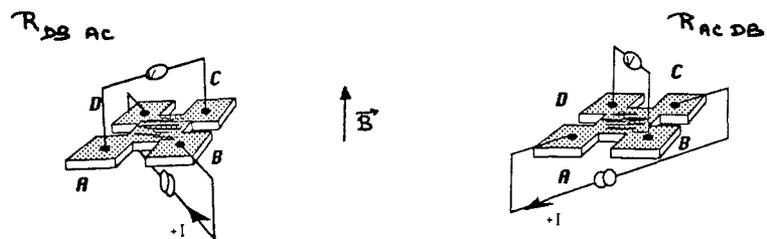
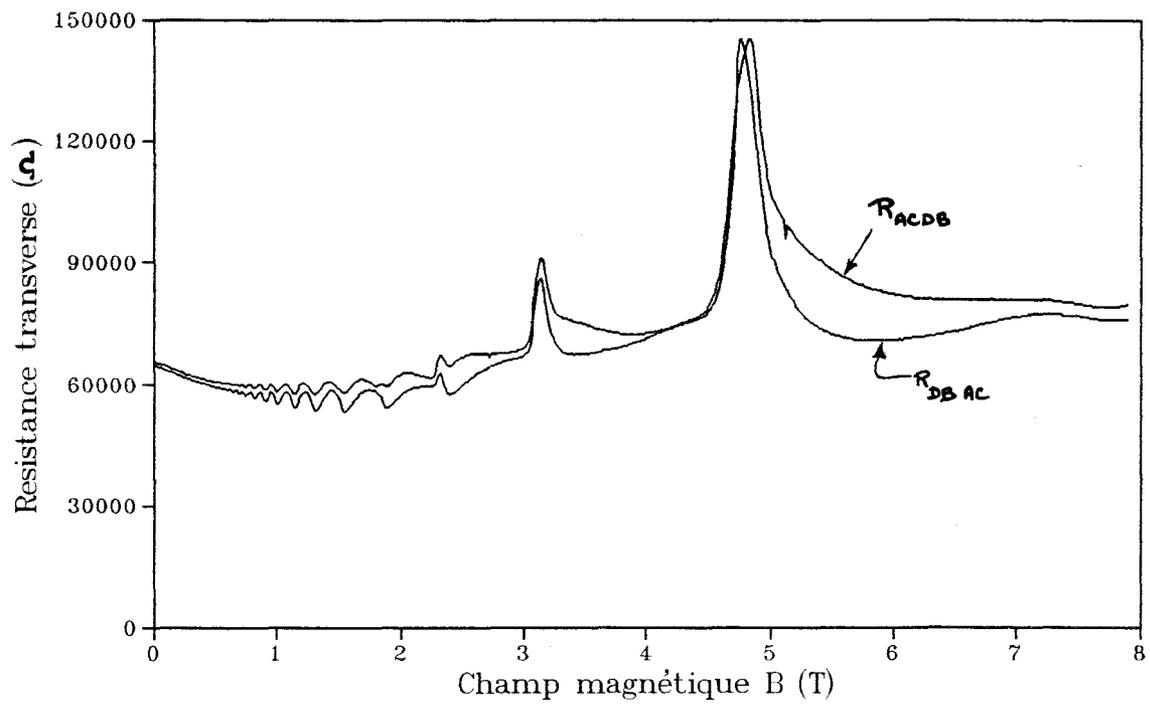


Figure 18— Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (200 Å)-GaAs

a) Mesures des résistances de Van der Pauw



b) Mesure des résistances transverses



3 - Hétérostructure pseudomorphique GaAlAs-GaInAs-GaAs de référence non relaxée (puits de 120 Å). (figure III.17)

4 - Hétérostructure pseudomorphique GaAlAs-GaInAs-GaAs fléchie (120 Å) dans l'orientation de flexion "tension  $\alpha$ ". (figure III.17)

5 - Hétérostructure pseudomorphique GaAlAs-GaInAs-GaAs partiellement relaxée (puits de 200 Å- figure III.18). Nous ne disposons bien évidemment pas de structure identique sans dislocations.

### III.3.2 - Analyse préliminaire

L'analyse des résistances de Van der Pauw et des résistances transverses, obtenues sur les différents type d'échantillons, permet déjà, avant dépouillement, de dégager quelques résultats intéressants:

- Les échantillons de référence ayant subi le même traitement thermique que les échantillons plastiquement déformés présentent un comportement électrique identique aux échantillons de référence non recuits.

- Le comportement électrique des échantillons déformés présente une anisotropie qui peut, dans certains cas, se manifester par un rapport des résistances de Van der Pauw pouvant atteindre  $10^4$ . La plus faible des résistances de Van der Pauw correspond, comme on pouvait s'y attendre, aux mesures réalisées pour un courant injecté selon une arête parallèle à la direction des défauts linéaires.

- Le caractère oscillatoire prononcé des résistances de Van der Pauw avec une résistivité s'annulant au moins une fois à haut champ B, indique que le caractère bidimensionnel du gaz d'électrons des échantillons contenant des défauts linéaires a été conservé, tout au moins pour les échantillons déformés.

Cette conclusion est moins nette dans le cas des échantillons partiellement relaxés. Cependant, dans ce dernier cas la dépendance des mesures en fonction de l'inclinaison de l'échantillon par rapport à l'orientation du champ magnétique B, indique qu'une partie au moins de l'information provient d'un caractère 2D associé au système.

- Les échantillons plastiquement relaxés sont caractérisés par une densité de longues dislocations d'interface plus importante que celle des échantillons déformés (cf. chapitre II). Cela explique sans doute qu'ils présentent une anisotropie nettement plus grande que celle qui caractérise les échantillons déformés (figure III.18-a).

En fait le comportement des résistances de Van der Pauw de la plupart des échantillons de cette catégorie est inhabituel:

- à champ magnétique faible, la résistance de Van der Pauw mesurée parallèlement aux dislocations ( $R_{//,VDP}$ ) est nulle ou extrêmement petite, en tous cas non mesurable avec le matériel utilisé.

- à champ magnétique élevé, cette résistance présente cependant un caractère oscillant: la tension mesurée aux bornes du cristal est alors alternativement positive et négative!

- les oscillations de magnéto-résistance ne sont pas du tout sinusoïdales. Ceci peut être caractéristique d'une fonction densité d'états atypique pour un gaz bidimensionnel classique.

- la présence d'épaulements sur les oscillations est peut-être le signe d'un problème lié à la fois à la géométrie en trèfle de VDP et à la qualité du puits quantique: Kraak et al (1994) observent le même type de singularités pour certaines structures de type pseudomorphiques.

Ces résultats, pour lesquels nous n'avons pas d'explication à proposer, invalident l'utilisation de la méthode de Van der Pauw-Price pour les structures présentant une trop forte concentration de défauts dans le puits.

- Les résistances transverses (figures III.16-b, III.17-b et III.18-b) mesurées sur les échantillons contenant des défauts linéaires ne présentent plus le comportement habituel d'effet Hall quantique (plateaux situés à des valeurs fraction entière de  $h/e^2$ ). Ce résultat reflète la superposition des termes diagonaux et non diagonaux du tenseur de résistivité lorsque les mesures ne sont plus effectuées dans les axes principaux (cf. relations (III.11)).

- La détermination de la densité de porteurs peut se faire directement à partir des courbes de résistance de Van der Pauw plutôt qu'à partir des courbes de résistivité puisque toutes ces grandeurs sont des fonctions périodiques de même période.

L'utilisation directe de la procédure de dépouillement de la densité de porteurs  $n_s$  (présentée dans le premier chapitre: relation (I.13)) à partir des résistances de Van der Pauw, conduit aux résultats résumés dans le tableau III.1. Nous y indiquons également la gamme des valeurs obtenues pour la mesure de la densité  $n_s$  sur des échantillons ayant les mêmes caractéristiques.

Structure	GaAlAs-GaAs		GaAlAs-GaInAs-GaAs puits de 120 Å		GaAlAs- GaInAs(200Å) -GaAs
	référence	déformé	référence	déformé	Relaxé
Echantillon présenté	$6,3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$6,35 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,5 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,15 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,6 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$
échantillons de même nature	$6,2 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$6,3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $6,4 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $4,6 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,2 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $4,5 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$	$4,4 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $4,6 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$

Tableau III.1 - Densité de porteurs libres  $n_s$

La dispersion de près de 10% sur  $n_s$ , obtenue pour des échantillons de référence en provenance de la même couche de croissance, implique que toute variation de  $n_s$  de cet ordre de grandeur est non significative. Ainsi, d'après les résultats présentés dans le tableau III.1, la présence des défauts linéaires ne semble pas modifier la densité de porteurs libres.

Ce résultat peut paraître a priori contradictoire avec les observations habituellement faites dans des échantillons massifs plastiquement déformés. En effet le mécanisme de diffusion qui permet de retrouver théoriquement les mesures de résistivité expérimentales des échantillons massifs déformés correspond à l'existence d'une charge électronique piégée sur les atomes de coeur

des dislocations. Il est également remarqué qu'un tel piégeage contribue à une réduction notable de la densité de porteurs libres.

L'invariance apparente du nombre de porteurs libres dans les systèmes 2D déformés peut être interprétée qualitativement comme suit: puisque la quantité de porteurs libres dans le gaz électronique 2D résulte d'un équilibre thermodynamique entre le puits quantique et la couche d'alimentation très dopée, tout piégeage des électrons sur des niveaux associés aux dislocations est instantanément compensé par une redistribution des porteurs entre le puits et la couche dopée. Compte tenu des faibles capacités de piégeage des dislocations d'interface (trop peu nombreuses et au maximum un électron piégé par atome ou site de cœur) et de la grande quantité de donneurs de la couche d'alimentation, tout se passe comme si le nombre de porteurs libres ne changeait pas.

En ce qui concerne les échantillons plastiquement relaxés, nous ne disposons pas de référence. Néanmoins, la valeur théorique de la densité totale (tous niveaux occupés cumulés) sature dès que l'épaisseur du puits dépasse une centaine d'Angströms (cf. §I.1). Il serait ainsi normal de mesurer pour un puits de 200 Å une densité  $n_s$  très voisine de celle d'un puits de 120 Å. C'est effectivement le cas. La présence de dislocations de croissance dans le puits ne semble pas affecter la qualité du transfert de charge.

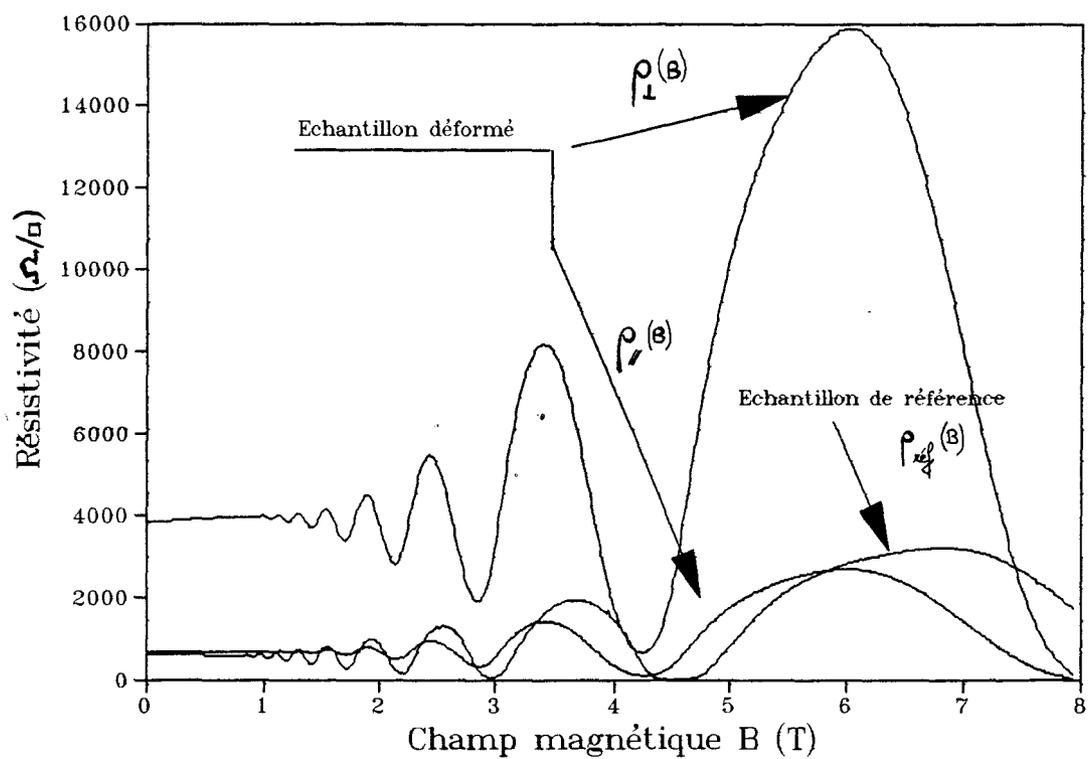


Figure 19 - Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs.  
Reconstitution de l'effet Shubnikov-De Haas.

## III.4 - Éléments du tenseur de résistivité

### III.4.1 - Effet Shubnikov-de Haas

L'analyse des résultats expérimentaux au moyen de la méthode de Van der Pauw-Price (cf. III.1), permet de déterminer l'évolution, sous champ magnétique, des composantes principales du tenseur de résistivité à partir des deux résistances de VdP,  $R_{ABDC}(B)$  et  $R_{ADBC}(B)$ .

#### III.4.1.1 - Echantillons GaAlAs-GaAs

Les données relatives à l'hétérostructure GaAlAs-GaAs n'étant pas disponibles sur fichier, elles n'ont été dépouillées que pour  $B=0$ .

On obtient, dans les échantillons déformés, une anisotropie  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$  des résistivités parallèle et perpendiculaire aux défauts linéaires, d'environ 3,5. La résistivité parallèle reste voisine de celle de la référence:  $166 \Omega/\square$ .

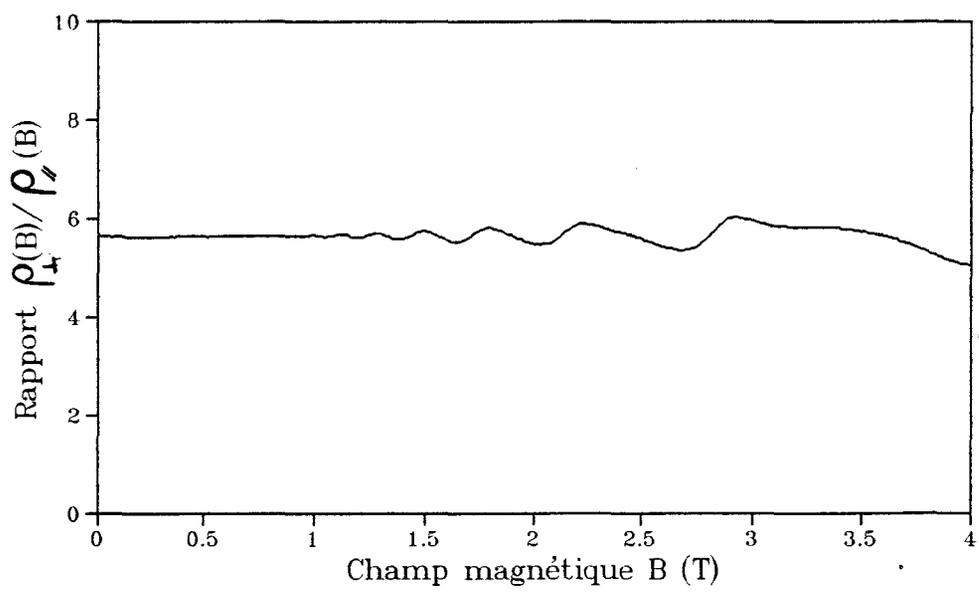
La mobilité électronique correspondante vérifie:  $\mu_{\text{ref}} = 1/n_s e \rho_{\text{ref}}$ , ce qui, compte tenu de la densité de porteurs (tableau III.1), conduit à  $\mu_{\parallel} \cong \mu_{\text{ref}} = 5,9 \text{ m}^2/\text{Vs}$ .

#### III.4.1.2 - Echantillons GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs

La figure III.19 présente l'évolution, en fonction du champ magnétique, des résistivités parallèle et perpendiculaire aux défauts linéaires  $\rho_{\parallel}(B)$  et  $\rho_{\perp}(B)$  correspondant à l'échantillon pseudomorphique déformé.

Ces courbes illustrent le comportement caractéristique oscillatoire de Shubnikov de Haas, que l'on retrouve bien évidemment sur l'échantillon de référence. Le léger décalage des oscillations, observé entre l'échantillon de référence et l'échantillon déformé, reflète une légère différence entre leurs densités de porteurs libres  $n_s$ .

La résistivité  $\rho_{\parallel}$  des échantillons déformés est, à champ nul, systématiquement voisine de celle des échantillons de référence. Ce résultat semble indiquer qu'il n'y a pas de diffusion des porteurs libres parallèlement à la direction des défauts. Ainsi les mobilités électroniques correspondantes sont de l'ordre de  $2,3 \text{ m}^2/\text{Vs}$ . La faible valeur de  $\mu_{\text{ref}}$  est essentiellement due à la diffusion



*Figure 20* - Evolution du rapport d'anisotropie des résistivités  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$

par le désordre d'alliage, principal mécanisme de diffusion à faible température pour ce type d'hétérostructure.

L'évolution du rapport d'anisotropie  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$  en fonction du champ magnétique est représenté sur la figure III.20. Il est, à de faibles écarts d'amplitude près, indépendant de  $B$ :  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B) \cong 5,6$  (du moins pour des champs inférieurs à 4 Tesla). Cette particularité sera analysée dans le dernier chapitre mais nous pouvons néanmoins la justifier qualitativement dès maintenant.

D'après l'expression théorique de la résistivité d'un échantillon isotrope  $\rho(B)$  établie au chapitre I (relation (I.29)), l'amplitude des oscillations de SdH  $\Delta\rho_{\max}(B)/\rho(0)$  est uniquement liée à l'allure de la fonction densité d'état  $N(E_F)$ , qui elle même dépend des potentiels diffuseurs. Si, individuellement, les résistivités d'un échantillon anisotrope obéissent à la même loi, le rapport d'anisotropie  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$  à  $B \gg 0$  doit être constamment égal à sa valeur déterminée à champ  $B$  nul  $\rho_{\perp}(0)/\rho_{\parallel}(0)$  puisque la densité d'état est indépendante de l'orientation de mesure. Le comportement observé pour  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$  est donc la signature du comportement d'un système 2D homogène.

#### III.4.1.3 - Echantillons GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs

Compte tenu du comportement singulier des échantillons issus de l'hétérostructure pseudomorphique plastiquement relaxée (figure III.18), il est impossible d'employer l'analyse de Van der Pauw-Price pour déterminer les composantes propres  $\rho_{\perp}(B)$  et  $\rho_{\parallel}(B)$ .

La validité d'une analyse de type Van der Pauw-Price étant pour cette catégorie de structure remise en cause, nous avons employé des échantillons en forme de barrettes orientées parallèlement et perpendiculairement aux dislocations de désadaptation de réseau. Bien évidemment, le contenu en défauts linéaires n'étant plus forcément identique d'un échantillon à l'autre, les mesures obtenues ne représentent que de façon semi-quantitative l'influence des dislocations sur les propriétés de transport.

Les barrettes utilisées ont pour dimensions: 1mm \* 5mm. La différence de potentiel est mesurée entre les contacts qui servent à l'injection du

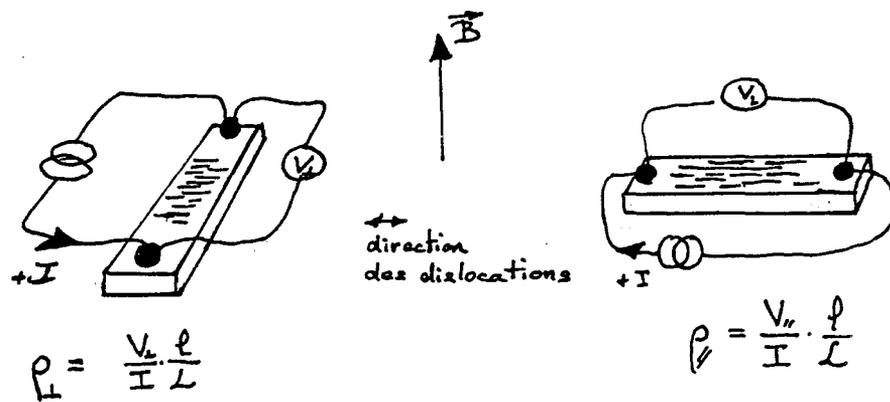


Figure 21 - Géométrie des barrettes de mesure

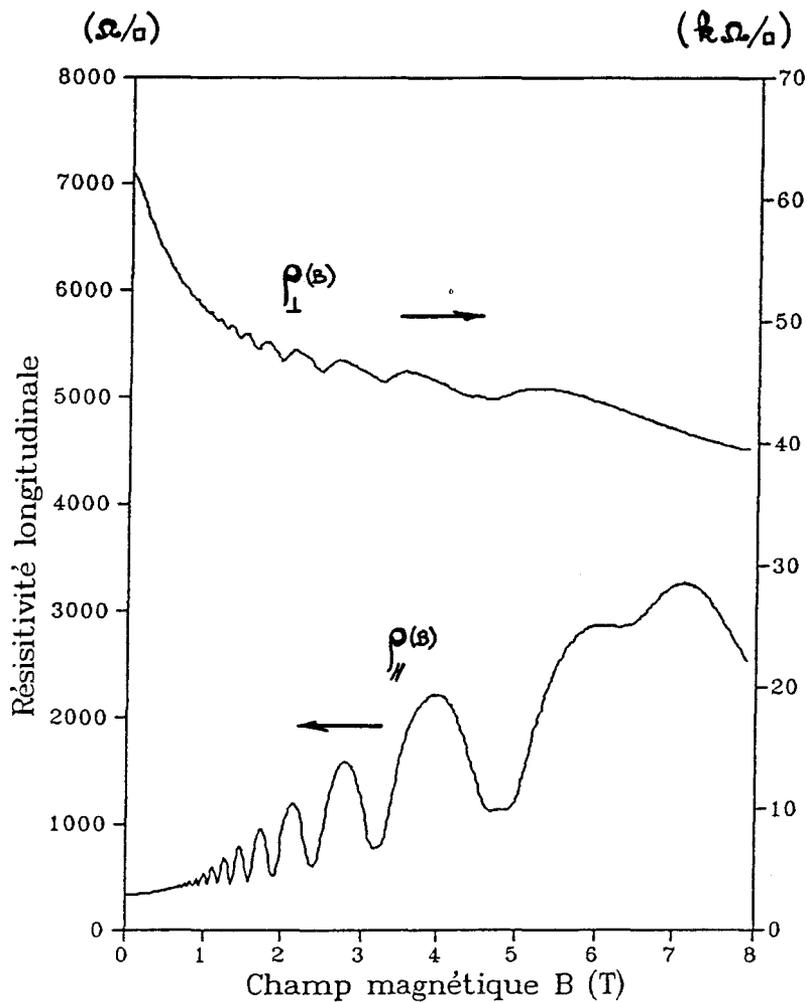


Figure 22 - Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (200 Å)-GaAs.  
Mesures des résistivités propres  $\rho_{\parallel}$  et  $\rho_{\perp}$

courant (mesure 2 points) (figure III.21). Les résistivités parallèle et perpendiculaire aux dislocations de désadaptation de réseau s'en déduisent directement:

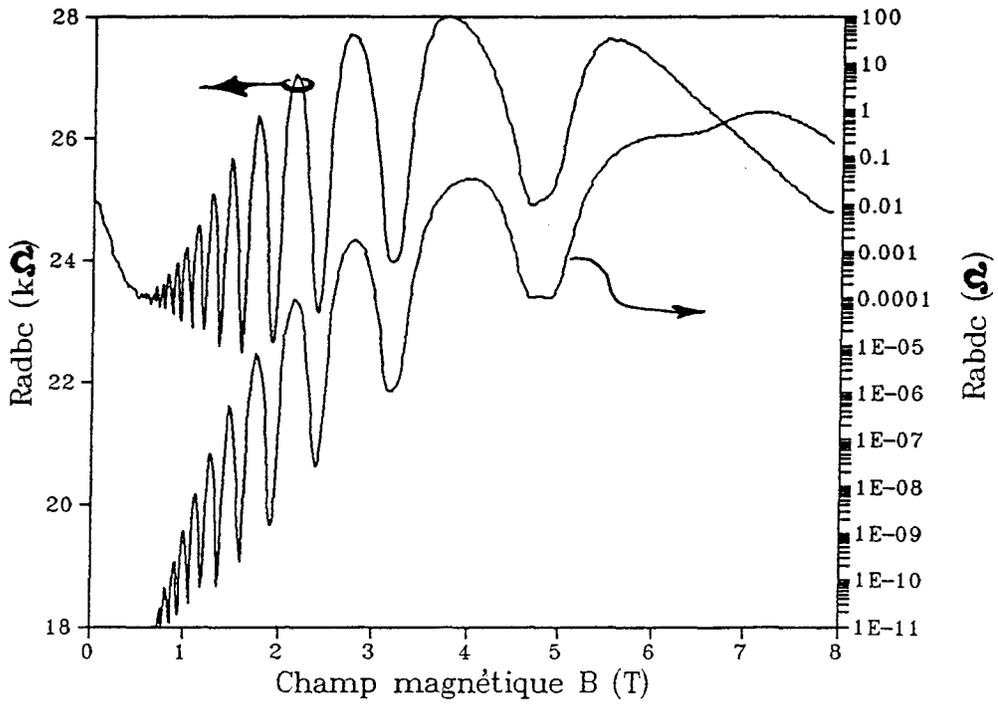
$$\rho_{// \text{ ou } \perp} = \frac{1}{L} \frac{V}{I}$$

La figure III.22 présente l'évolution, avec le champ magnétique, des deux résistivités  $\rho_{//}$  et  $\rho_{\perp}$ . Outre l'énorme anisotropie observée, il est manifeste que leurs comportements sont très dissemblables, à l'opposé de ceux observés sur les échantillons déformés. La nature même de la mesure "2 points" pourrait être à l'origine de ces différences car avec ce type de mesure, la tension mesurée peut dépendre des résistances de contact et de toutes les composantes du tenseur de résistivité au lieu d'une seule d'entre elle. Cependant, si une partie du signal était due aux résistances de contact, on la retrouverait pour les deux types de mesure réalisées parallèlement et perpendiculairement aux dislocations, ce qui n'est pas le cas. D'ailleurs, la grande magnétorésistance négative de  $\rho_{\perp}$  est déjà présente dans la mesure des résistances de Van der Pauw (cf. figure III.18-a) des échantillons en forme de trèfles (mesures 4 points). Elle n'est probablement pas due à un simple problème de bille d'indium mal alliée à la structure. L'aspect singulier de la magnétorésistance  $\rho_{\perp}$  est peut être essentiellement liée à la présence des dislocations de désadaptation de réseau placées en travers du canal (voir chap. V).

La magnétorésistivité  $\rho_{//}(B)$  présente, quant à elle, un comportement plus classique. La résistivité à champ nul est remarquablement faible. Elle est de l'ordre de  $360 \Omega/\square$ , c'est à dire inférieure à celle qui caractérise les échantillons de référence des structures pseudomorphiques ayant un puits de  $120 \text{ \AA}$  (pour mémoire  $\rho_{\text{ref}} = 650 \Omega/\square$  en moyenne).

Ce résultat est intéressant. La diffusion d'alliage, principale responsable, à 4,2 K, de la limitation de la mobilité électronique dans ces hétérostructures décroît en moyenne linéairement avec l'épaisseur du puits (cf. chap I). Ainsi, la mobilité électronique dans un puits de  $200 \text{ \AA}$  est environ  $5/3$  de fois supérieure à celle d'un puits de  $120 \text{ \AA}$ . Or,  $\rho_{\text{ref}, 120 \text{ \AA}}(0) \cdot 3/5 \approx 390 \Omega/\square$ . Ceci correspond assez bien à  $\rho_{//, 200 \text{ \AA}}$ .

Il semblerait donc que même dans le cas d'un puits contenant de longues dislocations de désadaptation (bien sûr, toutes parallèles), la conductivité du puits à champ nul, mesurée parallèlement aux défauts, soit in affectée. Tout se



*Figure 23*

Reconstitution des résistances de Van der Pauw  
à partir des résistivités  $\rho_{xx}$  et  $\rho_{xy}$  de l'échantillon relaxé  
GaAlAs-GaInAs(200 Å)-GaAs.

passé comme si le transport à  $B=0$  s'effectuait dans les zones 2D inter-dislocations indépendamment du contenu en dislocations.

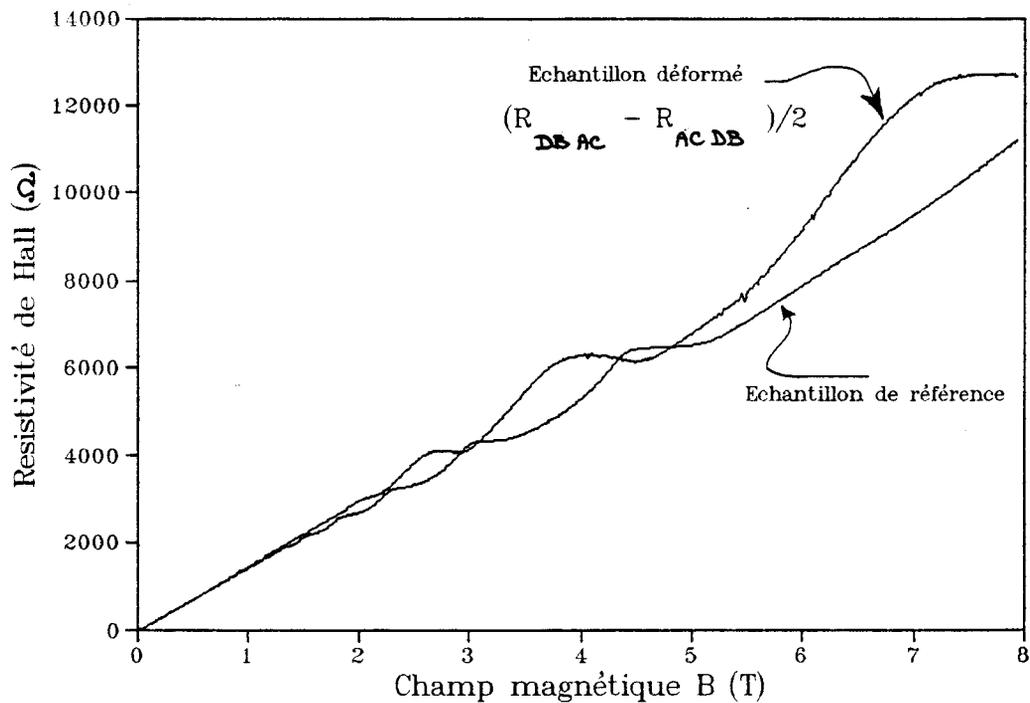
La courbe d'évolution de  $\rho_{//}$  avec le champ magnétique ne présente pas de zéro de résistivité. Cela peut être attribué

- soit à l'existence d'un second niveau du puits qui serait partiellement occupé; cette hypothèse est corroborée par la présence de légers battements sur les oscillations de  $\rho_{//}(B)$  (figure III.22),
- soit à un élargissement plus important des niveaux de Landau,
- soit finalement à l'existence de composantes parasites du tenseur conductivité associée à la méthode "2-points" de mesure des résistances (Sichel et al. 1986, Rikken et al. 1988).

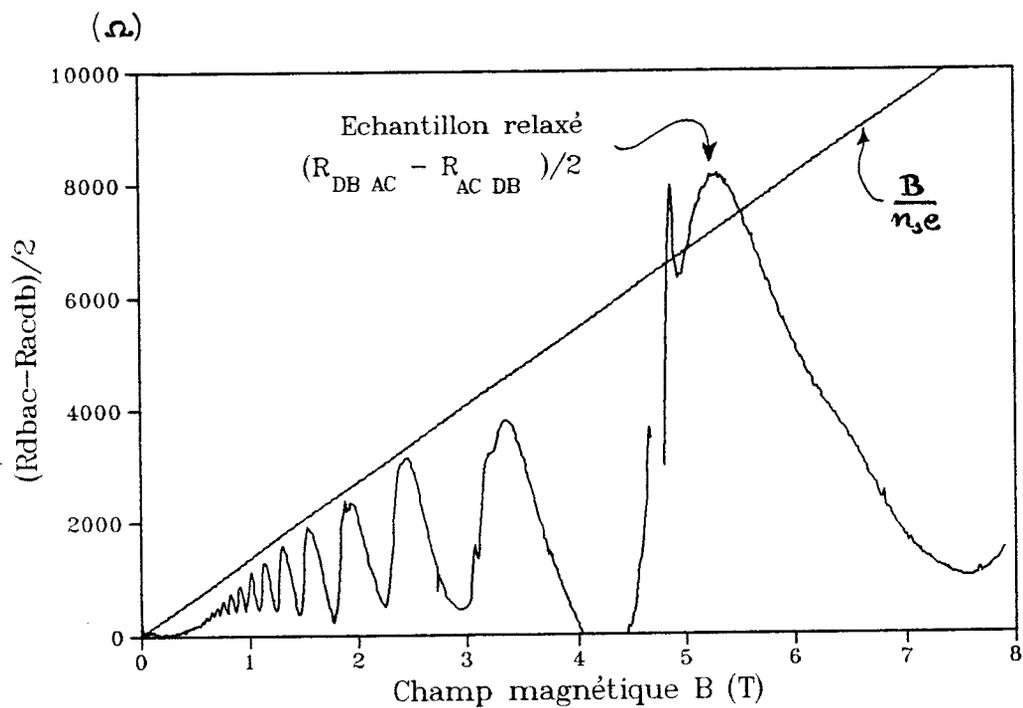
#### Remarque:

. Si nous reprenons les données  $\rho_{//}(B)$  et  $\rho_{\perp}(B)$  des échantillons en forme de barrette, et si nous utilisons les formules de Price (III.7) pour remonter aux résistances de Van der Pauw qui devraient être mesurées sur des échantillons en forme de trèfle, nous obtenons les courbes de  $R_{ABDC}$  et  $R_{ADBC}$  représentées sur la figure III.23. On remarque que:

- pour une anisotropie aussi importante, la résistance de Van der Pauw mesurée parallèlement aux dislocations peut devenir trop faible pour être mesurable. Ceci explique, *en partie*, le comportement d'un grand nombre d'échantillons plastiquement relaxés, caractérisés par une résistance nulle aux faibles champs magnétiques  $B$ .
- le comportement oscillatoire de la résistance de Van der Pauw observé expérimentalement à champs  $B$  élevés n'est pas reproduit par la courbe simulée. Ceci indique que la variation expérimentale de la résistance de Van der Pauw mesurée parallèlement aux dislocations n'est pas réductible à un simple effet d'anisotropie des potentiels diffuseurs du système 2D.



*Figure 24* - Echantillon GaAlAs-GaInAs ( $120 \text{ \AA}$ )-GaAs.  
Reconstitution de l'effet Hall quantique.



*Figure 25* - Essai de reconstitution de l'effet Hall quantique.  
Echantillon GaAlAs-GaInAs ( $200 \text{ \AA}$ )-GaAs.

### III.4.2 - Effet Hall quantique

Les figures III.24 et III.25 représentent l'évolution en fonction du champ magnétique de la quantité:

$$\frac{R_{DBAC}(B) - R_{ACDB}(B)}{2}$$

correspondant respectivement à l'échantillon pseudomorphique déformé (puits de 120 Å) et à l'échantillon pseudomorphique plastiquement relaxé (puits 200 Å).

Dans le premier cas, nous avons tracé pour mémoire, la courbe de l'effet Hall quantique obtenue pour un échantillon de référence en forme de croix de Lorraine, issu de la même structure. Dans le second cas, nous avons simplement reporté une régression linéaire correspondant à l'effet Hall classique (en posant  $n_H = n_s$ , puits 200 Å).

Dans le cas des échantillons déformés, l'évolution obtenue correspond à un comportement habituel d'effet Hall quantique. Les plateaux de  $\rho_{xy}(B)$  sont observés à des valeurs de résistivité presque identiques à celles des échantillons de référence. Leur position moyenne en fonction du champ magnétique  $B$  est légèrement décalée, indiquant une faible différence de densité de porteurs libres d'un échantillon à l'autre. Nous discuterons des plateaux ultérieurement (chapitre V).

Le comportement linéaire à bas champ magnétique est quant à lui pratiquement inchangé par rapport à celui de l'échantillon de référence. Ceci corrobore le résultat présenté plus tôt, selon lequel la densité de porteurs libre est non affectée par la présence de défauts linéaires (dislocations mais aussi rugosité 1D).

Cette remarque est également valable pour l'hétérostructure conventionnelle GaAlAs-GaAs déformée. Même si nous ne pouvons pas présenter ici de courbe de Hall reconstituée à partir des deux résistances transverses, il est possible de comparer les courbes  $R_{ACDB}(B)$  et  $R_{DBAC}(B)$  des figures III.15-b et III.16-b: elles présentent effectivement la même pente à bas champ.

Dans le cas des échantillons plastiquement relaxés, nous ne pouvons rien conclure à partir de l'allure de l'évolution présentée sur la figure III.25. L'évolution du signal à bas champ magnétique n'est même pas linéaire (pas d'effet Hall classique). Compte tenu des grandes valeurs des deux résistances transverses

$R_{ACDB}(B)$  et  $R_{DBAC}(B)$  de départ, leur différence est du même ordre de grandeur que l'incertitude sur leur mesure. Ainsi, le signal reconstitué est non significatif. Ceci constitue une seconde preuve que les mesures du type Van der Pauw-Price ne sont pas du tout adaptée au cas d'échantillons très anisotropes.

### Conclusion

Les mesures de Shubnikov-de Haas et d'effet Hall quantique indiquent que la présence de défauts linéaires au voisinage et à l'intérieur d'un puits quantique ne dégradent pas entièrement le caractère bidimensionnel du gaz électronique mais rendent anisotropes ses propriétés de transport. Quel que soit l'échantillon étudié, pseudomorphique ou non, déformé ou plastiquement relaxé, deux caractéristiques semblent être conservées malgré la présence de défauts linéaires:

- la densité surfacique de porteurs  $n_s$ ,
- la mobilité électronique mesurée parallèlement aux défauts linéaires:  $\mu_{//} \cong \mu_{ref}$ .

Dans le prochain chapitre, nous analysons l'origine de l'anisotropie de la mobilité ( $\mu_{\perp} < \mu_{//}$ ) et nous essayons de donner une forme de potentiel diffuseur associé aux défauts linéaires, susceptible de rendre compte des mesures expérimentales à  $B=0$ . Le comportement oscillatoire des magnéto-résistivités  $\rho_{\perp}$  et  $\rho_{//}$  ainsi que le comportement de la composante de Hall  $\rho_{xy}$  sont analysés dans le dernier chapitre dans le but de caractériser la fonction densité d'états dans un système contenant une distribution asymétrique de défauts linéaires.

## Chapitre IV

*Etude théorique de  
l'influence des défauts linéaires sur  
les propriétés de transport  
des systèmes 2D  
à champ magnétique nul*

# Chapitre IV

## Etude théorique de l'influence des défauts linéaires sur les propriétés de transport des systèmes 2D à champ magnétique nul

---

Les résultats expérimentaux décrits au chapitre précédent montrent que les propriétés de transport électrique des systèmes bidimensionnels sont notablement perturbées par la présence de défauts linéaires introduits par déformation plastique (dislocations et rugosités d'interface) ou développés lors de la croissance épitaxiale (dislocations de désadaptation de réseau).

Dans le but de déterminer quels sont les mécanismes de diffusion conduisant au comportement observé (conductivité parallèle pratiquement inchangée, conductivité perpendiculaire fortement affectée) nous abordons dans ce chapitre la modélisation théorique de la mobilité électronique à *champ magnétique nul*, en supposant que le caractère bidimensionnel du gaz d'électrons est conservé et que le seul rôle de la distribution asymétrique de défauts linéaires, présents dans les structures, consiste à introduire des potentiels de diffusion anisotropes supplémentaires.

## IV.1 - Introduction - Position du problème

### IV.1.1 - Description des systèmes anisotropes

Bien que les propriétés de transport dans les systèmes 2D aient fait l'objet d'un très grand nombre d'études, décrites par exemple dans les articles de revue d'Ando et al. (1982) et de Harris et al. (1990), il est surprenant de constater qu'il existe peu d'études expérimentales et pratiquement pas d'études théoriques des mécanismes de diffusion associés aux dislocations dans les systèmes 2D. Du point de vue expérimental, il existe bien quelques approches qualitatives (Woodall et al. 1983, Ashizawa et al. 1988, Grundmann 1990, Fernandez et al. 1992, Uchida et al. 1993), mais du point de vue théorique, en dehors de l'approche empirique de Neumark (1970) -où les dislocations sont décrites par des tubes de matière de mobilité électronique et de densité de porteurs réduites- ou celle de Zhao et Kuhn (1992), qui ont abordé ce même problème théorique de façon plus réaliste mais encore incomplète et menant à des résultats incohérents, il n'existe, à notre connaissance, aucune étude théorique fiable. Nous proposons ici une approche des mécanismes de diffusion par les dislocations plus juste.

Afin d'interpréter, ou de prévoir, les perturbations introduites par les défauts linéaires (dislocations et rugosité 1D) sur la mobilité électronique du gaz d'électrons 2D, il faut d'une part utiliser une modélisation du transport adaptée à la description de systèmes anisotropes et d'autre part considérer de façon exhaustive les mécanismes de diffusion qui peuvent être associés aux défauts.

L'approche théorique la plus utilisée pour la description des phénomènes de transport correspond à la résolution de l'équation cinétique de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation. Cette méthode conduit, en régime ohmique, (et aussi à faible champ magnétique; cf. chapitre I) à l'expression classique des composantes du tenseur de conductivité (dans un système 2D):

$$\sigma_{ij} = -\frac{2e^2\hbar^2}{m^*s^2} \int n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(\mathbf{k}) k_i k_j d^2\mathbf{k} \quad (\text{IV.1})$$

avec

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V_{\text{eff}}(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)|^2 (1-\cos(\mathbf{k},\mathbf{k}')) \delta(E(\mathbf{k}')-E(\mathbf{k})) d^2\mathbf{k}' \quad (\text{IV.2})$$

où  $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{q})/\epsilon(\mathbf{q})$  est la transformée de Fourier du potentiel diffuseur

total écranté par la fonction diélectrique  $\epsilon(q)$ ;  $V_{\text{ext}}$  est le potentiel extérieur c'est à dire le potentiel diffuseur non écranté associé à l'ensemble des centres diffuseurs.

Dans le cas d'un matériau de masse effective isotrope, le caractère tensoriel de la conductivité (relation (IV.1)) est tout à fait formel: à champ  $B$  nul, courant et champ électrique sont colinéaires. Les formules (IV.1) et (IV.2) ont été utilisées avec succès dans le cas des potentiels diffuseurs isotropes, tels les impuretés ionisées, le désordre d'alliage ou encore les phonons, pour lesquels le potentiel diffuseur effectif  $V_{\text{eff}}(q)$  dépend du module  $q=|k-k'|$  et non du vecteur  $q$  lui même.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux potentiels diffuseurs anisotropes associés aux différents défauts linéaires présents dans nos systèmes, c'est à dire à des potentiels diffuseurs de la forme  $V_{\text{eff}}(q)$ . Il est clair que de tels potentiels associés à l'expression (IV.2) du temps de relaxation conduisent à définir un temps de relaxation  $\tau(k) = \tau(k, \theta)$  (où  $\theta$  est un angle repéré par rapport à une direction propre du système), dépendant du vecteur  $k$  et non de son seul module. L'utilisation de tels temps de relaxation dans l'expression (IV.1) aboutit alors à la définition de deux conductivités propres

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{2e^2\hbar^2}{m^{*2}} \int n(k) \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(k, \theta) k^2 \cos^2(\theta) d^2k \\ \sigma_{yy} &= -\frac{2e^2\hbar^2}{m^{*2}} \int n(k) \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(k, \theta) k^2 \sin^2(\theta) d^2k\end{aligned}\tag{IV.3}$$

Ces deux conductivités peuvent donner l'impression que l'anisotropie du potentiel diffuseur a été considérée de façon satisfaisante.

Cependant l'établissement de la formule (IV.1) est fondé sur l'hypothèse auto-cohérente d'un temps de relaxation isotrope  $\tau(k)$ . Pour le montrer supposons que le temps de relaxation soit fonction du vecteur  $k$ . Son expression est obtenue en évaluant l'intégrale de collision :

$$\left(\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)_{\text{coll}, k} = \frac{f(k) - f_0(k)}{\tau(k, \theta)} = -\int W(k, k') n(k') (f(k) - f_0(k)) d^2k'$$

où  $W(k, k')$  est la matrice de transition entre états  $k$ . L'expression du temps de relaxation est alors donnée par:

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') n(\mathbf{k}') \left( 1 - \frac{\delta f(\mathbf{k}')}{\delta f(\mathbf{k})} \right) d^2 \mathbf{k}'$$

où  $\delta f(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})$  représente la variation de la fonction de distribution consécutive à l'application d'un champ extérieur. Cette quantité est elle-même fonction du temps de relaxation; elle est donnée par:

$$\delta f(\mathbf{k}) = -e \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E} \quad (\text{IV.4})$$

dans le cas simple où seul un champ électrique  $\mathbf{E}$  est appliqué. En introduisant cette expression dans (IV.1), on obtient

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left( 1 - \frac{\left[ \frac{\partial f_0}{\partial E} \right]_{\mathbf{k}'} \tau(\mathbf{k}') \mathbf{k}' \cdot \mathbf{E}}{\left[ \frac{\partial f_0}{\partial E} \right]_{\mathbf{k}} \tau(\mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}} \right) n(\mathbf{k}') d^2 \mathbf{k}'$$

Pour simplifier cette expression, il est nécessaire de faire appel aux considérations suivantes:

- la matrice de transition contient entre autres le principe de conservation de l'énergie. Ainsi pour un matériau dont les surfaces d'énergie constante sont sphériques, ce principe est équivalent à la conservation totale (ou approchée dans le cas de diffusion par les phonons) du module du vecteur  $\mathbf{k}$  après diffusion:  $k \cong k'$ . Ceci conduit à une première simplification de l'expression par les dérivées de la fonction de distribution.

- le phénomène de relaxation est indépendant des champs appliqués puisque  $\tau(\mathbf{k})$  permet également de quantifier le retour à l'équilibre du système électronique après suppression de ces champs. Dans ce cas, le champ  $\mathbf{E}$  apparaissant dans l'expression (IV.4), peut être arbitrairement choisi selon la direction du vecteur  $\mathbf{k}$ . Le rapport des produits scalaires peut ainsi être remplacé par un terme  $\cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ .

Ces deux remarques conduisent au résultat suivant:

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left( 1 - \cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\tau(\mathbf{k}')}{\tau(\mathbf{k})} \right) n(\mathbf{k}') d^2 \mathbf{k}' \quad (\text{IV.5})$$

Afin de retrouver l'expression usuelle (IV.2), il est finalement nécessaire de postuler que le temps de relaxation ne dépend que du module de  $\mathbf{k}$ :  $\tau(\mathbf{k}) = \tau(k) = \tau(k')$ . Dans le cas contraire, l'expression (IV.5) est une équation intégrale complexe qui ne possède aucune solution simple. Ainsi, l'approximation du temps de relaxation de l'équation cinétique de Boltzmann ne permet pas (à notre connaissance) de traiter le cas de potentiels diffuseurs anisotropes. C'est ainsi que l'étude de la diffusion par les dislocations de Zhao et Kuhn (1992) est totalement erronée puisqu'ils utilisent l'expression classique du temps de relaxation dans le cas des potentiels anisotropes associés aux dislocations. Cela les conduit à conclure que la mobilité électronique mesurée parallèlement aux dislocations est inférieure à celle mesurée perpendiculairement. Intuitivement, on s'attend au résultat contraire, puisque, lorsque les électrons se déplacent parallèlement aux lignes de dislocations ils se déplacent de toute évidence sur des équipotentielles.

D'autres formalismes décrivant les phénomènes de transport ont été proposés ultérieurement par Calkin et Nicholson (1962) dans le cas des métaux, puis par Gerlach (1974) dans le cas des semiconducteurs. Dans leur principe, ces formalismes évitent la résolution de l'équation cinétique de Boltzmann. Elles se fondent sur l'équivalence entre la puissance Joule dissipée lors d'une expérience de conductivité et l'énergie perdue par le mouvement inverse des centres diffuseurs à travers le champ électrique induit par la réponse diélectrique des porteurs libres, supposés immobiles. Dans ces théories appelées "energy loss methods", il est admis que la vitesse de dérive de chaque porteur  $\mathbf{k}$  est identique. Cette hypothèse simplificatrice, permet d'obtenir des expressions particulièrement simples de la mobilité des porteurs libres sans nécessiter l'introduction d'aucun temps de relaxation et permet de traiter le cas de potentiels diffuseurs quelconques. Dans un ensemble de publications plus récentes Farvacque (1989, a-1994, b-1994) a cependant démontré que l'hypothèse d'une vitesse de dérive identique n'est pas satisfaisante et que le principe d'équivalence entre la puissance Joule dissipée et l'énergie perdue par le mouvement relatif des centres diffuseurs doit, en fait, être individuellement appliqué à chaque état  $\mathbf{k}$ . Dans ce cas, la puissance Joule dissipée par état  $\mathbf{k}$  est donnée par:

$$\left[ \frac{dW}{dt} \right]_{\mathbf{k}} = -2e \delta f(\mathbf{k}) v(\mathbf{k}) E_{int}(\mathbf{k}) \quad (\text{IV.6})$$

et la variation de la fonction de distribution peut se mettre sous la forme:

$$\delta f(\mathbf{k}) = -\hbar \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{v}(\mathbf{k})$$

où  $\delta \mathbf{v}(\mathbf{k})$  représente la vitesse de dérive moyenne associée à l'état  $\mathbf{k}$ . Parallèlement, l'énergie perdue par le mouvement relatif des centres diffuseurs dans le champ induit par la contribution diélectrique de l'état  $\mathbf{k}$  s'écrit pour un système bidimensionnel:

$$\left[ \frac{dW}{dt} \right]_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar e^2}{2\pi} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial E} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 [\mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{v}(\mathbf{k})]^2 \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^2 \mathbf{q} \quad (\text{IV.6}')$$

avec  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ . L'égalité entre les relations (IV.6) et (IV.6') conduit alors à:

$$2e \hbar \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) E_{\text{int}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar e^2}{2\pi} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial E} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 [\mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{v}(\mathbf{k})]^2 \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^2 \mathbf{q} \quad (\text{IV.7})$$

aboutissant, dans le cas des potentiels diffuseurs isotropes, à la définition d'un temps de collision identique au temps de relaxation de Boltzmann.

Dans le cas de potentiels diffuseurs anisotropes, la formule (IV.7) permet plutôt de définir un tenseur de collision (Farvacque 1995). La relation linéaire entre le champ électrique interne s'opposant au mouvement d'un électron  $\mathbf{k}$  et sa vitesse de dérive  $\delta \mathbf{v}(\mathbf{k})$  (frottement visqueux) devient, dans le cas d'une diffusion anisotrope, une relation tensorielle:

$$e \mathbf{E}_{\text{int}}(\mathbf{k}) = \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{k}) = \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \cdot \delta \mathbf{v}(\mathbf{k})$$

En utilisant cette expression dans les axes propres du tenseur de conductivité, on obtient:

$$2k_j^2 \frac{\Theta_{jj}}{m^*} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 q_j^2 \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^2 \mathbf{q}$$

Enfin en définissant les fréquences de collision par  $1/\tau_{jj} = \Theta_{jj}/m^*$ , il vient:

$$\frac{1}{\tau_{xx}(\mathbf{k})} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 \frac{q_x^2}{2k_x^2} \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^2 \mathbf{k}'$$

$$\frac{1}{\tau_{yy}(\mathbf{k})} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 \frac{q_y^2}{2k_y^2} \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^2 \mathbf{k}' \quad (\text{IV.8})$$

avec:

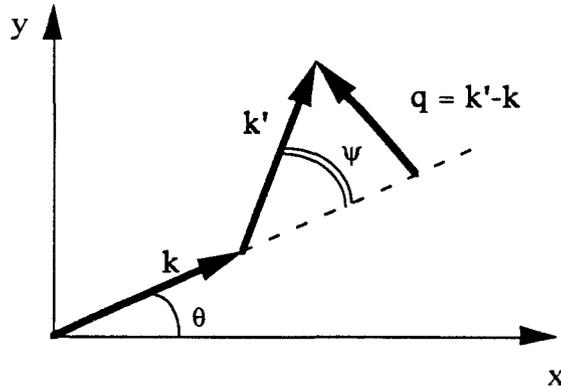
$$q^2 = 4k^2 \sin^2(\psi/2) = 2k^2(1-\cos(\mathbf{k},\mathbf{k}'))$$

$$q_x = 2k \sin(\psi/2) \sin(\theta + \psi/2)$$

$$q_y = 2k \sin(\psi/2) \cos(\theta + \psi/2)$$

où  $\psi$  est l'angle séparant  $\mathbf{k}$  de  $\mathbf{k}'$  (figure IV.1).

**Figure IV.1**  
Orientation des vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  dans le repère lié aux axes propres.



Dans le cas de potentiels diffuseurs isotropes où les temps de collision sont implicitement identiques quelle que soit l'orientation du vecteur  $\mathbf{k}$ , chacun des termes  $1/\tau_{ii}$  redonne l'expression classique du temps de relaxation de Boltzmann:

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int |V_{\text{eff}}(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)|^2 \frac{q^2}{2k^2} \delta(E(\mathbf{k}')-E(\mathbf{k})) d^2\mathbf{k}'$$

En définitive, dans le cas de potentiels diffuseurs anisotropes, les expressions des composantes propres du tenseur de conductivité sont données, à champ  $B$  nul, par:

$$\sigma_{xx} = -\frac{2e^2\hbar^2}{m^{*2}} \int n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau_{xx}(\mathbf{k},\theta) k^2 \cos^2(\theta) d^2\mathbf{k}$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{2e^2\hbar^2}{m^{*2}} \int n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau_{yy}(\mathbf{k},\theta) k^2 \sin^2(\theta) d^2\mathbf{k}$$

(IV.9)

et non pas par les formules (IV.3). Les fréquences de collision dont elles dépendent sont données par les relations (IV.8). Ce sont ces formules que nous employons dans la suite de cet exposé .

A très basse température, la dérivée de la fonction d'occupation de Fermi  $-\partial f_0 / \partial E$  peut être approximée par la fonction de Dirac  $\delta(E - E_f)$ . Les deux composantes propres du tenseur mobilité  $\mu = \sigma / (n_s e)$  s'écrivent alors simplement:

$$\begin{aligned}\mu_{xx} &= \frac{e}{\pi m^*} \int_0^{2\pi} \cos^2(\theta) \tau_{xx}(\theta) d\theta \\ \mu_{yy} &= \frac{e}{\pi m^*} \int_0^{2\pi} \sin^2(\theta) \tau_{yy}(\theta) d\theta\end{aligned}\tag{IV.10}$$

#### IV.1.2 - Potentiels diffuseurs et écrantage

La fonction diélectrique  $\epsilon(q)$  utilisée pour tenir compte de l'écrantage des potentiels diffuseurs, est systématiquement assimilée dans la littérature à la simple réponse du gaz électronique bidimensionnel.

Cependant, dans le cas de l'alimentation du puits par un dopage externe ou encore dans le cas d'une distribution de dislocations externes au puits quantique, il va de soi que les potentiels créés par ces défauts au niveau du système 2D, ont été déjà écrantés par la réponse diélectrique des milieux extérieurs à la couche 2D. Nous nous sommes également intéressés à la détermination de la réponse diélectrique électronique du matériau composite dans lequel se situe la couche 2D, ce problème n'ayant pas été traité, à notre connaissance, dans la littérature.

Dans le cadre de ce nouveau formalisme, nous développons une étude exhaustive des mécanismes de diffusion associés aux dislocations. Nous avons pour cela distingué le cas des dislocations externes au puits quantique du cas des dislocations d'interface et nous avons considéré systématiquement l'ensemble des mécanismes de diffusion qui leur sont liés:

- les effets de charge associés aux états électroniques unidimensionnels des dislocations. L'invariance apparente du nombre de porteurs libres observée expérimentalement et la présence de lignes chargées en tant que mécanisme de diffusion ne sont pas incompatibles.
- les mécanismes associés au champ de contrainte par couplage avec le potentiel de déformation ou par couplage piezoélectrique.

L'un des apports originaux de cette partie consiste à montrer que le couplage systématique de ces potentiels diffuseurs, par nature anisotropes, avec les potentiels diffuseurs habituels à symétrie sphériques, supprime théoriquement la validité de la loi de Matthiessen concernant la sommabilité de l'inverse des mobilités.

Le cas des marches d'interface (ou rugosité unidimensionnelle d'interface) introduites éventuellement par le glissement des dislocations a été également considéré comme un mécanisme de diffusion possible. Nous approchons au paragraphe IV.6, ce mécanisme de deux façons: d'une part par une méthode déterministe où chaque zone cisailée est supposée agir indépendamment des autres et pour laquelle le potentiel diffuseur est de courte portée; d'autre part une méthode probabiliste, fondée sur l'utilisation de fonctions de corrélation, particulièrement bien adaptée à la description de distributions aléatoires de défauts.

Les résultats numériques obtenus à l'issu des calculs déterministes énumérés ci-dessus, permettent de reproduire les valeurs expérimentales présentées dans le précédent chapitre pour un choix des paramètres de diffusion tout à fait compatible avec la description réelle de nos systèmes 2D. Ils permettent également de classer les potentiels diffuseurs par ordre d'efficacité et de montrer sans ambiguïté que seuls les défauts les plus proches du puits quantique ont un effet mesurable.

Afin de compléter cette étude, nous présentons, dans la dernière partie de ce chapitre, une approche phénoménologique permettant à la fois de rendre compte de la longueur finie des défauts linéaires (que nous avons, dans la première analyse, supposés infinis) et de décrire sous une forme compacte l'ensemble des mécanismes de diffusions agissant réellement sur les porteurs libres du système bidimensionnel. Cette formulation est particulièrement bien adaptée à l'interprétation de la conductivité en présence d'un champ magnétique fort que nous aborderons dans le dernier chapitre (V).

## IV.2 - Approche de la fonction diélectrique dans un milieu composite

### IV.2.1 - Présentation rapide du modèle

Le développement des théories de transport fondées sur les propriétés diélectriques des matériaux (Calkin et Nicholson 1962, Gerlach et Crosse 1977, Farvacque a-1994) indique clairement que l'origine physique du frottement visqueux que subissent les porteurs libres provient de la contribution des porteurs libres eux mêmes à la réponse diélectrique globale du milieu. Ces théories incluent, dans leur fondement, l'utilisation de potentiels écrantés. Ces potentiels, dit potentiels efficaces, correspondent aux potentiels  $V_{\text{ext}}(r,t)$  qui auraient été créés par les centres diffuseurs placés dans le vide écrantés par la réponse diélectrique globale du matériau, soit:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \int \varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\mathbf{q}') V_{\text{ext}}(\mathbf{q}') d^n \mathbf{q}' \quad (\text{IV.11})$$

où  $\varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\mathbf{q}')$  est l'inverse de la fonction diélectrique et  $n$  la dimension du milieu. Dans le cas d'un milieu homogène, la fonction diélectrique est donnée par:

$$\varepsilon(\mathbf{q},\mathbf{q}') = \varepsilon(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \quad (\text{IV.12})$$

et le potentiel effectif est donné par:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\varepsilon(\mathbf{q})} \quad (\text{IV.13})$$

Dans le cas des matériaux composites, tels que les hétérostructures semiconductrices, le système n'est plus invariant par translation et ceci invalide les deux formules (IV.12) et (IV.13). *Même si l'on s'intéresse à une région particulière du matériau composite, c'est la réponse de l'ensemble du matériau qui détermine les effets d'écran et non la réponse associée à la région considérée.*

Le calcul détaillé de la réponse globale d'un système sur l'une de ses régions et l'application de ce formalisme au cas d'un système 2D plan inséré entre des milieux 3D est exposé dans l'annexe C (Farvacque et Bougrioua 1994). Dans cette approche, nous supposons que les électrons du système 2D sont entièrement confinés dans un puits d'épaisseur nulle (fonction enveloppe de la fonction d'onde approximée à un pic de Dirac) et qu'ils n'occupent qu'une seule sous-bande. La constante diélectrique  $\varepsilon_r$  est supposée identique pour tous les domaines constituant

le matériau composite et sera intégrée dans l'expression des potentiels extérieurs. Nous obtenons ainsi:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{k_M^2}{q^2} \frac{V_\infty}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} + \frac{\beta}{q^2} \frac{S}{(2\pi)^3} \delta_{q_{//}, q'_{//}}$$

- avec
- $\mathbf{q}$ , vecteur 3D et  $q_{//}$ , la composante dans le plan 2D de ce même vecteur,
  - $V_\infty$ , le volume total de la structure composite,
  - $S$ , la surface du système 2D plan.
  - $\beta$ , le vecteur d'écran usuel des couches métalliques 2D défini par:

$$\beta = 2 e^2 \frac{N(E_F)}{\varepsilon_0 \varepsilon_{2D}} = \frac{m^* e^2}{\pi \hbar \varepsilon_0 \varepsilon_{2D}}$$

- $k_M$ , représente la valeur moyenne des vecteurs d'écran "généralisés"  $k_{G,j}$  associés à chaque domaine 3D du milieu composite, pondérées par la fraction volumique  $V_j / V_\infty$ . Ce vecteur d'écran moyen s'écrit ainsi:

$$k_M^2 = \frac{1}{V_\infty} \sum_j V_j k_{G,j}^2$$

Selon les caractéristiques de dopage du milieu  $j$ , la constante  $k_{G,j}$  sera de type Debye-Hückel ou Thomas-Fermi.

A l'aide de l'expression (IV.11), on montre aisément que le potentiel efficace diffuseur, tenant compte de l'écrantage composite est donnée par:

$$V_{\text{eff}}(q_{//}, z=0) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^2 V(q)_{\text{ext}} dq_z}{q^2 + k_M^2}}{2\pi \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)} \quad (\text{IV.14})$$

L'interprétation physique de ce résultat est immédiate. Le numérateur n'est rien d'autre que le potentiel extérieur, écranté par la fonction diélectrique des domaines environnant le puits quantique. Le dénominateur correspondrait à l'écrantage direct de ce potentiel par la réponse diélectrique propre du puits si le vecteur d'écran moyen  $k_M$  n'existait pas dans l'expression. Cependant, la présence de  $k_M$  résulte du fait que la réponse diélectrique est non locale et inclue des

corrélations entre les différentes parties du système. En posant  $k_M = 0$ , on retrouve bien l'expression couramment utilisée dans la littérature:

$$V_{\text{eff}}(q_{//}, z=0) = \frac{V_{\text{ext}}(q_{//}, z=0)}{1 + \frac{\beta}{2q_{//}}} \quad (\text{IV.15})$$

Dans les cas expérimentaux décrits au chapitre III, le milieu composite est soit une structure GaAlAs-GaAs, soit une structure GaAlAs-GaInAs-GaAs. Les barrières du puits peuvent être considérées comme étant d'épaisseur semi-infinies. Une telle hypothèse est très utile pour que le traitement du problème reste analytique. Elle est raisonnable pour l'approximation du substrat et l'est également a priori pour la couche d'alimentation puisqu'il est souvent remarqué que les porteurs deviennent insensibles à la diffusion par des défauts ponctuels de la barrière dopée situés à une distance supérieure à 300 Å. Nos structures réelles ayant des couches d'alimentation de 500 Å, une telle approximation n'est pas trop restrictive. En ce qui concerne le substrat, son épaisseur de près de 400  $\mu\text{m}$  est assimilable à l'infini comparée à l'épaisseur du puits. Par contre, un problème peut se poser pour le calcul du vecteur moyen d'écran  $k_M$ : prendre une fraction volumique de 1/2 n'est bien évidemment pas équivalent à la fraction 500Å/400 $\mu\text{m}$ .

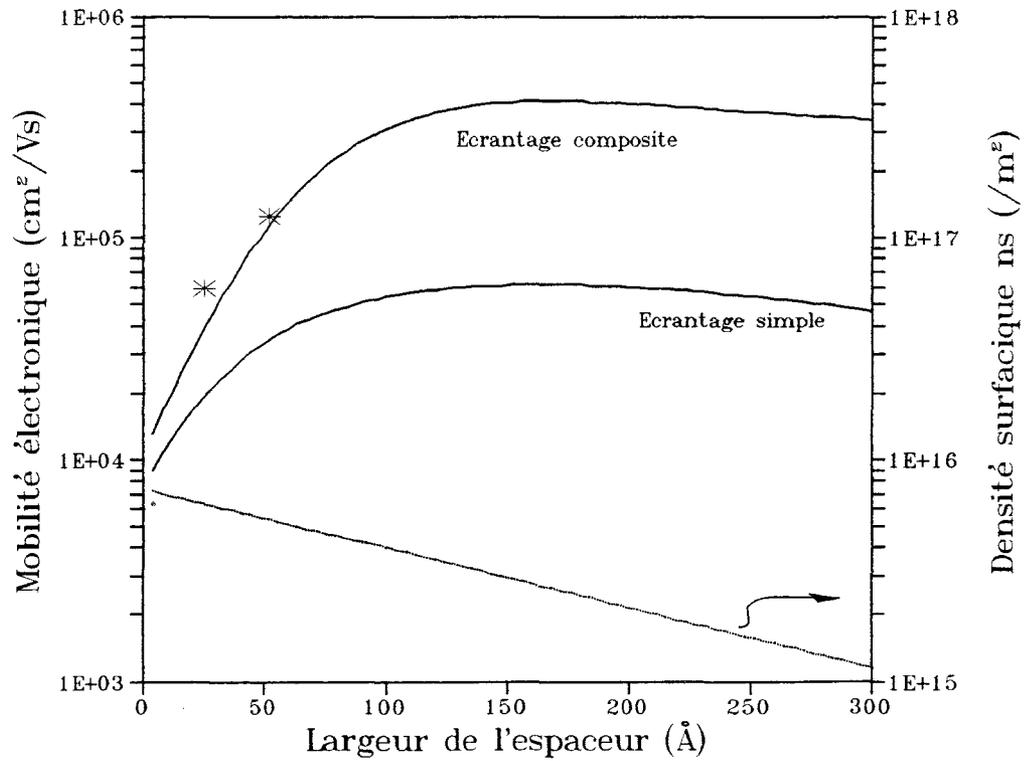
#### IV.2.2 - Exemple: le cas des impuretés ionisées

Dans l'annexe C, l'utilisation de notre formalisme pour décrire l'écrantage des potentiels diffuseurs par la réponse du milieu composite est illustrée dans le cas de la diffusion par des impuretés ionisées dans une structure où la couche d'alimentation est faiblement dopée (figure.2 de l'annexe). On montre alors que la couche d'alimentation est le seul milieu participant à la valeur du vecteur d'écran moyen (ici de type Debye-Hückel). Les mobilités calculées avec les deux types d'écrantage, modèle d'écrantage simple et modèle composite, sont alors légèrement différents.

Dans le cas des structures que nous étudions, la couche d'alimentation étant dégénérée, le vecteur d'écran est du type Thomas-Fermi (indépendant de la température):

$$k_M^2 = \frac{V_{\text{alim}}}{V_{\text{struc}}} k_{\text{TF}}^2 = \frac{V_{\text{alim}}}{V_{\text{struc}}} \frac{m^* e^2}{2\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_{2D}} (3\pi^2 N_D)^{1/3}$$

\* valeurs expérimentales



*Figure IV.2*

Evolution de la mobilité électronique en fonction de la largeur de l'espaceur  $d$  calculée à partir du modèle d'écrantage composite et du modèle d'écrantage par le gaz 2D.

$$D_{resid} = 2 \text{ E}+9 \text{ /cm}^2, \quad N_d = 1 \text{ E}+18 \text{ /cm}$$

où, nous avons considéré que les impuretés de dopage sont pratiquement toutes ionisées:  $N_D(T) = N_D = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ .

Selon que l'on considère, pour le calcul de  $k_M^2$ , une couche d'alimentation semi-infinie ou réaliste ( $V_{\text{alim}}/V_{\text{struc}} \approx 500\text{\AA}/400\mu\text{m} \approx 10^{-4}$ ), la constante d'écran aura un effet significatif ou très peu d'effet sur la fonction d'écrantage.

L'évolution de la mobilité électronique, limitée par la diffusion associée aux impuretés ionisées, en fonction de la largeur de l'espaceur, est présentée sur la figure IV.2. La variation de la densité de porteur transférée dans le puits  $n_s$  a été prise en considération. L'analyse de ces résultats montre que les deux approches sont très différentes: par rapport au modèle d'écrantage composite, employé avec  $k_M^2 = k_{\text{TF}}^2/2$ , le modèle d'écrantage simple surestime de près d'un ordre de grandeur l'efficacité de la diffusion par les impuretés ionisées.

Les ordres de grandeur de la mobilité électronique déduits du modèle d'écrantage composite sont, pour des densités d'impuretés ionisées habituelles (dopage  $10^{18} \text{cm}^{-3}$  et densité d'impuretés résiduelles de  $2 \cdot 10^9 \text{cm}^{-2}$ ), très voisins des résultats expérimentaux communément obtenus sur des structures où seule la diffusion par ces impuretés ionisées prédomine (Lee et al. 1983). Il est manifeste que l'écrantage des potentiels diffuseurs par la simple réponse diélectrique du gaz 2D ne soit pas suffisant. Certains auteurs ont par ailleurs déjà fait remarquer que le modèle classique d'écrantage surevaluait la diffusion par les impuretés ionisées (Van Hall 1987, Lasnig 1987, Ridley 1988) et proposé pour en rendre compte d'autres approches, différentes de la nôtre.

A titre d'illustration, nous avons reporté sur la figure IV.2 quelques valeurs expérimentales des mobilités mesurées sur nos échantillons provenant d'hétérostructures de type GaAlAs/GaAs (tableau III.1). Les valeurs sont en parfait accord avec les estimations tirées du modèle composite avec  $k_M^2 = k_{\text{TF}}^2/2$ . Les estimations tirées à partir d'un modèle d'écrantage simple auraient été inadaptées ainsi que, paradoxalement, celles calculées avec le modèle d'écrantage composite utilisant une constante d'écran plus réaliste:  $k_M^2 = 10^{-4} k_{\text{TF}}^2$ . Ceci nous permet de justifier, de fait, l'emploi ultérieur dans les expressions des potentiels diffuseurs effectifs, de l'écrantage composite avec une constante d'écran égale à  $k_{\text{TF}}^2/2$ .

### IV.3 - Potentiels diffuseurs indépendants et règle de Matthiessen

Soit une distribution de centres diffuseurs constitués d'un ensemble de familles (repérées par l'indice  $j$ ) contenant chacune un ensemble de défauts (repérés par l'indice  $i$ ) auxquels sont associés les potentiels diffuseurs nus  $V_{ij}(r)$ . Le potentiel diffuseur total sera la somme de tous ces potentiels individuels:

$$V(r) = \sum_{ji} V_{ij}(r) = \sum_{ji} V_j(r-R_{ij})$$

où  $R_{ij}$  représente la position du défaut  $i$  de la catégorie  $j$  alors que  $V_j$  correspond au potentiel individuel lié à un seul défaut de type  $j$ , placé à l'origine des coordonnées  $(0,0)$ .

La transformée de Fourier de ce potentiel est donnée par

$$V(q) = \sum_j \left[ V_j(q) \sum_i e^{iqR_{ij}} \right]$$

Le module carré du potentiel total s'écrit simplement:

$$|V(q)|^2 = \sum_{ijkl} V_j(q) V_l(q) e^{iq(R_{ij}-R_{kl})}$$

Dans le cas de familles de défauts indépendantes les unes des autres, il n'y a pas de terme de corrélation et  $|V|^2$  est simplement la somme:

$$|V(q)|^2 = \sum_j |V_j(q)|^2 \sum_{ik} e^{iq(R_{ij}-R_{kj})}$$

Dans la suite nous appellerons facteur de sous-structure la double somme d'exponentielles.

Pour une catégorie de défauts  $j$ , si chaque centre diffuseur  $i$  peut être considéré comme indépendant et s'il est possible d'exprimer le potentiel individuel associé, le module carré du potentiel diffuseur sera simplement  $D$  fois le module carré du potentiel diffuseur individuel où  $D$  est la densité du défauts:

$$|V(q)|^2 = D |V_{\text{ext}}(q)|^2$$

d'où;

$$|V(q)|^2 = \sum_j D_j |V_j(q)|^2 \quad (\text{IV.15})$$

Dans certains cas singuliers, l'expression ne sera pas aussi simple: une distribution périodique d'une classe de défauts conduirait par exemple à un facteur de sous-structure proportionnel à  $D^2$ .

Dans le cas où le potentiel diffuseur est une fluctuation (comme c'est par exemple le cas de celui associé à de la rugosité d'interface ou à du désordre d'alliage), le facteur de sous-structure devenant délicat à estimer, le problème est traité différemment en introduisant une fonction de corrélation (Voir § IV.6).

Compte tenu de la linéarité de l'expression de  $|V(q)|^2$  (relation (IV.15)), le tenseur fréquences de collision global  $1/\tau(\mathbf{k})$ , qui est proportionnel à ce module carré, est simplement égal à la somme des tenseurs fréquences de collision  $1/\tau^j(\mathbf{k})$  que l'on peut associer à chaque type de défaut. Ses composantes propres s'écrivent:

$$\frac{1}{\tau_{xx}(\mathbf{k})} = \sum_j \frac{1}{\tau_{xx}^j(\mathbf{k})}$$

et

$$\frac{1}{\tau_{yy}(\mathbf{k})} = \sum_j \frac{1}{\tau_{yy}^j(\mathbf{k})}$$

(IV.16)

Ces relations constituent la loi de Matthiessen. Pour des centres diffuseurs isotropes, on montre facilement, dans le cas des systèmes métalliques ou des systèmes portés à température très faible, que la loi de Matthiessen vérifiée par les temps de collision est également valable pour l'inverse des mobilités:

$$\frac{1}{\mu_{totale}} = \sum_j \frac{1}{\mu^j}$$

Cependant, dans le cas de centres diffuseurs anisotropes, cette dernière loi n'est plus valable, comme nous le montrerons ultérieurement sur l'exemple particulier des dislocations.



## IV.4 - Mécanismes de diffusion associés aux dislocations

L'expression de la fréquence de collision associée à un mécanisme de diffusion quelconque, calculée dans le cadre du formalisme précédent, montre que seule la connaissance de la transformée de Fourier du potentiel diffuseur "non écranté" d'un centre diffuseur est nécessaire au calcul de sa fréquence de collision. Ceci introduit une simplification importante dans le cas des mécanismes de diffusion associés aux dislocations dont les expressions deviennent très vite complexes.

De manière générale les dislocations introduisent deux catégories de mécanismes de diffusion: la première est liée à la structure de coeur des dislocations tandis que la seconde est liée à leur champ de déformation  $\bar{\epsilon}$ .

Dans ce qui suit, conformément aux observations faites au sujet des sous-structures de défauts linéaires présentes dans les structures étudiées (cf. chapitre III), nous modélisons des dislocations exclusivement parallèles et de même nature (dislocations ayant toutes le même vecteur de Burgers, de type  $60^\circ$ ).

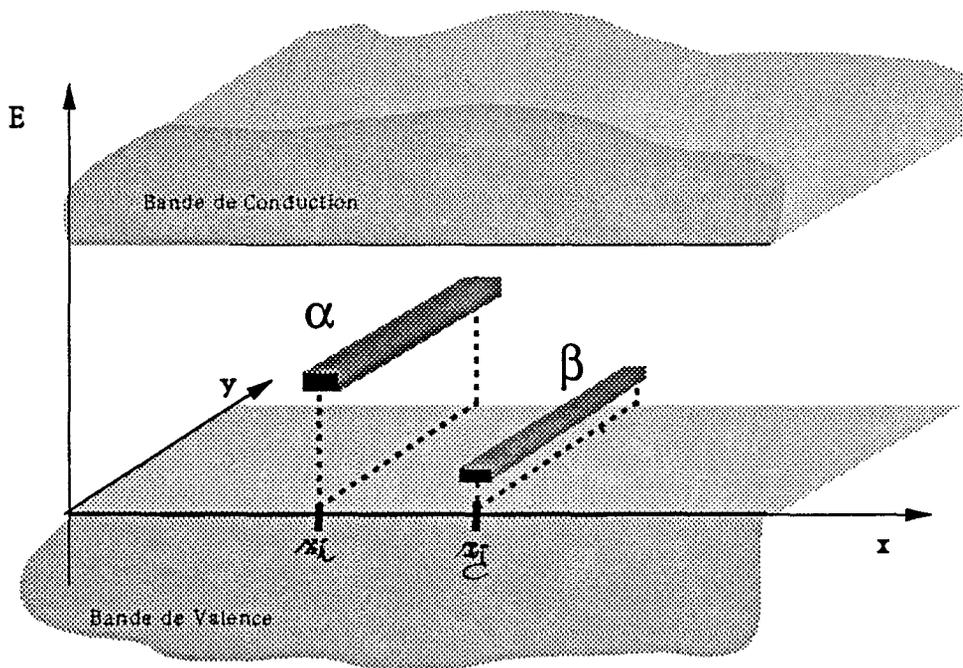
La direction de croissance (normale au puits quantique) restera notée (Oz), tandis que la direction des dislocations sera notée (Oy). La dernière direction, définissant un trièdre trirectangle, sera notée (Ox). Les dislocations sont supposées distribuées aléatoirement aux positions  $R_i=(x_i, z_i)$  (figure IV.3) dans le puits et hors du puits. Nous considérons séparément ces deux catégories de dislocations: on notera  $D_s$  la densité des dislocations contenues dans le système électronique bidimensionnel (dislocations d'interface) et  $D_v$  la densité des dislocations réparties en volume de part et d'autre du système 2D (dislocations extérieures).

Dans les deux sections suivantes les potentiels sont exprimés pour une dislocation de longueur infinie (cas extrême) située à l'origine ( $x=0, z=0$ ).

### IV.4.1 - Effet de coeur ou diffusion coulombienne

Chaque dislocation correspond à un défaut de réseau présentant dans sa région de coeur des orbitales hybrides non appariées et des distorsions de liaisons covalentes (figure IV.4).

Dans le cas des dislocations à caractère purement coin, la coordinence des atomes de coeur est inférieure à celle des atomes d'un cristal parfait. Il en résulte, a priori



**Figure IV.5** - "Niveaux d'énergie 1D" associés aux dislocations  $60^\circ$   $\alpha$  et  $\beta$  dans le GaAs. schématisation de niveaux neutres.

des liaisons  $sp^3$  non appariées pouvant localiser leurs états d'énergie propre dans la bande interdite du semiconducteur. L'existence de telles bandes d'énergie (unidimensionnelle de par la nature linéaire de la dislocation) a été clairement démontrée par l'expérience dans le cas des dislocations  $60^\circ$  du Silicium, ainsi que dans le cas des dislocations  $60^\circ \alpha$  et  $\beta$  de GaAs (figure IV.5; Jones et al. 1981, Vignaud and Farvacque 1989). Cependant, aucun type d'expérience classique (photoluminescence, absorption optique...) ne permet de mettre en évidence de façon directe l'existence de ces niveaux extrinsèques. Les données publiées sont en fait déduites de l'expérience par analyse d'effets indirects tels que l'influence des dislocations sur la densité ou la mobilité des porteurs libres, la présence d'un effet Franz Keldysh important sur les courbes d'absorption optique ou encore l'observation de pics non gaussiens en DLTS. Les différents modèles théoriques existant ne semblent pas s'accorder sur une position bien définie.

Dans le cas du massif, le coeur des dislocations peut être reconstruit et les états extrinsèques de la dislocation peuvent être résonnant avec le continuum d'énergie. L'existence de tels niveaux n'est donc pas systématique dans le cas des milieux 3D. Si de tels états existent, chacun ne pourra accommoder qu'au plus deux électrons par atome de coeur (saturation de l'orbitale hybride  $sp^3$ ). Suivant les conditions de dopage et de température, les niveaux sont plus ou moins ionisés. Les porteurs (électrons ou trous) piégés le long d'une dislocation sont en interaction électrostatique ce qui conduit à une autorégulation de la charge piégée. De façon rigoureuse, la détermination de la charge piégée et du potentiel électrostatique associé  $V_{\text{coeur}}$ , dans l'hypothèse d'un décalage rigide du spectre d'énergie du cristal d'une quantité  $eV_{\text{coeur}}$ , se fait de façon autocohérente (Diallo 1990, Ferré 1990) en résolvant les équations de Poisson et de neutralité électrique.

Les distorsions des liaisons covalentes au voisinage des atomes de coeur peuvent également conduire à une certaine localisation (unidimensionnelle) d'états électroniques au voisinage immédiat des bandes de valence et de conduction. La densité d'états par atome n'est plus limitée à deux, mais il est probable que de tels états électroniques entrent très rapidement en résonance avec les bandes de valence et de conduction du cristal à proximité desquels ces états sont créés.

Si l'existence de bandes d'énergie associées aux dislocations dans le cas de matériaux massifs n'est pas systématique à cause des possibilités de reconstruction des coeurs, *il n'en est pas de même dans le cas des systèmes 2D*. En

effet, il est possible de montrer théoriquement que pour tout système de dimensionnalité inférieure à 3 (voir Economou 1990), donc pour les puits quantiques ou pour les lignes quantiques, tout potentiel attractif local résulte nécessairement en la présence d'états localisés situés bien évidemment sous les états libres du gaz 2D ou 1D. De plus, ceux-ci peuvent exister dans la couche, même si les dislocations qui leur donnent naissance ne sont pas particulièrement situées dans la couche.

Dans un cas comme le nôtre, où les segments de dislocations qui ont donné naissance à ces états localisés sont tous parallèles à une même direction cristallographique, les états localisés adopteront une distribution spatiale unidimensionnelle et conduiront à des potentiels diffuseurs anisotropes. Les potentiels associés aux dislocations, qui donnent naissance aux états localisés du puits, peuvent non seulement dépendre de la structure de coeur des dislocations mais également des potentiels liés aux champs de contraintes qui seront décrits dans les prochaines sections. Dans ce cas, la densité moyenne  $\lambda$  de ces états localisés rapportée à l'écartement  $b$  (module du vecteur de Burgers) entre deux atomes de coeur n'est plus nécessairement limitée à 2 et devient un paramètre ajustable du problème.

Tout ceci n'empêche aucunement l'existence de lignes chargées dans les couches voisines (milieux 3D) du puits quantique. Leur état de charge dépendra entre autre du dopage du milieu où elles se situent. Dans une première approche, nous considérons que toutes les dislocations extérieures possèdent la même densité linéique de charge  $\lambda_{3D}$ .

La densité volumique de charge associée à une dislocation donnée, dirigée suivant un axe  $Oy$ , est donc simplement donnée par:

$$\rho_c(r) = \lambda_{iD} \delta(x) \delta(z) \quad i=2 \text{ ou } 3$$

La transformée de Fourier de l'équation de Poisson (incluant la constante diélectrique  $\epsilon_r$ ) associée à cette densité conduit à l'expression du potentiel de diffusion coulombien suivant:

$$V_c(q) = C_{iD} \frac{\delta(q_y)}{q^2} \quad (\text{IV.17})$$

où l'on a posé

$$C_{iD} = \frac{2\pi \lambda_{iD}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad i=2 \text{ ou } 3$$

#### IV.4.2 - Effets dus au champ de déformation

Il existe deux mécanismes de diffusion liés au champ de déformation hétérogène créé par une dislocation.

##### IV.4.2.1 - Effet du potentiel de déformation

Le champ de déformation associé aux dislocations est responsable d'un déplacement hétérogène des différentes mailles du réseau cristallin. Ce déplacement résulte en l'apparition d'un potentiel cristallin qui ne possède plus la périodicité du cristal parfait et joue donc le rôle d'un potentiel diffuseur pour les électrons libres. Par analogie avec le potentiel de déformation introduit par Bardeen et Shockley (1950) pour l'étude de la diffusion des porteurs libres par les phonons, Dexter et Seitz (1952) ont associé un potentiel de déformation à la dilatation locale introduite par le champ de déformation des dislocations (coin). Pour un semiconducteur à gap direct, le potentiel est donné au point  $r$  par :

$$V_{\text{def}}(\mathbf{r}) = E_1 \cdot \text{tr}(\bar{\bar{\epsilon}}(\mathbf{r}))$$

où  $E_1$  est la constante de déformation (déterminée de façon expérimentale sur des matériaux déformés de façon homogène).

Il est raisonnable de considérer que les caractéristiques élastiques de toutes les couches constituant les hétérostructures sont identiques. Il est alors permis d'utiliser les formules associées aux matériaux massifs en choisissant pour les matériaux constituant les différentes parties de l'hétérostructure les constantes élastiques de GaAs. En particulier, en faisant l'hypothèse que les matériaux sont élastiquement isotropes, on peut admettre que le coefficient de Poisson vaut  $\nu=1/3$ . Dans un tel cas, la dilatation locale introduite par le champ de déformation d'une dislocation est donnée par

$$\text{tr}(\bar{\bar{\epsilon}}(\mathbf{r})) = \frac{b_c}{4\pi} \frac{\sin\theta}{r}$$

où  $\theta$  est l'angle  $(\mathbf{r}, \mathbf{b}_c)$ , et  $b_c$  est la composante coin du vecteur de Burgers, et l'expression de la transformée de Fourier du potentiel de déformation est :

$$V(\mathbf{q}) = D \frac{\sin\phi}{q} \delta(q_y) \quad (\text{IV.18})$$

où, cette fois,  $\phi$  est l'angle  $(\mathbf{q}, \mathbf{b}_c)$ , et où on a posé :  $D = -i \pi \frac{E_1 b_c}{2}$ .

Dans l'espace réciproque, l'expression du potentiel de déformation est purement imaginaire et est donc en opposition de phase avec le potentiel de coeur. Ces deux potentiels agiront ainsi indépendamment.

#### IV.4.2.2 - Effet piezoélectrique

Outre la modification apportée aux positions des mailles cristallines qui donnent naissance au potentiel de déformation, le champ de déformation de la dislocation modifie également la position relative des différents atomes constituant la maille primitive (motif et agencement des motifs). Du fait du caractère ionique des atomes constitutifs dans les matériaux non centrosymétriques (composés III-V par exemple), cette déformation de la maille élémentaire induit l'existence de dipôles électriques dont la résultante macroscopique constitue l'effet piezoélectrique. A la polarisation  $\vec{P}(r)$  induite est associé un potentiel piezoélectrique  $V_{\text{piez}}(r)$ . Dans le cas d'une contrainte hétérogène, ce potentiel piezoélectrique joue également le rôle d'un potentiel diffuseur.

Le mécanisme de diffusion associé au champ de déformation des dislocations par couplage piezoélectrique fut envisagée pour la première fois en 1964 par Merten et fut étudié expérimentalement par Faivre et Saada dans le cas du tellure (1972) et par Ferré dans le cas de InSb et de GaAs (1987). Dans l'approximation linéaire de Voigt, les tenseurs de contrainte et de déformation, les champs électrique et excitation électrique sont reliés par les tenseurs élastique  $\overset{\equiv}{c}$ , piezoélectrique  $\overset{\equiv}{e}$  et diélectrique  $\overset{\equiv}{\chi}$  du matériau selon les expressions suivantes:

$$\overset{\equiv}{\sigma} = \overset{\equiv}{c} : \overset{\equiv}{\varepsilon} + \overset{\equiv}{e} \cdot \vec{E}$$

$$\vec{D} = \overset{\equiv}{e} : \overset{\equiv}{\varepsilon} - \overset{\equiv}{\chi} \cdot \vec{E}$$

De manière générale, on montre que le terme piezoélectrique  $\overset{\equiv}{e} \cdot \vec{E}$  contribue de façon négligeable à la valeur du tenseur des contraintes. La première équation peut donc être résolue en faisant l'approximation que le matériau n'est pas piezoélectrique, ce qui permet d'utiliser les résultats standards exprimant le champ de déformation  $\overset{\equiv}{\varepsilon}$  associé aux dislocations. La densité de charge piezoélectrique (non écrantée) induite au voisinage de la dislocation est donc simplement donnée par:

$$\rho(r) = \text{div}(\vec{D}) = \text{div}(\overset{\equiv}{e} : \overset{\equiv}{\varepsilon})$$

Enfin, la transformée de Fourier du potentiel non écrané associé à cette distribution de charge est donnée par

$$V_{\text{piez}}(q) = -i \frac{\bar{q} \cdot \bar{e} \cdot \bar{\varepsilon}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r q^2}$$

Le calcul du potentiel piezoélectrique associé aux dislocations coins dans le cas des composés III-V a été effectué par Vignaud, Ferré et Farvacque (1984). Ces auteurs ont montré que l'on pouvait négliger l'anisotropie élastique de ces matériaux et que dans ce cas, avec  $\nu=1/3$ , on obtient

$$V_{\text{piez}}(q) = \frac{\sqrt{6}}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} \pi b_c e_{14} \frac{f(\phi)}{q^2} \delta(q_y)$$

où  $e_{14}$  est la composante (1.4) du tenseur piezoélectrique,  
 $b_c$  est la composante coin du vecteur de Burgers,  
 $f(\phi)$  est une fonction décrivant la dépendance angulaire du potentiel dans un plan perpendiculaire à la ligne de dislocation.

$$f(\phi) = \frac{1}{4} \sin(4\phi) + \frac{5}{4\sqrt{2}} \cos(4\phi) - \frac{1}{6} \sin(2\phi) - \frac{1}{3\sqrt{2}} \cos(2\phi) \quad (\text{IV.19})$$

On écrira le potentiel piezoélectrique sous la forme:

$$V_{\text{piez}}(q) = P \frac{f(\phi)}{q^2} \delta(q_y) \quad (\text{IV.20})$$

où on a posé la constante:

$$P = \frac{\sqrt{6}}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} \pi b_c e_{14}$$

Comme le montrent les relations précédentes, la transformée de Fourier du potentiel piezoélectrique  $V_{\text{piez}}(q)$  est réelle. Ce potentiel sera donc découplé du potentiel de déformation. Par contre, le module carré du potentiel total que l'on peut associer à chaque dislocation contiendra un terme croisé entre le potentiel de coeur et le potentiel piezoélectrique:

$$|V_{\text{ext}}^{\text{indiv}}(q)|^2 = |V_{\text{coe}}(q) + V_{\text{piez}}(q)|^2 + |V_{\text{def}}(q)|^2$$

soit:

$$|V_{\text{ext}}^{\text{indiv}}(q)|^2 = \frac{\delta(q_y)L_y}{2\pi q^2} |C + Pf(\phi)|^2 + |Dq \sin\phi|^2$$

### IV.4.3 - Potentiels écrantés

Dans le formalisme tenant compte de l'écrantage par le matériau composite, le module carré du potentiel écranté total s'écrit d'après la relation (I.14):

$$|V_{\text{eff}}(q_{//}, z=0)|^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^2 q'^2 dq_z dq'_z}{(q^2 + k_M^2)(q'^2 + k_M^2)} V_{\text{tot}}^{\text{ext}}(q) V_{\text{tot}}^{\text{ext}*}(q')}{4\pi^2 \left(1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}}\right)^2}$$

où:

$$V_{\text{tot}}^{\text{ext}}(q) = V_{\text{indiv}}^{\text{ext}}(q) \sum_j e^{i q_x x_j} e^{i q_z z_j}$$

avec

$$V_{\text{indiv}}^{\text{ext}}(q) = V_{\text{coe}}(q) + V_{\text{piez}}(q) + V_{\text{def}}(q)$$

en explicitant la contribution de chaque potentiel individuel:

$$|V_{\text{eff}}(q_{//}, z=0)|^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^2 q'^2 dq_z dq'_z}{(q^2 + k_M^2)(q'^2 + k_M^2)} V_{\text{indiv}}^{\text{ext}}(q) V_{\text{indiv}}^{\text{ext}*}(q') \sum_{jk} e^{i q_x (x_j - x_k)} e^{i (q_z z_j - q'_z z_k)}}{4\pi^2 \left(1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}}\right)^2}$$

Pour des distributions aléatoires des dislocations d'interface ou de dislocations extérieures, il n'existe statistiquement aucun couplage entre les potentiels associés aux différentes dislocations. Le facteur de sous-structure se résume à un terme:  $N_v \cdot \delta_{q,q'}$  pour les dislocations extérieures et un terme:  $N_s \cdot \exp(i(q_z - q'_z) \cdot z_1)$  pour les dislocations d'interface;  $N_v$  et  $N_s$  représentent respectivement le nombre de dislocations de chaque catégorie et  $z_1$  est la côte où se situe le système bidimensionnel.

On pose:  $|V_{\text{eff}}(q_{//})|^2 = |V_{\text{vol}}^{\text{eff}}(q_{//})|^2 + |V_{\text{interf}}^{\text{eff}}(q_{//})|^2$  où les deux contributions correspondant aux deux catégories de dislocations ont été séparées. Dans le cas des dislocations extérieures, l'intégration par rapport à  $q'$  peut être remplacée par une somme judicieusement pondérée par la fonction densité  $2\pi/L_z$ .

Puisque:  $L_x \cdot D_v = N_v / L_z$ , le module carré du potentiel diffuseur associé aux dislocations extérieures est finalement donné par:

$$\left| V_{\text{eff}}^{\text{volume}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{L_x D_v}{2\pi \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^4 |V_{\text{vol}}^{\text{ext}}(q)|^2 dq_z}{(q^2 + k_M^2)^2} \quad (\text{IV.21})$$

Pour les dislocations d'interface, aucune simplification n'est autorisée; on posera simplement  $z_1 = 0$ :

$$\left| V_{\text{eff}}^{\text{interface}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{L_x D_s}{4\pi^2 \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)^2} \cdot \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^2 V_{\text{surf}}^{\text{ext}}(q) dq_z}{q^2 + k_M^2} \right|^2 \quad (\text{IV.22})$$

En remplaçant les potentiels  $V_{\text{ext}}$  par leur expression, il est possible, comme le montre l'annexe C, de réaliser les différentes intégrales de façon analytique. Les potentiels  $|V_{\text{vol}}^{\text{eff}}(q)|^2$  et  $|V_{\text{interf}}^{\text{eff}}(q)|^2$  (le symbole " $_{//, z=0}$ ", indiquant qu'il s'agit de la composante dans le plan (Oxy) n'est plus précisé) y sont donnés, par les expressions (C.1) et (C.2), mais aussi à titre d'exemple dans le cas  $k_M = 0$ , par les expressions (C.3) et (C.4).

Finalement, ces résultats montrent que le potentiel diffuseur associé aux distributions de dislocations s'écrit:

$$|V_{\text{eff}}(q)|^2 = \left[ |V_{\text{Coeur}}^{\text{eff}}(q)|^2 + |V_{\text{Défor}}^{\text{eff}}(q)|^2 \right]_{\text{vol}} + \left[ |V_{\text{Coeur}}^{\text{eff}}(q)|^2 + |V_{\text{Défor}}^{\text{eff}}(q)|^2 \right]_{\text{interf}} \quad (\text{I.23})$$

où chacun des modules carrés peut se mettre sous la forme:

$$\begin{aligned} |V_{\text{type}}^{\text{eff}}(q)|^2 &= \delta(q_y) |V_{\text{type}}^{\text{eff}}(q_x)|^2 \\ &= \delta(q_y) \frac{D_s \text{ ou } v}{2\pi \left[ 2\sqrt{q^2 + k_M^2 + \beta} \right]^2} W_{\text{type}}(q_x) \end{aligned}$$

Les expressions des quantités  $W_{\text{type}}(q_x)$  sont données dans l'annexe C.

## IV.5 - Résultats numériques

### IV.5.1 - Anisotropie des fréquences de collision

Les modules carrés des potentiels diffuseurs écrantés associés aux dislocations ont tous en commun une fonction de Dirac  $\delta(q_y)$  (relations (IV.25)). Ceci simplifie considérablement le calcul des fréquences de collision (relations (IV.8)).

Ainsi, le calcul de la fréquence de collision  $1/\tau_{yy}(\mathbf{k})$  est trivial: la fréquence de collision associée à la direction parallèle aux dislocations est identiquement nulle. Nous la notons dorénavant  $1/\tau_{//}(\mathbf{k})$ :

$$\frac{1}{\tau_{yy}(\mathbf{k})} = \frac{1}{\tau_{//}(\mathbf{k})} = 0 \quad (\text{IV.24})$$

Ceci signifie que dans tout système (le raisonnement reste valable dans le massif) contenant uniquement des défauts de type linéaire *infinis* et tous orientés suivant la même direction, il ne se produit aucun phénomène de diffusion associé aux défauts linéaires lorsque le transport des porteurs libres s'effectue parallèlement à ces défauts.

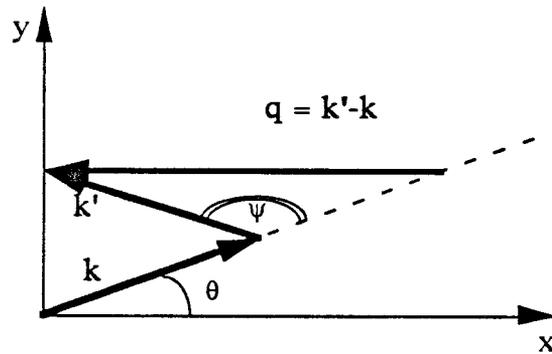
La détermination de la composante  $1/\tau_{xx}(\mathbf{k})$ , ou  $1/\tau_{\perp}(\mathbf{k})$ , donnée par:

$$\frac{1}{\tau_{\perp}(\mathbf{k})} = \frac{2m^*e^2}{\pi\hbar^3} \frac{1}{\cos^2(\theta)} \int |V_{\text{eff}}(q_x)|^2 \sin^2(\psi/2) \sin^2(\theta+\psi/2) \delta(q_y) \delta(k'^2-k^2) d^2\mathbf{k}'$$

où  $\psi$  est l'angle séparant  $\mathbf{k}$  de  $\mathbf{k}'$  et  $\theta$  l'angle  $(Ox, \mathbf{k})$ , n'est pas plus compliquée.

En effet, la présence de la seconde fonction de Dirac traduisant la conservation du module du vecteur  $\mathbf{k}$  après diffusion  $\delta(k'^2-k^2)$  (utilisation de l'approximation de la masse effective  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ ), permet un calcul immédiat sans aucune intégration. La seule orientation du vecteur  $\mathbf{k}'$  autorisée après diffusion (figure IV.6) est celle symétrique à  $\mathbf{k}$  par rapport à la direction  $Oy$  (direction des dislocations). Cette situation correspond au cas  $\psi/2 + \theta = \pi/2$ . Les événements de diffusion ne correspondent qu'à des réflexions sur les défauts linéaires.

**Figure IV.6** - Unique orientation possible du vecteur d'onde  $k'$  après diffusion sur un défaut linéaire parallèle à la direction  $Oy$ .



De plus:

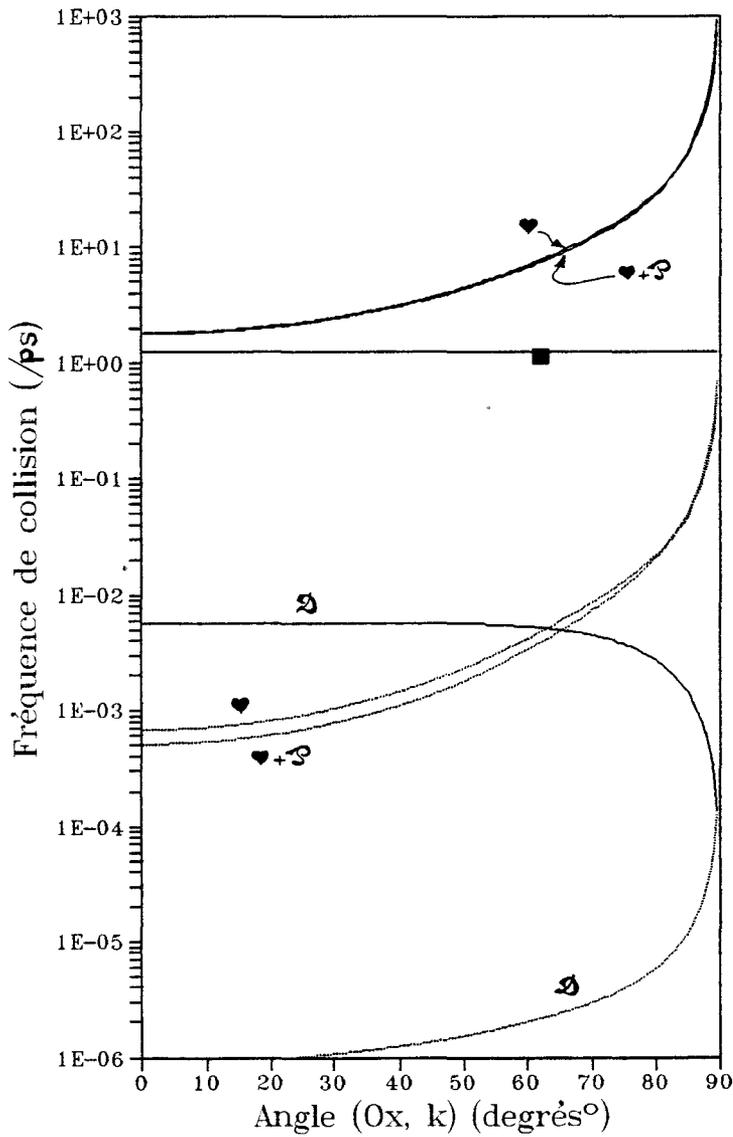
$$\begin{aligned} \delta(q_y) \delta(k'^2 - k^2) d^2k' &\Leftrightarrow \delta(k'_y - k_y) \delta(k_x'^2 - k_x^2) dk'_x dk'_y \\ \delta(q_y) \delta(k'^2 - k^2) d^2k' &\Leftrightarrow \delta(k_x'^2 - k_x^2) dk'_x = \delta(k_x'^2 - k_x^2) \frac{d(k_x'^2)}{2|k_x|} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{2|k_x|} = \frac{1}{2 k |\cos\theta|} \end{aligned}$$

Le temps de collision ne dépend que de la composante normale du vecteur d'onde:  $k_x = k \cdot \cos(\theta)$ :

$$\frac{1}{\tau_{\perp}(k)} = \frac{m^*e^2}{8\pi\hbar^3} \frac{1}{|\cos\theta|} \frac{|V_{\text{eff}}(2k|\cos\theta)|^2}{k} \tag{IV.25}$$

où le potentiel effectif total est donné par le relation (I.23) où  $2k\cos\theta$  a été substitué à  $q$  et le terme  $\delta(q_y)$  supprimé.

Le transport que nous simulons ayant lieu à très basse température, le module du vecteur d'onde intervenant dans les expressions du temps de collision correspond à celui du vecteur d'onde de Fermi:  $k = k_F = \sqrt{2\pi n_s}$  (dans le cas des systèmes bidimensionnels). Les temps  $\tau_{\perp}$  et  $\tau_{\parallel}$  dépendent uniquement de l'angle  $\theta$ :  $\tau_{\parallel}(k) = \tau_{\parallel}(\theta)$  et  $\tau_{\perp}(k) = \tau_{\perp}(\theta)$ .



*Figure IV.7*

Fréquences de collision  $1/\tau_c$  associées aux mécanismes de diffusion des dislocations de volume (.....) et d'interface (—) ( $D_v = 1E+6/cm^2$ ;  $D_s = 1E+3/cm$ )

- Référence
- ♥ Effet coulombien de coeur
- ♥.P Effet de coeur + effet piézoélectrique
- Ⓢ Effet du potentiel de déformation

Afin de disposer des expressions complètes des fréquences de collision décrivant l'ensemble des défauts présents dans le système étudié, il faut ajouter aux deux composantes  $1/\tau_{\perp}(\theta)$  et  $1/\tau_{\parallel}(\theta)$  associées à l'ensemble des dislocations, la fréquence de collision isotrope  $1/\tau_{iso}$  correspondant aux centres diffuseurs isotropes présents dans les structures de référence (l'éventuelle contribution associée à la rugosité 1D sera envisagée plus loin).

En ce qui concerne les hétérostructures de référence étudiées expérimentalement (voir chap III), le principal mécanisme de diffusion limitant la mobilité est soit le désordre d'alliage, soit la diffusion par les impuretés ionisées. Dans les structures de référence ayant un puits GaInAs, la mobilité est conditionnée par le désordre d'alliage; elle est de l'ordre de  $2,3 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour un puits de  $120\text{\AA}$  et de  $4 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour un puits de  $200\text{\AA}$ . Dans le cas des hétérostructures de référence de type GaAlAs-GaAs, le transport est essentiellement gouverné par la diffusion sur les impuretés ionisées: la mobilité est de l'ordre de  $5,9 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ .

Sachant que pour de tels centres diffuseurs isotropes la mobilité est reliée au temps de collision selon:  $\mu = e\tau/m^*$ , les fréquences de collision isotropes associées à chacune de ces trois catégories de structure sont de l'ordre de:

$$\begin{aligned} 1/\tau_{iso,\text{GaAlAs-GaAs}} &= 0,5 \text{ ps}^{-1} \\ 1/\tau_{iso,\text{Pseudo } 120\text{\AA}} &= 1,3 \text{ ps}^{-1} \\ 1/\tau_{iso,\text{Pseudo } 200\text{\AA}} &= 0,7 \text{ ps}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{IV.26})$$

Afin d'illustrer le caractère anisotrope des fréquences de collision  $1/\tau_{\perp}(\theta)$  associées aux différents mécanismes de diffusion induits par les dislocations, nous représentons sur le graphique IV.7 les évolutions des fréquences de collision en fonction de l'angle  $\theta = (\text{Ox}, \mathbf{k})$  pour un jeu de paramètres réalistes:

- densité linéique de charge  $\lambda$  correspondant à une charge  $e$  piégée tous les 5 sites inter-atomique suivant la direction  $\langle 110 \rangle$  ( $\lambda = e/5b$ , où  $b$  est le vecteur de Burgers),
- densité de porteur libres  $n_s = 4,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,
- densités de défauts:  $D_s = 10^3 \text{ cm}^{-1}$  et  $D_v = 10^6 \text{ cm}^{-2}$ .

La fréquence de collision  $1/\tau_{\perp}(\theta)$  totale est simplement la somme de toutes les contributions définies dans ce qui précède. L'analyse de ce graphique  $1/\tau_{\perp}(\theta) = f(\theta)$  permet ainsi de classer les différents mécanismes de diffusion selon leur efficacité et de définir celui qui conditionnera la mobilité.

Quelle que soit la localisation des dislocations (de volume ou d'interface), c'est le mécanisme de diffusion associé à la charge piégée par le coeur des dislocations qui prédomine, pourvu que cette charge  $\lambda$  ne soit pas insignifiante. Le potentiel piezoélectrique qui rappelons-le est couplé au potentiel coulombien n'apporte qu'une faible contribution à la fréquence de collision. La contribution associée au potentiel de déformation est totalement négligeable.

L'influence des dislocations extérieures, quel que soit le mécanisme de diffusion considéré, est complètement négligeable comparée à l'influence des dislocations d'interface, à moins de supposer que la densité de dislocations dans le volume est de plusieurs ordres de grandeur supérieure à la densité dans le puits, ce qui est difficilement concevable.

Il est cependant intéressant de remarquer que, ce modèle permet de simuler des situations réelles où la quantité de dislocations extérieures du puits, quel que soit leur caractéristiques, est non négligeable. Il est, par exemple, possible de décrire une structure de type métamorphique comportant une couche tampon dont une fraction contient un réseau serré de dislocations de désadaptation. Si le puits, bien que ne contenant aucune dislocation d'interface ne présente pas une très haute mobilité, il est possible que les dislocations présentes dans la couche tampon, en soient responsables.

Ces observations faites pour un jeu de paramètres  $n_s$ ,  $\lambda$  donné restent valables de façon générale: les variations et les positions relatives des différentes fréquences de collision sont conservées lorsque les paramètres  $n_s$  et  $\lambda$  sont modifiés.

En définitive, c'est l'effet des dislocations d'interface par l'intermédiaire de la charge piégée sur leurs coeurs, qui impose l'ordre de grandeur de la fréquence de collision associé à l'ensemble des dislocations. Il est du même ordre de grandeur

que celui associé au désordre d'alliage ou aux impuretés ionisées. On peut prévoir que cet effet de coeur conditionnera de façon efficace la mobilité électronique.

#### IV.5.2 - Anisotropie des mobilités électroniques

Nous rappelons l'expression des composantes principales  $\mu_{//}$  et  $\mu_{\perp}$  du tenseur mobilité électronique déduites plus haut:

$$\mu_{//} = \frac{e}{\pi m^*} \int_0^{2\pi} \cos^2(\theta) \tau_{//}(\theta) d\theta \quad \text{et} \quad \mu_{\perp} = \frac{e}{\pi m^*} \int_0^{2\pi} \cos^2(\theta) \tau_{\perp}(\theta) d\theta$$

avec

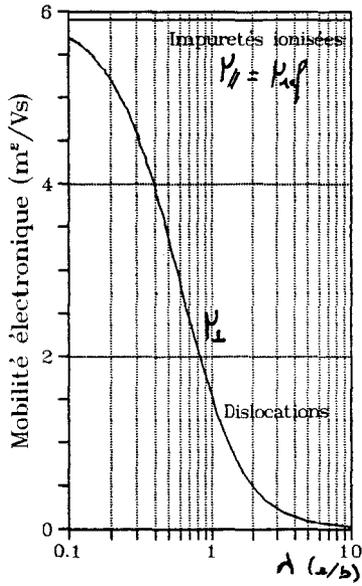
$$\frac{1}{\tau_{\perp \text{ ou } //}(\theta)} = \frac{1}{\tau_{\text{isotrope,ref}}} + \frac{1}{\tau_{\text{interf}}^{\perp \text{ ou } //}(\theta)} + \frac{1}{\tau_{\text{volume}}^{\perp \text{ ou } //}(\theta)} \quad (\text{IV.27})$$

Puisque la fréquence  $1/\tau_{//}(\theta)$  associée aux dislocations est identiquement nulle, le calcul de  $\mu_{//}$  est immédiat:

$$\mu_{//} = \mu_{\text{ref}}$$

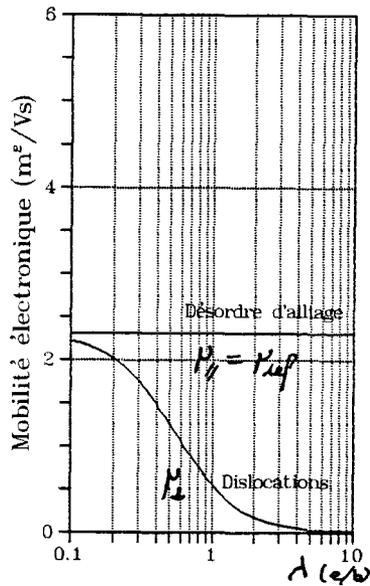
Ce modèle rend assez bien compte des mesures expérimentales. Cependant, la mobilité mesurée parallèlement aux défauts linéaires est, en pratique, légèrement affectée par la présence des dislocations. Notre modèle ne peut évidemment pas décrire cet effet qui est en parti lié à la longueur finie des défauts linéaires; longueur dont nous n'avons pas tenu compte ici. Une autre origine possible de la variation de mobilité mesurée parallèlement aux défauts est la présence, dans les échantillons, d'une faible densité de dislocations de direction et de nature différente de celles que nous avons considérées.

Compte tenu de la dépendance angulaire complexe du temps de collision  $\tau_{\perp}(\theta)$  le calcul analytique n'est plus possible; aussi, la mobilité  $\mu_{\perp}$  correspondante est calculée numériquement. Les seuls paramètres ajustables sont la densité linéique de charge  $\lambda$  (supposée identique pour les deux catégories de dislocations), la densité de porteurs libres  $n_s$  et les densités de dislocations  $D_s$  et  $D_v$ .



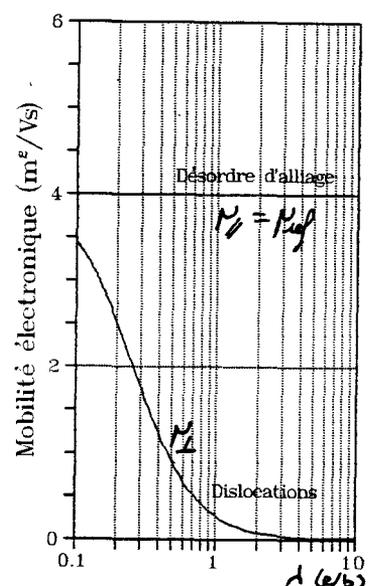
Echantillon déformé  
GaAlAs-GaAs

(a)



Echantillon déformé  
GaAlAs-GaInAs(120A)-GaAs

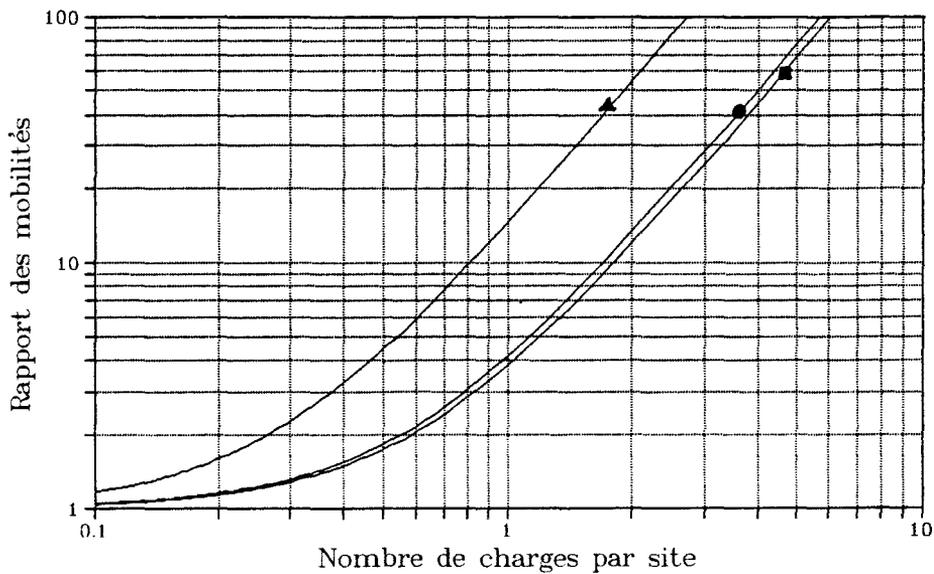
(b)



Echantillon plastiquement relaxé  
GaAlAs-GaInAs(200)-GaAs

(c)

**Figure IV.8** - Modélisation de la dégradation de la mobilité  $\mu_{\perp}$  en fonction de la charge piégée sur le coeur des dislocations  $\lambda$ . (voir le texte pour les paramètres)



**Figure IV.9** - Modélisation du rapport d'anisotropie  $\mu_{\parallel} / \mu_{\perp}$  en fonction de la charge piégée sur le coeur des dislocations  $\lambda$ . (voir le texte pour les paramètres)

Nous avons représenté sur la figure IV.8 l'évolution des composantes  $\mu_{\perp}$  et  $\mu_{//} = \mu_{\text{ref}}$  en fonction de la densité linéique de charge  $\lambda$ , pour les trois catégories d'échantillons étudiées. Le choix des paramètres est conforme à leurs caractéristiques respectives.  $\lambda$  est notée en unité réduite: elle exprime la quantité moyenne de porteurs de charge piégés par site sur le coeur d'une dislocation.

Echantillon GaAlAs-GaAs (figure IV.8-a):

- densité de porteurs libres  $n_s \approx 6,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ;
- densité de dislocations dans le puits estimée au plus à  $2 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-1}$ ;
- densité de dislocations de volume de  $10^4 \text{ cm}^{-2}$  dont la contribution est de toute façon négligeable;
- mobilité limitée par les impuretés ionisées  $\mu_{\text{imp. ion.}} = 5,9 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Echantillon pseudomorphique GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs (figure IV.8-b):

- densité de porteurs libres  $n_s \approx 4,15 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ;
- densité de dislocations dans le puits de  $2 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-1}$ ;
- densité de dislocations de volume de  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ ,
- mobilité limitée par le désordre d'alliage  $\mu_{\text{all}} = 2,3 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Echantillon pseudomorphique GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs (figure IV.8-c):

- densité de porteurs libres  $n_s \approx 4,6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ;
- densité de dislocations de désadaptation de réseau de  $10^3 \text{ cm}^{-1}$ ;
- mobilité limitée par le désordre d'alliage probable  $\mu_{\text{all}} = 4 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

L'évolution des mobilités  $\mu_{\perp}(\lambda)$  confirme qu'il se produit une dégradation de la mobilité, d'autant plus importante que la quantité de porteurs piégés est grande. La figure IV.9 reprend ces résultats en les présentant sous la forme du rapport d'anisotropie  $\mu_{//}/\mu_{\perp} = \mu_{\text{ref}}/\mu_{\perp}$  en fonction de  $\lambda$ . A partir de ces courbes il est a priori possible de reproduire les anisotropies de la mobilité mesurées expérimentalement dans les trois types d'échantillons étudiés, pour un choix de la densité de charge  $\lambda$  adéquat. Les valeurs de  $\lambda$  nécessaires à cette simulation sont résumés dans le tableau IV.1.

Dans le cas des échantillons déformés le choix de  $\lambda$  semble raisonnable: près d'une charge  $e$  piégée par site de coeur. Par contre, pour les échantillons plastiquement relaxés en cours de croissance, le rapport d'anisotropie des mobilités est très élevé

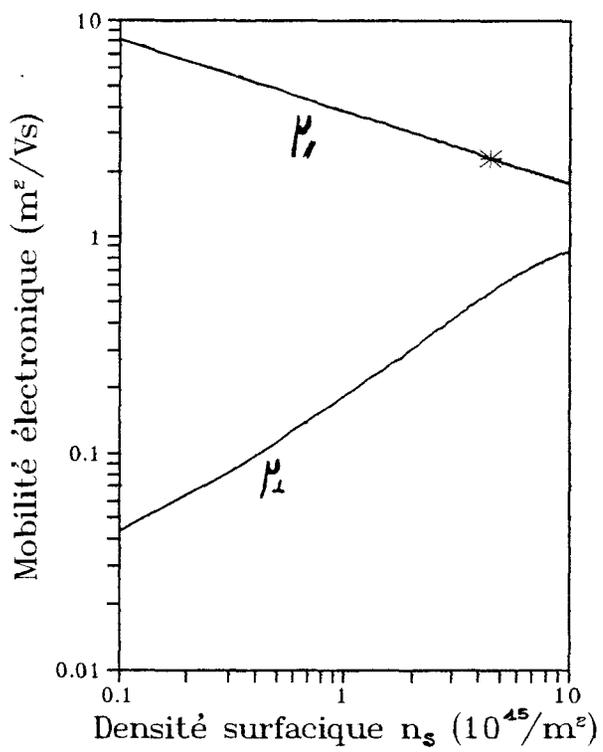


Figure IV.10

Evolution du tenseur mobilité en fonction de la densité de porteurs  $n_s$  dans un puits GaAs-GaInAs(120 Å)-GaAs.  $D_s = 2 \text{ E}+2/\text{cm}$ ,  $\lambda = e/b$ .

\* Valeur expérimentale

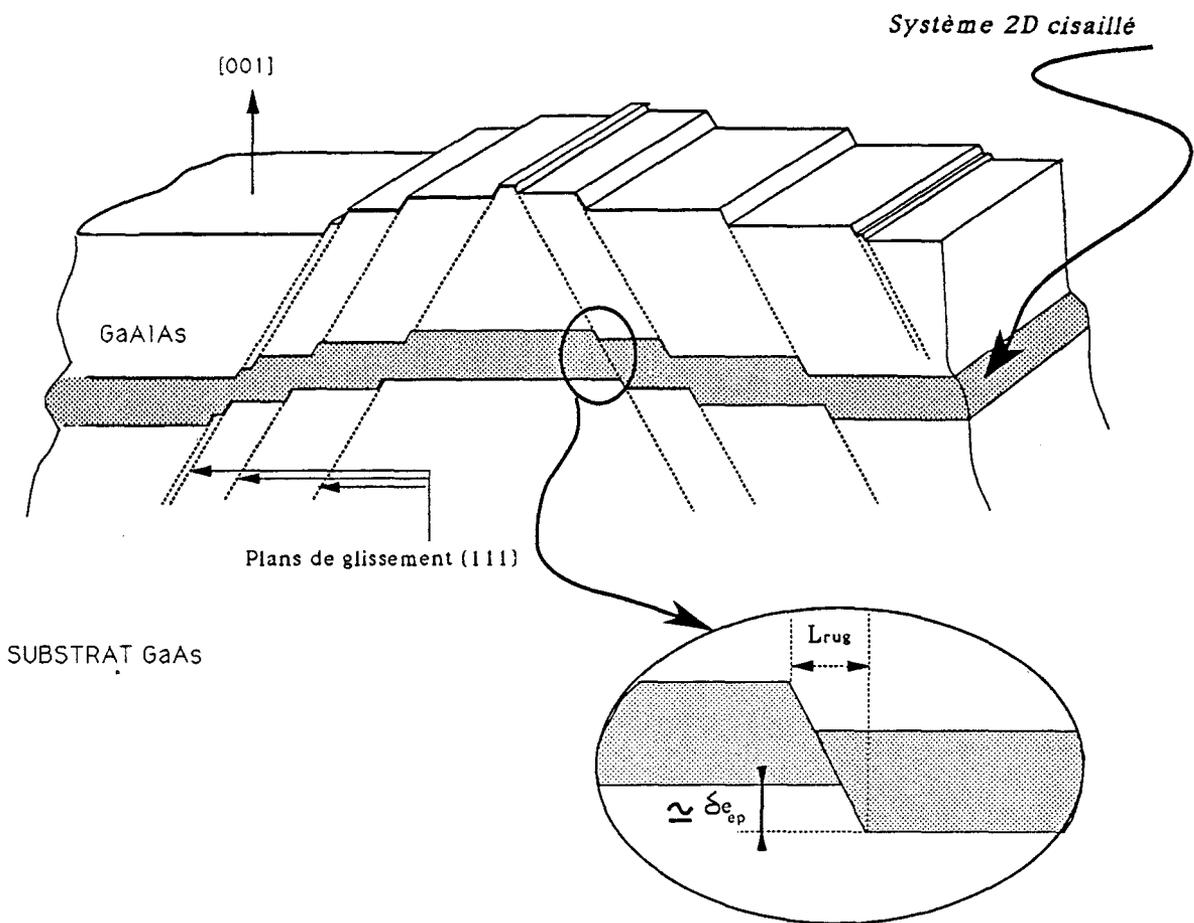
et ne peut être simulé que pour une valeur du paramètre  $\lambda$  irréaliste.

	Hétéro déformée	Pseudo déformée	Pseudo relaxée
$\mu_{//}/\mu_{\perp}$	3,5	5,6	160
$\lambda$	$\cong 0,9$	$\cong 1,2$	10 ???

Tableau IV.1

La figure IV.10 représente l'évolution de  $\mu_{//}$  et  $\mu_{\perp}$  en fonction de la densité de porteurs libres  $n_s$ , pour une densité de dislocations correspondant à celle de l'échantillon pseudomorphique GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs déformé et pour la densité linéique de charge ayant permis la simulation de l'anisotropie mesurée expérimentalement:  $\lambda = e/b$ .

La mobilité  $\mu_{//}$  évolue en fonction  $n_s$  de la même manière que la mobilité d'alliage  $\mu_{\text{all}}(n_s)$ : approximativement comme  $n_s^{-1/3}$  (cf. §I.3). On remarque que le rapport d'anisotropie  $\mu_{//}(n_s) / \mu_{\perp}(n_s)$  décroît rapidement lorsque la densité de porteurs de charge augmente. Ce résultat est expliqué par une réponse diélectrique du système bidimensionnel d'autant plus importante que  $n_s$  est grand. Pour une densité de dislocations donnée, la mobilité électronique sera d'autant moins dégradée que la densité de porteurs libres sera élevée.



**Figure IV.11** - Exemple de rugosité d'interface 1D dans une hétérostructure de type GaAlAs-GaInAs-GaAs déformée en tension.

## IV.6- Mécanisme de diffusion associé à la rugosité unidimensionnelle d'interface

### IV.6.1 - Introduction

Le cisaillement des hétérostructures suivant les plans cristallographiques de type  $\{111\}$  apparaissant lors de la déformation plastique induit une rugosité d'interface unidimensionnelle aux interfaces des puits GaInAs (chap. II). Il existe donc une distribution aléatoire de zones où la section droite du puits est réduite (figure IV.11: cas d'une couche ayant été déformée en tension) qui peut être à l'origine d'un mécanisme de diffusion anisotrope.

Pour décrire cet effet, on considère que toutes les zones cisillées ont une section droite statistiquement réduite de la même quantité  $\delta e_{ep}$ . La variation  $\delta e_{ep}$  peut représenter une fraction non négligeable de l'épaisseur nominale  $e_{ep}$  du puits.

Si  $D_{rug}$  est la densité des zones cisillées et  $L_{rug}$  leur largeur, la fraction  $\phi$  du système 2D occupée par des zones de faible épaisseur sera simplement:  $\phi = D_{rug} \cdot L_{rug}$ . L'extension  $L_{rug}$  est en moyenne égale à  $\delta e_{ep}$ .

Les marches de rugosité sont issues du glissement de dislocations vers le substrat ou la surface. Puisque le passage d'une dislocation fait varier l'épaisseur du puits d'une quantité voisine de  $b$  et puisque le nombre total de dislocations ayant traversé le puits est de l'ordre de grandeur du nombre de dislocations développées par déformation dans le volume, on peut estimer que  $D_{rug}$  est telle que:

$$D_s < D_{rug} < D_{vol} \cdot b / \delta e_{ep}$$

La position du premier niveau d'énergie  $E_1$  du puits étant, dans un modèle de puits infini, inversement proportionnelle au carré de l'épaisseur du puits  $e_{ep}^2$  (relation (I.2)), nous pouvons considérer que ce qui distingue les deux types de zones est justement leur différence d'énergie  $E_1$ . Cette variation aléatoire de l'état d'énergie des électrons d'un endroit à l'autre du puits engendre un potentiel de diffusion  $V_{rug}$  qui sera de l'ordre de  $\delta E_1$ . Dans le cas d'une variation de l'épaisseur du puits non négligeable, l'amplitude du potentiel de diffusion peut être définie, dans une première approche, par:

$$\delta V = \delta E_1 / e = \frac{E_1}{e} \left[ \left( \frac{e_{ep}}{e_{ep} - \delta e_{ep}} \right)^2 - 1 \right] \quad (IV.28)$$

Dans la section qui suit, nous essayons de simuler le cas de lignes et bandes de cisaillement supposées suffisamment longues pour traverser de part en part les échantillons déformés. Ceci permet, à l'instar de ce que nous avons fait pour les dislocations, de formuler un potentiel diffuseur indépendant de la coordonnée  $y$ :

$$V_{\text{rug}}(\mathbf{r}) = V(x, x_i)$$

où  $x_i$  est la position de la zone cisailée. Un tel potentiel ne modifiera pas la composante  $\mu_{//}$  du tenseur de mobilité.

#### IV.6.2 - Potentiel diffuseur

Deux descriptions peuvent être proposées suivant que les différentes zones cisailées sont considérées comme corrélées ou non (cf. §IV.2.3):

##### IV.6.2.1 - Action individuelle de chaque zone cisailée

Chaque zone cisailée crée son propre potentiel diffuseur dont la portée  $L$  est supposée identique pour toutes les zones et limitée à  $L_{\text{rug}}$ . Le potentiel  $V_{\text{rug}}(\mathbf{r})$  peut alors s'exprimer au moyen de la fonction échelon de Heaviside  $Y$ :

$$V_{\text{rug}}(\mathbf{r}) = \delta V \sum_i \left[ Y(x - (x_i - L/2)) - Y(x - (x_i + L/2)) \right]$$

d'où le module carré du potentiel diffuseur associé à toutes les zones cisailées tenant compte d'un écrantage de type simple par la réponse diélectrique du système 2D:

$$|V_{\text{rug}o}^{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 = 32\pi D_{\text{rug}} \delta V^2 \delta(q_y) \frac{\sin^2(q_x L/2)}{(2q_x + \beta)^2}$$

où le facteur de sous-structure a simplement été remplacé par la densité  $D_{\text{rug}}$ .

Les expressions des fréquences de collision sont calculés au moyen des expressions (IV.24) et (IV.25):

$$\frac{1}{\tau_{\text{rug}o}^{\text{eff}}(\theta)} = 0 \quad (IV.29)$$

$$\frac{1}{\tau_{\perp}(\theta)} = \frac{32m^* \delta E_1^2}{\hbar^3} \frac{D_{\text{rug}}}{k_F |\cos\theta|} \frac{\sin^2(Lk_F |\cos\theta|)}{(4k_F |\cos\theta| + \beta)^2}$$

#### IV.6.2.2 - Corrélation des zones cisillées

Si le potentiel diffuseur créé par l'ensemble des zones cisillées ne peut pas être considéré comme la somme de potentiels indépendants les uns des autres, son module carré, exprimé dans l'espace réciproque, peut, simplement s'écrire comme la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation de la fonction potentiel diffuseur, dans l'espace direct:

$$|V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 = \text{TF}(C(\mathbf{r})) = \text{TF}(\langle V_{\text{eff}}(\mathbf{r}')V_{\text{eff}}(\mathbf{r}'+\mathbf{r}) \rangle)$$

soit:

$$|V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 = \text{TF} \left[ \int V_{\text{eff}}(\mathbf{r}')V_{\text{eff}}(\mathbf{r}'+\mathbf{r}) d^2\mathbf{r}' \right] = \text{TF}[\langle V^2(\mathbf{r}) \rangle \gamma(\mathbf{r})] \quad (\text{IV.30})$$

où  $\gamma(\mathbf{r})$  est appelée fonction de corrélation.

Habituellement, dans le cadre de l'étude de la rugosité des interfaces décrivant l'existence d'îlots de croissance et leur dispersion, cette fonction de corrélation est choisie sans justification isotrope et gaussienne (Ando 1982):

$$C(\mathbf{r}) = \langle V(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}'+\mathbf{r}) \rangle = V^2 \exp(-r^2/l^2)$$

Dans une publication récente, Markus et al. (1994) envisagent même le cas d'une fonction anisotrope pour décrire la rugosité d'interface anisotrope obtenue lorsque la croissance se fait sur des surfaces vicinales. A l'instar du premier cas aucune justification théorique de cette forme de potentiel n'est proposée:

$$C(\mathbf{r}) = \langle V(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}'+\mathbf{r}) \rangle = V^2 \exp \left[ -\frac{x^2}{l_x^2} - \frac{y^2}{l_y^2} \right] \quad (\text{IV.31})$$

Dans les deux cas  $V$  est un développement limité du premier ordre de  $E_1$  par rapport à l'épaisseur moyenne de la marche.

Outre le fait que ces expressions n'ont aucun fondement théorique clair, elles ne sont pas adaptées à notre cas puisqu'elles *ne font pas intervenir la densité des centres diffuseurs*.

Nous utilisons ici une expression de l'autocorrélation  $C(\mathbf{r})$  mieux adaptée à notre problème, proposée initialement par Debye (1957) pour l'étude de la diffusion des rayons X aux petits angles.

Cette corrélation unidimensionnelle (indépendante de la coordonnée  $y$ , puisque

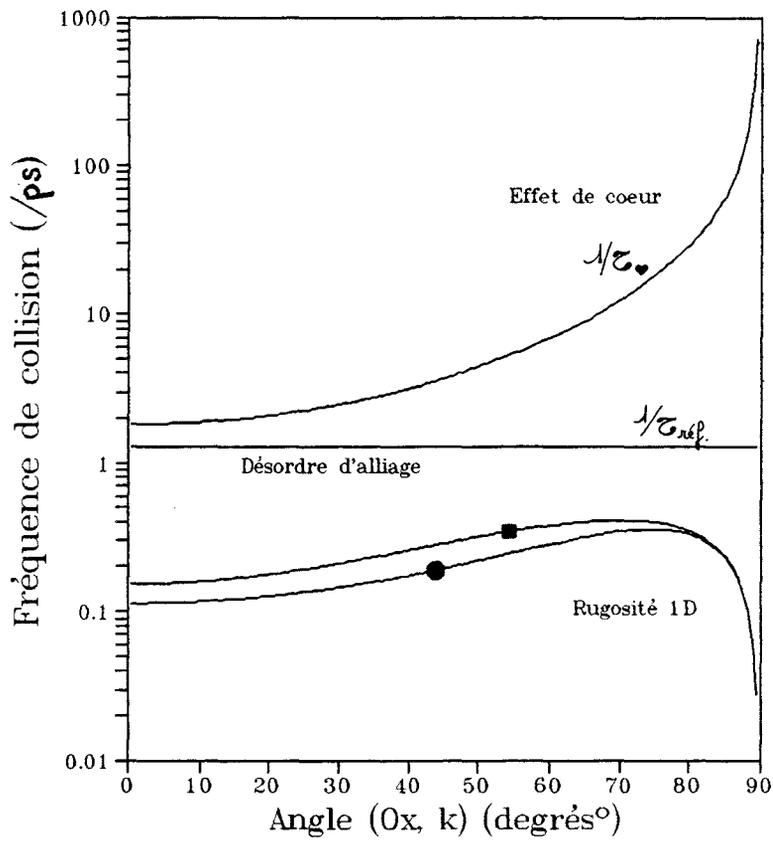


Figure IV.12 – Fréquence de collision  $1/\sigma_{\perp}$  associée a la rugosité 1D

● Modèle de Debye

■ Modèle des potentiels indépendants

$D_{rug} = 1 \text{ E}+3 \text{ /cm}$ ,  $\delta e_{\varphi} = 50 \text{ \AA}$ ,  $\lambda = e/5b$ .

les marches de rugosité sont supposées infinies dans cette direction) est proportionnelle à une fonction de corrélation de forme exponentielle et inclue implicitement la fraction surfacique de zones cisailée  $\phi$  :

$$\langle V^2(\mathbf{r}) \rangle = \phi \delta V^2 \quad \text{et} \quad \gamma(x) = \exp(-|x|/l_x)$$

où la longueur de corrélation  $l_x$  est dans ce modèle naturellement identifiable à  $L_{\text{rug}}/2$  (une soixantaine d'Å).

La transformée de Fourier 2D de cette fonction de corrélation est de forme lorentzienne, ce qui, en utilisant la relation (IV.30), conduit à l'expression suivante du module carré du potentiel diffuseur:

$$|V_{\text{rug}}(\mathbf{q})|^2 = 2\pi \delta V^2 \phi \delta(q_y) \frac{L_{\text{rug}}}{(q_x L_{\text{rug}}/2)^2 + 1} \quad (\text{IV.31})$$

La fréquence de collision  $1/\tau_{\perp}$  associée à la rugosité de caillement est donnée par:

$$\frac{1}{\tau_{\perp}(\theta)} = \frac{32m^* \delta E_1^2}{\hbar^3} \frac{k_F |\cos \theta|}{(4k_F |\cos \theta| + \beta)^2} \frac{D_{\text{rug}} L_{\text{rug}}^2}{(L_{\text{rug}} k_F |\cos \theta|)^2 + 1} \quad (\text{IV.32})$$

### IV.6.3 - Résultats numériques

La figure IV.12 représente, pour une densité de lignes de cisaillement de l'ordre de  $10^3/\text{cm}$  et pour une variation moyenne de l'épaisseur du puits  $\delta e_{\text{ep}}$  de l'ordre de 50 Å, l'évolution des deux fréquences de collision  $1/\tau_{\perp}$ , précédemment proposées, en fonction de l'angle  $\theta = (\text{Ox}, \mathbf{k})$ . L'évolution de la fréquence de collision associée à la diffusion par le potentiel de coeur des dislocations d'interface pour  $\lambda = e/5b$  a également été reportée (les autres types de potentiels diffuseurs sont, comme nous l'avons déjà remarqué, négligeables).

On constate que les deux formulations proposées conduisent à des fréquences de collision équivalentes. Elles sont par contre négligeables comparées à la fréquence de collision associée à l'effet de coeur des dislocations d'interface.

Si maintenant nous considérons l'évolution en fonction du paramètre de cisaillement  $\delta e_{\text{ep}}$  de la mobilité  $\mu_{\perp}$ , uniquement limitée par la diffusion liée à la

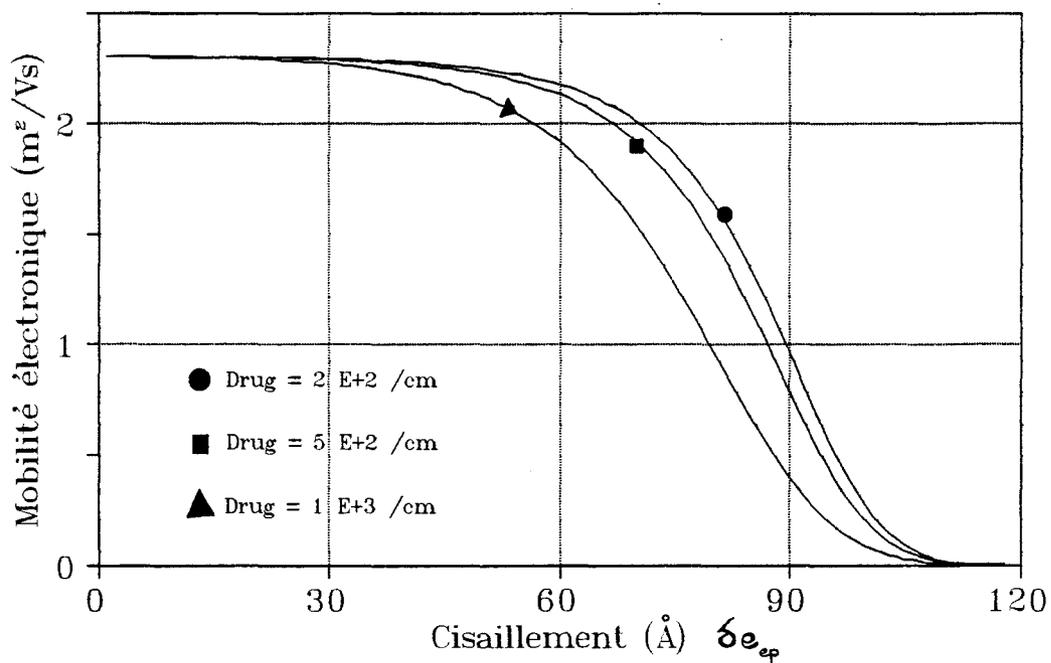


Figure IV.13 - Influence de la rugosité 1D sur la mobilité.

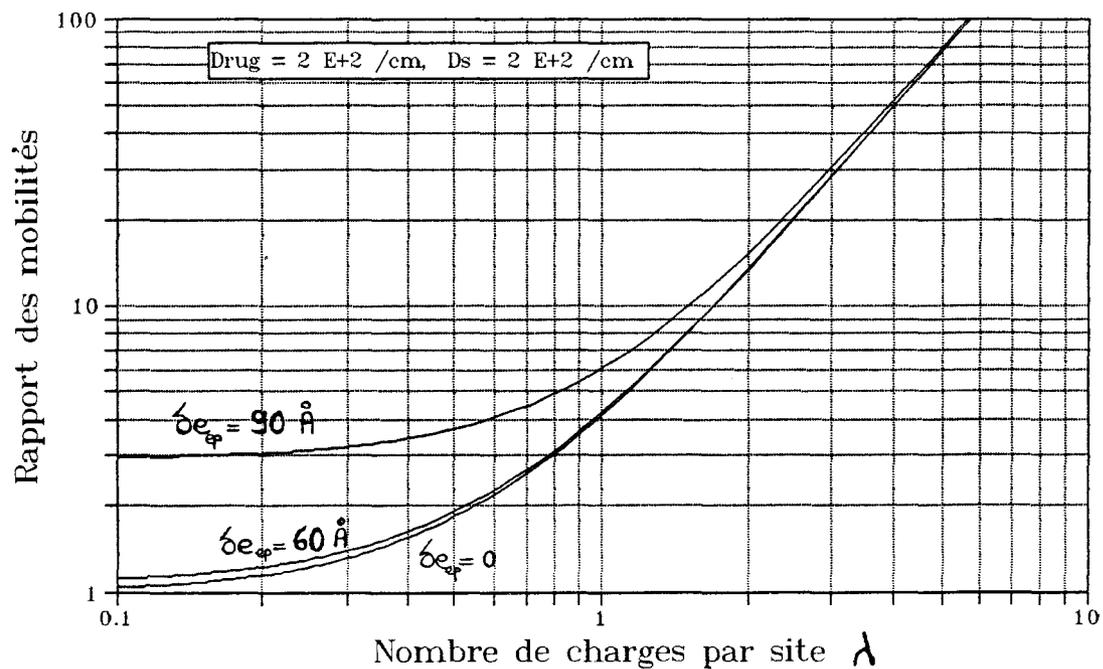


Figure IV.14 - Diffusion par de la rugosité 1D et des dislocations. Modélisation de rapport d'anisotropie  $\mu_{//} / \mu_{\perp}$  en fonction des paramètres  $\lambda$  et  $\delta e_{ep}$ .

rugosité 1D et la diffusion isotrope liée au centres diffuseurs déjà présents dans les références (figure IV.13), nous constatons qu'elle n'est significativement réduite qu'à partir d'une valeur du cisaillement  $\delta e_{ep}$  assez élevée.

Sur la figure IV.14 ont été tracées une série de courbes représentant l'évolution du rapport d'anisotropie de la mobilité lorsque l'on tient compte à la fois de la diffusion par la rugosité 1D et de la diffusion par les dislocations, en fonction des deux paramètres  $\lambda$  et  $\delta e_{ep}$ . Les densités de ces deux catégories de défauts sont supposées identiques. Il est manifeste que pour simuler nos résultats expérimentaux, une combinaison des deux mécanismes de diffusion peut être employée sans que nous puissions définir de façon certaine lequel des deux prédomine.

En définitive, le calcul de la mobilité électronique complet tenant compte de la contribution supplémentaire liée aux zones cisillées 1D, peut modifier les résultats du point IV.5.2, s'il existe dans le système 2D beaucoup de zones très fortement cisillées.

L'observation en microscopie optique de fines lignes de glissement, à la surface des échantillons déformés à l'exclusion de grandes bandes permet de sélectionner les échantillons ayant peu de rugosité de surface en espérant qu'il y en aura peu également à l'interface du puits quantique. Mais compte tenu de la limite de résolution de cette technique, nous sommes incapables d'accéder à la valeur réelle de  $\delta e_{ep}$  et ne pouvons donc conclure de façon systématique, pour les échantillons déformés, que seule la diffusion par les dislocations d'interface est en mesure de rendre compte de la dégradation de la mobilité électronique mesurée perpendiculairement aux défauts linéaires.

Ainsi même si individuellement chacun des deux mécanismes de diffusion permet d'interpréter, dans le cadre d'un formalisme de transport adapté aux systèmes anisotropes, l'évolution du tenseur mobilité à  $B=0$ , c'est probablement une combinaison de ces deux mécanismes (éventuellement corrélés et associés à d'autres centres de diffusion) qui est responsable du comportement observé.

## IV.7 - Description phénoménologique du potentiel diffuseur

L'approche déterministe proposée précédemment pour le calcul de la mobilité dans les systèmes 2D contenant des défauts 1D, est loin d'être parfaite:

- La distribution réelle des dislocations et des zones cisillées n'est certainement pas réductible à un ensemble de défauts linéaires infiniment longs et distribués de façon homogène selon une seule direction, aussi bien en volume que dans le puits.
- Lors de la déformation plastique des hétérostructures, malgré le choix d'une température relativement faible (350°C), les dislocations ont peut être eu le temps "d'attirer" à leur voisinage des défauts ponctuels et impuretés (atmosphère de Cottrell), modifiant alors non seulement leurs propriétés propres mais aussi la distribution des impuretés par rapport à celle du cristal de référence.
- Des interférences entre n'importe quels potentiels diffuseurs (qu'ils soient associés au même type de centres diffuseurs ou entre différents types de centres diffuseurs) peuvent se produire et être à l'origine de comportements imprévisibles.
- A tout potentiel diffuseur s'exerçant sur le gaz électronique 2D est forcément associé la création d'états localisés (Economou 1990) dans le système 2D. Nous n'avons pas considéré, dans notre approche, le rôle de tels états en tant que potentiel diffuseur.

Ainsi, même si nous connaissons individuellement l'essentiel des mécanismes microscopiques susceptibles de diffuser les porteurs libres, leur effet global ne peut sans doute pas être décrit de façon réaliste par une approche déterministe. Aussi nous abordons ici le problème de façon phénoménologique en recherchant une forme de potentiel de diffusion global, décrivant l'action de l'ensemble des centres diffuseurs linéaires ou "étendus". Cependant, les potentiels diffuseurs déjà présents dans les systèmes de références seront exclus de cette description: la densité de porteurs dans le puits étant restée constante, même en la présence de défauts linéaires, on conçoit fort bien que la densité d'impuretés ionisées et le désordre d'alliage du puits n'aient pas été affectées par la présence des dislocations.

La transformée de Fourier  $V(q_{3D})$  du potentiel diffuseur total associé aux défauts étendus peut s'exprimer sous la forme:

$$V_{\text{eff}}(q_{3D}) = \frac{f(q)}{q_{3D}^2 \epsilon_0 \epsilon_r}$$

où  $f(q)$ , est la transformée de Fourier de  $f(r)$ , densité de charges symbolisant l'ensemble des centres diffuseurs. La distribution  $f(r)$  est supposée représenter des états chargés "équivalents", tous localisés dans le système 2D; ceci implique que  $f(q)$  est indépendante de la composante  $q_z$ .

Le module carré du potentiel diffuseur efficace (écranté), exprimé dans l'espace réciproque du système 2D, s'écrira:

$$|V_{\text{eff}}(q)|^2 = - \frac{|f(q)|^2}{q^2 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2} \frac{1}{[2q+\beta]^2} \quad (\text{IV.34})$$

où le module carré  $|f(q)|^2$  correspond à la transformée de Fourier de l'autocorrélation de la fonction  $f(r)$ :

$$|f(q)|^2 = \text{TF} \left[ \int f(r') f(r'+r) d^2 r' \right] \quad (\text{IV.35})$$

Pour évaluer cette fonction, on suppose que la densité de charge  $f$  est une variable aléatoire ne pouvant prendre que les deux valeurs: 0 ou  $F$ . Si on note  $P_F(r)$  la probabilité pour que la densité de charge  $f$  au point  $r$  soit  $F$  et  $P_O(r)$  pour qu'elle soit 0, la valeur moyenne de  $f$  au point  $r$  sera:

$$\langle f(r) \rangle = \sum_i f_i P_i(r) = F P_F(r)$$

Cette valeur moyenne est la meilleure description que l'on puisse avoir de la densité de charge en  $r$ . Statistiquement, on peut donc substituer cette valeur moyenne à la valeur réelle dans l'expression de la fonction d'autocorrélation (IV.35) :

$$|f(q)|^2 = F^2 \text{TF} \left[ \int P_F(r') P_F(r'+r) d^2 r' \right] = F^2 |P_F(q)|^2$$

La transformée de Fourier de la distribution de charge recherchée est donc simplement donnée par la transformée de Fourier de la probabilité de présence au

point  $r$  d'une charge valant  $F$ . Même si cette probabilité  $P_F(r)$  est une fonction inconnue, sa transformée de Fourier  $P_F(q)$  peut formellement toujours s'exprimer sous la forme d'une série d'exponentielles dont les arguments font intervenir les cumulants associés à la distribution.

Dans le cas d'un milieu isotrope et homogène, le développement s'écrit:

$$P_F(q) = A \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(iq)^n}{n!} C_n(r) \right]$$

où les cumulants  $C_n(r)$  sont définis par (Reichl 1980):

$$C_1(r) = \langle r \rangle ; \quad C_2(r) = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \quad \text{etc....}$$

et où les moments intervenant dans la définition des cumulants sont donnés par:

$$\langle r^n \rangle = \int_S r^n P_F(r) d^2r$$

Puisque la distribution est supposée homogène, la distribution de charges ne peut pas dépendre du sens du vecteur  $r$ . Cette remarque implique que le cumulant d'ordre 1 est identiquement nul. Aussi, si on limite la description au premier cumulant significatif (d'ordre 2), on obtient simplement:

$$P_F(q) = A e^{-q^2 \langle r^2 \rangle / 2}$$

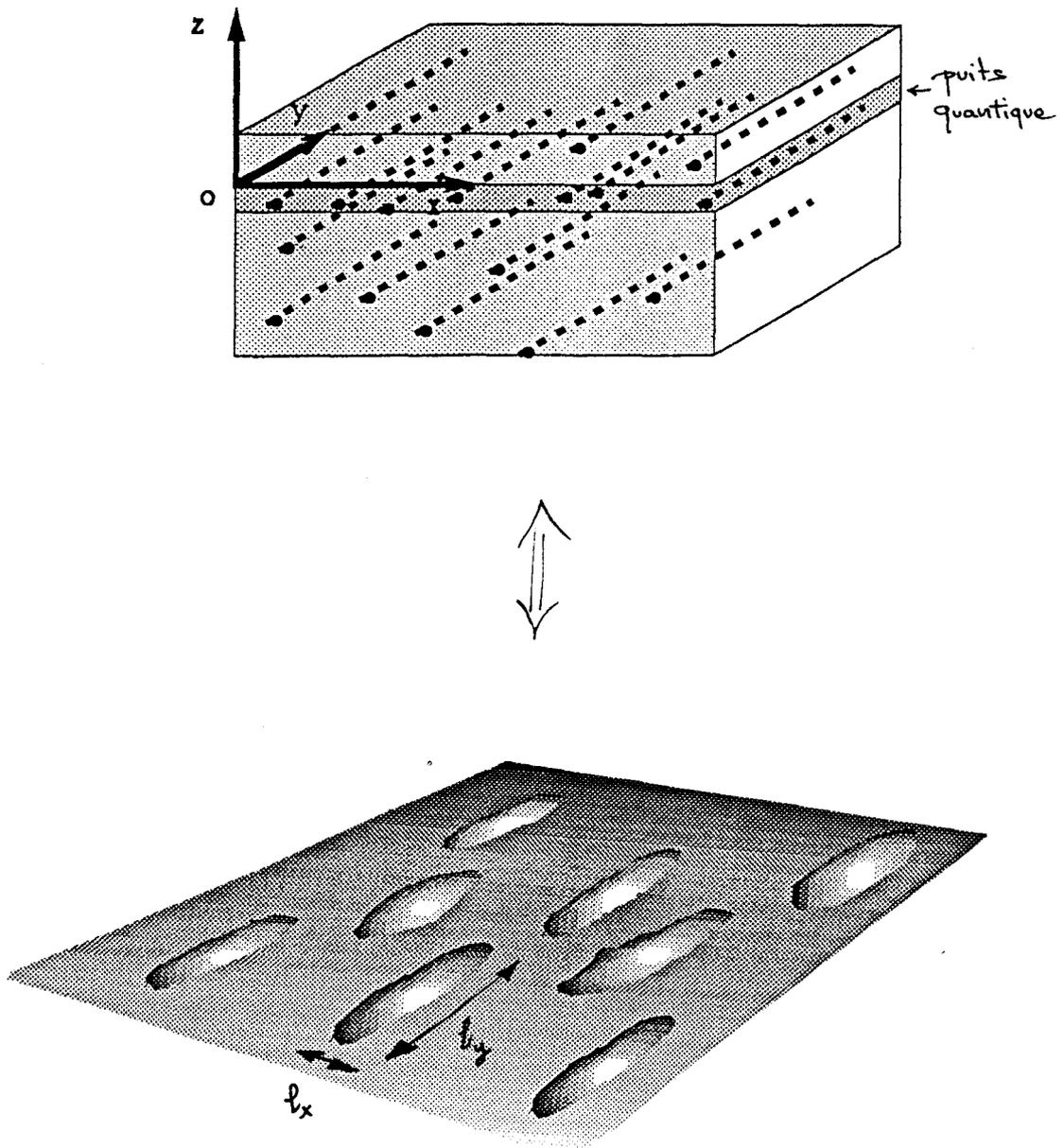
où la quantité  $A$  est un facteur de normalisation. Il peut être identifié à la fraction de la surface du système 2D dont la charge électrique vaut  $F$ :  $A = \phi$ .

La transformée de Fourier de la distribution de charge est donc de manière générale décrite par l'expression:

$$P_F(q) = \phi e^{-q^2 d^2 / 4} \quad (\text{IV.36})$$

Dans cette expression, nous avons introduit la longueur caractéristique  $d = \sqrt{2 \langle r^2 \rangle}$ . Ce paramètre devra être déterminé expérimentalement. Nous venons, ce faisant, de démontrer qu'une fonction d'autocorrélation possible peut être décrite par une gaussienne (cf. IV.6.2.2) et contient un terme  $\phi$ .

La formule précédente (IV.36) peut être extrapolée au cas d'un système homogène mais anisotrope comme celui que nous voulons décrire, en invoquant



**Figure IV.15** - Distribution de charges, sous forme de  $D$  défauts elliptiques uniformément chargés  $F$ , équivalente à la distribution de charges associée à l'ensemble des défauts linéaires.

un simple changement de métrique qui conduit directement à :

$$P_F(\mathbf{q}) = \phi \exp \left( -q_x^2 d_x^2/4 - q_y^2 d_y^2/4 \right) \quad (\text{IV.37})$$

où pour un système bidimensionnel, on a introduit deux longueurs de corrélation  $d_x$  et  $d_y$  qui devront être déterminées expérimentalement. Le sens physique de ces paramètres dépend bien évidemment de la distribution spatiale réelle des charges. Finalement :

$$|f(\mathbf{q})|^2 = (F\phi)^2 \exp \left( -q_x^2 d_x^2/2 - q_y^2 d_y^2/2 \right)$$

La transformée de Fourier inverse de  $P_F(\mathbf{q})$  (relation (IV.37)) permet d'exprimer dans l'espace direct  $\langle f(\mathbf{r}) \rangle$ , la répartition de charge équivalente à la distribution réelle  $f(\mathbf{r})$  :

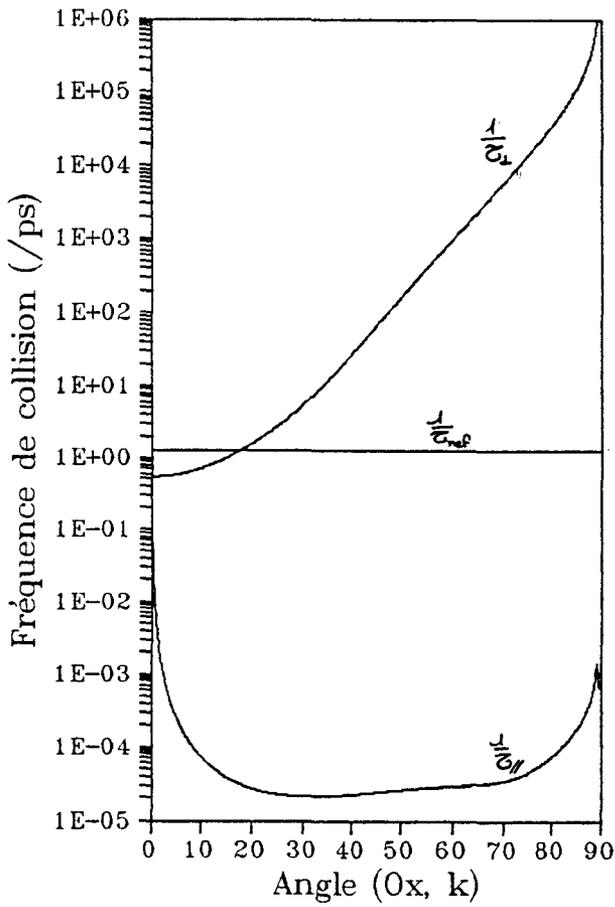
$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = F \frac{\pi\phi}{d_x d_y} \exp \left[ -\frac{x^2}{d_x^2} - \frac{y^2}{d_y^2} \right] \quad (\text{IV.38})$$

Les longueurs de corrélations  $d_x$  et  $d_y$  décrivent, en quelque sorte, la taille moyenne d'un défaut type censé représenter l'ensemble des défauts anisotropes interagissant avec le gaz 2D. Ce défaut type a la forme d'un ellipsoïde (figure IV.15) dont le grand axe est dirigé parallèlement à la direction Oy, direction des défauts linéaires. La longueur de corrélation  $d_y$  est supérieure à la longueur  $d_x$ .

La quantité  $\pi\phi/(d_x d_y)$  représente en quelque sorte la densité  $D$  d'ellipsoïdes identiques et distribués de façon aléatoire dans le plan 2D, constituant la répartition équivalente de charge. Ainsi :

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = DF \exp \left[ -\frac{x^2}{d_x^2} - \frac{y^2}{d_y^2} \right]$$

Le module carré de la transformée du potentiel diffuseur  $|V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2$  (relation (IV.34)) associé à la distribution de défauts linéaires (et de façon générale pour tout système anisotrope) est ainsi déterminé par un ensemble de trois paramètres: les deux longueurs de corrélation  $d_x$  et  $d_y$  et le produit  $DF$ . Une fois que le potentiel phénoménologique sera introduit dans les équations de transport, les valeurs de ces paramètres pourront être fixés de façon à retrouver les résultats expérimentaux: ordre de grandeur de la conductivité, valeur du rapport des mobilités déterminées dans les axes propres.

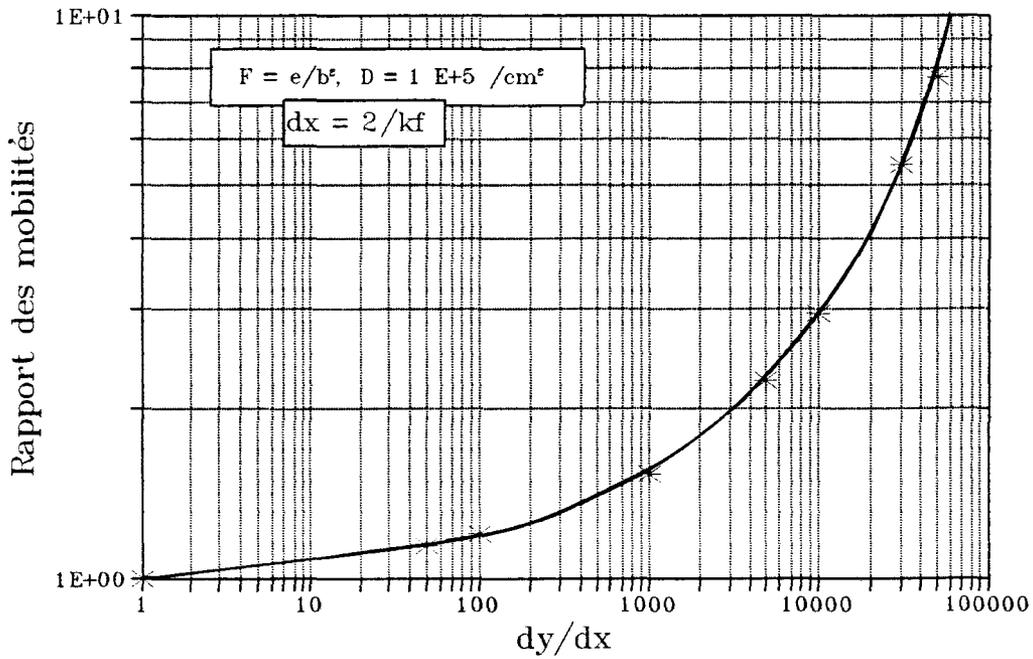


*Figure IV.16*

Fréquences de collision  $1/\tau_{\perp}$  et  $1/\tau_{\parallel}$  associées au potentiel diffuseur phénoménologique.

$$F = e/b^2, \quad D = 1E+5/cm^2$$

$$dx = 2/kf, \quad dy = 10000dx$$



*Figure IV.17* - Potentiel diffuseur anisotrope phénoménologique.

Modélisation du rapport d'anisotropie  $\mu_{\parallel}/\mu_{\perp}$  en fonction du rapport des longueurs de corrélation  $dy/dx$ .

Le choix des paramètres n'est cependant pas unique. De façon à fixer l'un des paramètres, nous invoquons le fait que des charges ponctuelles sont physiquement indépendantes si leur distance moyenne est supérieure à la distance d'écran  $\lambda_{ECRAN}$  caractérisant la réponse diélectrique du système ( $\lambda_{ECRAN}$  est de l'ordre de 100 Å dans les exemples expérimentaux). Puisque l'extension latérale d'une zone cisailée ou, de façon plus certaine, l'extension spatiale d'une dislocation (atmosphère de Cottrell comprise) ne peut excéder une telle valeur, nous avons arbitrairement fixé la valeur maximale de la longueur de corrélation  $d_x$  à la longueur d'écran. Par la suite, nous avons noté que le choix d'une longueur  $d_x$  plus faible n'affectait pratiquement pas les ordres de grandeur obtenus dans le calcul des mobilités.

La figure IV.16 représente un exemple d'évolution des deux fréquences de collision  $1/\tau_{//,phéno}(\theta)$  et  $1/\tau_{\perp,phéno}(\theta)$  associées au potentiel diffuseur phénoménologique précédemment défini. Il est manifeste que pour un rapport d'anisotropie des longueurs de corrélation  $d_y/d_x$  suffisamment grand, la fréquence de collision  $1/\tau_{//}(\theta)$  devient négligeable comparée à la fréquence de choc associée au mécanisme de diffusion isotrope des références; laissant penser que la mobilité mesurée parallèlement aux défauts  $\mu_{//}$  sera très peu affectée par rapport à la mobilité des systèmes 2D de référence.

Les mobilités électroniques  $\mu_{//}$  et  $\mu_{\perp}$  sont calculées numériquement à partir des relations (IV.10) où les fréquences de collision totales sont définies en utilisant la règle de Matthiessen:

$$1/\tau_{//,TOTALE} = 1/\tau_{//,phéno}(\theta) + 1/\tau_{référence}$$

$$1/\tau_{\perp,TOTALE} = 1/\tau_{\perp,phéno}(\theta) + 1/\tau_{référence}$$

Sur la figure IV.17 nous avons représenté l'évolution du rapport d'anisotropie des mobilités  $\mu_{//} / \mu_{\perp}$  en fonction du rapport des longueurs de corrélation  $d_y/d_x$  (valable pour  $d_x$  voisin de  $\lambda_{ECRAN}$ ).

Il est possible, de reproduire n'importe quel rapport d'anisotropie  $\mu_{//} / \mu_{\perp}$  par le simple choix d'un rapport de longueurs de corrélation et un ordre de grandeur judicieux du produit  $DF$  de la densité surfacique de charge  $F$  par la densité de

défauts D. Nous avons assimilé la densité D d'ellipsoïdes à la densité surfacique moyenne de dislocations et de rugosité 1D (estimée expérimentalement à  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ ) et la densité de charge à un électron par surface élémentaire  $b^2$  (cf. b est la distance entre deux atomes de coeur de la dislocation). Avec ces valeurs, les résultats expérimentaux décrits au chapitre III sont simulés par le choix de paramètres indiqués dans le tableau IV.2

	Hétéro déformée	Pseudo déformée	Pseudo relaxée
$\mu_{//} / \mu_{\perp}$	3,5	5,6	160
$d_y/d_x$	$1,5 \cdot 10^4$	$3 \cdot 10^4$	$10^6$

Tableau IV.2

Les ordres de grandeur rendent assez bien compte de la longueur moyenne des segments de dislocations et du cisaillement éventuel présents dans les échantillons déformés plastiquement (de l'ordre de la centaine de micron, en conformité avec les observations réalisées par topographie aux RX) et des dislocations de désadaptation (de l'ordre du centimètre) présents dans les échantillons plastiquement relaxés au cours de la croissance épitaxiale.

Cependant, nous émettons à nouveau quelques réserves dans le cas des échantillons partiellement relaxés. La grande anisotropie de la mobilité ne s'interprète sans doute pas uniquement en terme de mécanismes de diffusion associés aux dislocations de désadaptation de réseau.

## Conclusion

La démarche déterministe que nous avons adoptée en considérant, de la façon la plus exhaustive possible, les mécanismes de diffusion unidimensionnels associés aux dislocations et à la rugosité 1D, conduit à des ordres de grandeur de mobilité électronique et de rapport d'anisotropie des mobilités en assez bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus sur les échantillons déformés plastiquement. Ce premier ensemble de résultats permet d'approcher le mécanisme prépondérant agissant sur la mobilité des porteurs libres du gaz bidimensionnel. Celui-ci correspond très probablement à la charge piégée sur les états électroniques de coeur des dislocations d'interface et éventuellement à la rugosité 1D, si le cisaillement est sévère. Par contre, cette approche, consistant à supposer que tout se passe comme si le système étudié était équivalent à un système 2D simplement soumis à des potentiels diffuseurs supplémentaires, ne nous a pas permis d'expliquer l'anisotropie de mobilité particulièrement importante, observée sur les échantillons relaxés en cours d'épitaxie.

De façon à tenir compte statistiquement des répartitions réelles des charges diffusantes associées aux défauts linéaires, nous avons alors adopté une démarche phénoménologique conduisant à un potentiel diffuseur exprimé sous forme d'une gaussienne anisotrope contenant trois paramètres ajustables. Bien que la détermination indépendante de ces paramètres ne soit pas aisée, nous avons utilisé des valeurs physiquement raisonnables pour deux d'entre eux (le produit  $DF$  et la longueur de corrélation latérale  $d_x$ ), puis déterminé la longueur de corrélation  $d_y$ , caractérisant l'extension du centre diffuseur dans la direction parallèle aux défauts linéaires. Les longueurs obtenues correspondent en pratique aux dimensions des segments de dislocations présents soit dans les structures plastiquement déformées, soit dans les structures plastiquement relaxées en cours de croissance. Ces résultats semblent confirmer la validité de l'approche phénoménologique, dont le mérite est non seulement de définir une méthode permettant de tenir compte des longueurs finies des segments de dislocations (généralement négligées dans les différentes approches de la littérature), mais aussi de décrire sous une forme très synthétique l'action de l'ensemble des potentiels diffuseurs associés aux défauts introduits par plasticité même ceux dont l'existence n'a pas été prise en compte dans la démarche déterministe.

## Chapitre V

### *Exploitation des phénomènes de conductivité en présence d'un champ magnétique*

# Chapitre V

## Exploitation des phénomènes de conductivité en présence d'un champ magnétique

---

Nous avons vu au chapitre précédent que suivant le type de dislocations présentes dans la couche électronique bidimensionnelle, le comportement des porteurs libres, lors d'une expérience de conductivité (en champ magnétique nul), était différent:

- pour les échantillons déformés, contenant des défauts linéaires récents: segments de dislocations et éventuelle rugosité d'interface 1D, le système semble conserver son caractère bidimensionnel et le calcul théorique de la mobilité peut se faire en admettant que la présence des dislocations se traduit simplement par l'introduction d'un mécanisme de diffusion (anisotrope) supplémentaire lié à la charge piégée sur le coeur.

- pour les échantillons plastiquement relaxés, contenant de très longues dislocations de désadaptation, il est impossible de rendre compte du rapport des mobilités ( $\mu_{//}/\mu_{\perp}$ ) et de justifier la dégradation du caractère 2D en invoquant que le comportement observé n'est lié qu'à la présence d'un potentiel diffuseur supplémentaire. Même l'approche phénoménologique, qui ne spécifie aucun mécanisme de diffusion particulier, nécessite l'emploi de rapports de longueur de corrélation que l'on peut estimer physiquement absurdes. Ceci démontre qu'il est inutile de chercher un mécanisme de diffusion qui aurait pu être oublié dans notre liste supposée exhaustive des mécanismes de diffusion attribuables aux dislocations.

Dans ce chapitre, nous abordons l'interprétation du comportement de tels échantillons en présence d'un champ magnétique dans le but, d'une part de déterminer si ce comportement est cohérent avec les conclusions déduites des mesures à champ magnétique nul, d'autre part d'analyser le comportement de la fonction densité d'états en présence de centres diffuseurs anisotropes.

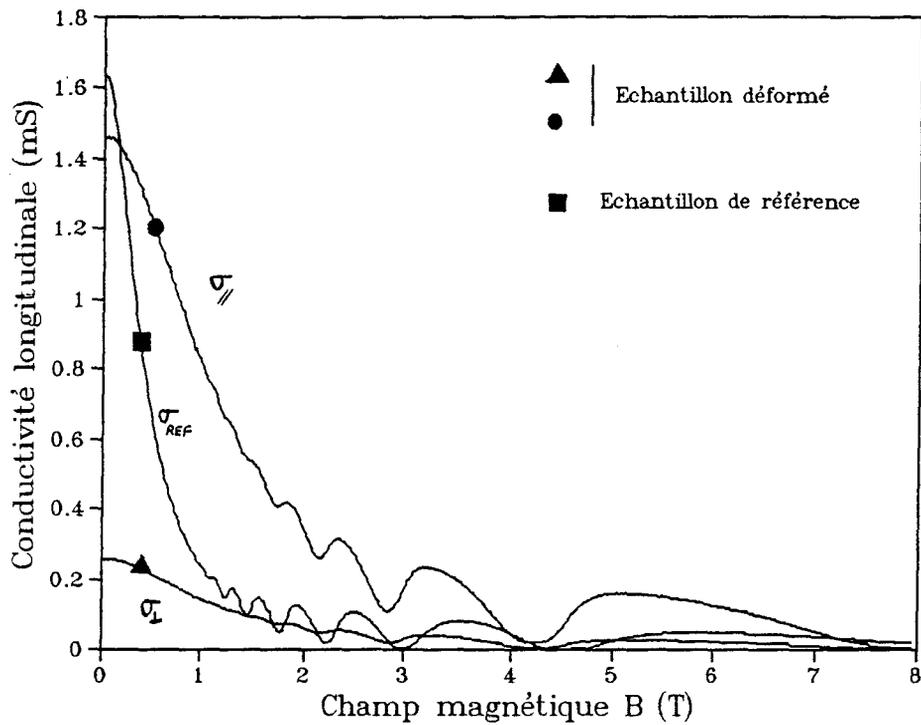


Figure V.1 - Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs.

Anisotropie de la conductivité induite par des défauts linéaires..

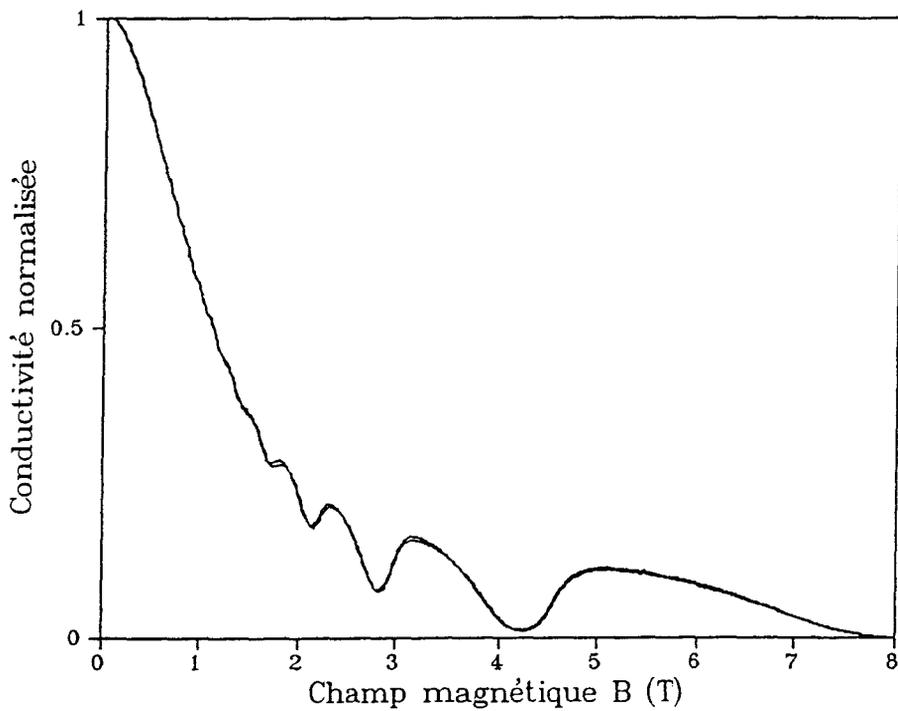


Figure V.2- Hétérostructure GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs.

Comparaison des conductivités normalisées  $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\parallel}^{\circ}$  et  $\sigma_{\perp}/\sigma_{\perp}^{\circ}$ .

## V.1 - Comportement en champ magnétique

### V.1.1 Echantillons déformés plastiquement

Comme le montrent les courbes expérimentales du chapitre III (figures III.16-a et III.17-a), le comportement de la résistivité des échantillons déformés plastiquement en fonction du champ magnétique, est qualitativement semblable à celui qui est observé sur les échantillons de référence. Les deux composantes propres du tenseur de résistivité présentent des oscillations de Shubnikov-De Haas classiques, semblables, aux amplitudes près, dans les deux directions parallèle et perpendiculaire aux défauts linéaires. L'exploitation de la périodicité en  $1/B$  des oscillations conduit à des valeurs de densité de porteurs libres de même ordre de grandeur que celles des échantillons de référence (dans la limite des fluctuations observées sur les échantillons de référence eux-mêmes, cf. chap III). Le rapport des deux résistivités  $\rho_{\perp}(B)/\rho_{\parallel}(B)$  semble être constant, du moins à champ magnétique  $B$  intermédiaire.

Puisque l'évolution en fonction du champ magnétique des trois composantes  $\rho_{\parallel}(B)$ ,  $\rho_{\perp}(B)$  et  $\rho_{xy}(B)$  mesurées sur le même échantillon GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs (c'est-à-dire sur un même contenu de centres diffuseurs) est connue, il est possible d'accéder à l'évolution des composantes propres du tenseur de conductivité  $\sigma_{\parallel}(B)$  et  $\sigma_{\perp}(B)$ . La figure V.1 représente ces fonctions ainsi que la magnétoconductivité de l'échantillon de référence correspondant  $\rho_{ref}(B)$ .

Nous retrouvons sur ce graphe le résultat concernant la dégradation de la conductivité mesurée perpendiculairement aux défauts linéaires  $\sigma_{\perp}(B)$ .

Un autre résultat à souligner, et qui ne pouvait être remarqué par la simple analyse des courbes de résistivité, concerne la conductivité  $\sigma_{\parallel}(B)$ : la conductivité mesurée parallèlement aux défauts linéaires est systématiquement supérieure à la conductivité de l'échantillon de référence. Cette remarque mériterait une explication.

Enfin si nous représentons l'évolution des résistivités propres normalisées  $\sigma_{\perp}(B)/\sigma_{\perp}(0)$  et  $\sigma_{\parallel}(B)/\sigma_{\parallel}(0)$  (figure V.2), elles sont manifestement identiques quelle que soit la valeur du champ  $B$ .

Ces observations conduisent aux deux questions suivantes:

- Le fait que les courbes de résistivité normalisées  $\sigma_{\perp}(B)/\sigma_{\perp}(0)$  et  $\sigma_{\parallel}(B)/\sigma_{\parallel}(0)$  soient identiques est-il compatible avec l'hypothèse d'un mécanisme de diffusion anisotrope?
- Peut-on tirer des courbes de résistivité des renseignements concernant l'élargissement éventuel des niveaux de Landau par la présence de dislocations?

### V.1.2 - Echantillons plastiquement relaxés

Il n'existe bien évidemment pas, dans ce cas, d'échantillons de référence permettant de conclure à une action éventuelle des dislocations sur la densité de porteurs libres de la couche. Cependant les mesures de densité de porteur  $n_s$ , déduites des oscillations de Shubnikov de Haas (observées lorsque la conductivité est mesurée parallèlement aux lignes de dislocations) conduisent à des valeurs tout à fait compatibles avec le dopage de la couche d'alimentation et l'épaisseur du puits (cf. §III.3.2).

Le comportement de la résistivité des échantillons plastiquement relaxés semble conserver un caractère de gaz d'électrons libres bidimensionnel dans le cas de mesures effectuées parallèlement aux lignes de dislocations de désadaptation (figure III.22). Par contre, les mesures de résistivité perpendiculaire ne sont pas réductibles à une telle hypothèse. Pour cette raison, et parce que nous n'avons pas pu disposer de la composante de Hall de tels échantillons, il nous est impossible de représenter l'évolution des composantes du tenseur de conductivité associé.

Ces observations conduisent aux questions:

- Peut-on tirer des mesures de résistivité parallèle des renseignements sur l'élargissement des niveaux de Landau?
- Quelles propriétés physiques peut-on invoquer pour expliquer la différence de comportement induite par les deux types de dislocations?

## V.2 - Etude théorique de la magnétoconductivité en présence de potentiels diffuseurs anisotropes

Nous avons vu au chapitre I que, dans le cadre de la réponse linéaire, la formulation quantique des phénomènes de transport conduit à l'expression suivante des termes longitudinaux du tenseur de conductivité (relation (I.33)):

$$\sigma_{ii}(B) = -e^2 \pi \hbar \int \frac{\partial f}{\partial E} \text{Tr}[v_i \delta(E-H) v_i \delta(E-H)] dE \quad (\text{V.1})$$

De la même façon, les termes non diagonaux, exprimant l'effet Hall sont donnés, à  $T=0$ , par la relation (I.28'):

$$\sigma_{xy}(B) = e \frac{\partial N}{\partial B} + \Delta\sigma_{xy} = \frac{en_s \Delta N(E_F, B)}{m^* \omega_c N_0} + \Delta\sigma_{xy} \quad (\text{V.2})$$

où  $N$  représente le nombre total d'électrons d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi. Le premier terme ne peut exister que si la couche est en contact avec un réservoir d'électrons (c'est-à-dire si le niveau Fermi est imposé par l'ensemble de l'hétérostructure supportant la couche bidimensionnelle). Il constitue la différence essentielle entre l'approche quantique et les approches semi-classiques que nous avons utilisés dans le chapitre précédent.

Les quantités  $\Delta\sigma_{xy}$  et  $\sigma_{ii}(B)$  peuvent être approximativement déduites, dans le cas de champs magnétiques intermédiaires, en introduisant de manière ad-hoc dans les résultats semi-classiques, les modifications apportées par le champ magnétique à la densité d'états (cf. §I.3.2.2). Ces modifications se répercutent essentiellement sur la densité de porteurs libres et sur la définition du temps de relaxation, puisque cette grandeur fait intervenir dans son expression des sommes sur tous les états libres du cristal. En écrivant la fonction densité d'états sous la forme:

$$N(E_F) = N_0 \left( 1 + \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right)$$

il est possible, dans le cas de centres diffuseurs isotropes, de définir un temps de collision ne dépendant que de l'énergie -et non du vecteur d'onde- et de le développer au premier ordre sous la forme:

$$\frac{1}{\tau(E_F)} \cong \frac{1}{\tau_0(E_F)} \left( 1 + \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right)$$

En introduisant cette expression dans les résultats semi-classiques, nous obtenons la dépendance en fonction de B des différents termes du tenseur de conductivité et par suite l'expression du terme longitudinal du tenseur de résistivité (relation (I.29)):

$$\rho(B) = \rho_0 ( 1 + 2 \Delta N(E_F, B) / N_0 ).$$

Nous montrons maintenant que, dans le cas de potentiels diffuseurs anisotropes, des expressions semblables peuvent être obtenues pour chaque composante longitudinale  $\rho_{//}(B)$  et  $\rho_{\perp}(B)$  du tenseur de résistivité. La difficulté de la démonstration provient du fait que dans un tel cas, il n'est plus possible de caractériser les mécanismes de diffusion par une seule fréquence de collision  $1/\tau(E_F)$ , mais par un tenseur de fréquence de collision  $1/\tau(\mathbf{k})$ , introduit au chapitre IV. Dans l'approche "dynamique" des phénomènes de transport (Farvacque b-1994), tout état  $\mathbf{k}$  d'un système électronique est caractérisé, en présence de champs extérieurs appliqués, par une vitesse de dérive  $\delta\mathbf{v}_k$ , vérifiant l'équation vectorielle

$$e\mathbf{E}_{\text{ext}} + e\delta\mathbf{v}_k \times \mathbf{B} + m^* \frac{1}{\tau(\mathbf{k})} \delta\mathbf{v}_k = 0 \quad (\text{V.3})$$

La connaissance de  $\delta\mathbf{v}_k$  permet alors le calcul de la densité de courant  $\mathbf{j}$  (cf. chapitres I et IV)

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{2k^2 e}{m^*} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial E} (\mathbf{k} \cdot \delta\mathbf{v}_k) \mathbf{k} \\ &= \frac{2k^2 e}{m^*} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial E} [k^2 \delta\mathbf{v}_k + \mathbf{k} * (\mathbf{k} \cdot \delta\mathbf{v}_k)] \end{aligned}$$

En introduisant dans cette expression, une intégrale par rapport à l'énergie et en définissant le vecteur:

$$\delta\mathbf{v}(E) = \frac{1}{N(E)} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E-E_k) \left[ \delta\mathbf{v}_k + \frac{\mathbf{k} * (\mathbf{k} \cdot \delta\mathbf{v}_k)}{k^2} \right]$$

l'expression "complexe" de la densité de courant se simplifie et est donnée par une relation analogue à celle rencontrée dans le cas des potentiels diffuseurs isotropes:

$$\mathbf{j} = -4e \int N(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} E \delta\mathbf{v}(E) dE$$

La détermination de la quantité  $\delta\mathbf{v}(E)$  peut être obtenue en multipliant l'équation (V.3) par  $\delta(E-E_k)$  et en réalisant la somme sur les différents états  $\mathbf{k}$ .

Si l'on pose

$$\frac{1}{\tau(E)} \delta v(E) = \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{\tau(\mathbf{k})} \delta v_{\mathbf{k}} + e B^* \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} \delta v_{\mathbf{k}})}{m^* k^2} \right] \frac{\delta(E-E_{\mathbf{k}})}{N(E)} \quad (V.4)$$

on définit alors un tenseur dans l'espace des énergies homogène à un tenseur fréquence de collision; il vient alors:

$$e E_{\text{ext}} + e \delta v(E) \cdot B + m^* \frac{1}{\tau(E)} \delta v(E) = 0 \quad (V.5)$$

Défini de cette façon (relation (V.4)), le tenseur  $1/\tau(E)$  n'est, de manière générale, plus un tenseur diagonal en présence d'un champ magnétique. La résolution de l'équation (V.5) permet cependant de déterminer formellement les différents termes du tenseur de conductivité. L'application des relations d'Onsager permet enfin, a posteriori, de simplifier l'expression des composantes du tenseur  $1/\tau(E)$ . Ce tenseur fréquence de collision dans l'espace des énergie s'écrit finalement sous la forme:

$$\frac{1}{\tau(E)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_x(E)} & \frac{1}{\tau_{xy}(E)} \\ -\frac{1}{\tau_{xy}(E)} & \frac{1}{\tau_y(E)} \end{bmatrix} \quad (V.6)$$

avec

$$\frac{1}{\tau_j(E)} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \delta(E-E_{\mathbf{k}}) \frac{1}{\tau_j(\mathbf{k})} \delta v_j(\mathbf{k})}{\sum_{\mathbf{k}} \delta(E-E_{\mathbf{k}}) \frac{(\mathbf{k} \delta v_{\mathbf{k}})_j k_j}{k^2}} \quad (V.7)$$

et

$$\frac{1}{\tau_{xy}(E)} = -\omega_c \alpha \quad (V.8)$$

où

$$\alpha = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \delta(E-E_{\mathbf{k}}) \frac{k_x^2}{k^2} \delta v_y(\mathbf{k})}{\sum_{\mathbf{k}} \delta(E-E_{\mathbf{k}}) \frac{(\mathbf{k} \delta v_{\mathbf{k}})_y k_y}{k^2}} \quad (V.9)$$

En introduisant la forme (V.6) dans l'équation (V.5), on en déduit l'expression des

composantes de  $\delta v(E)$  et par suite les expressions semi-classiques des composantes du tenseur de conductivité. A température nulle, on obtient:

$$\sigma_{ii}(B) = \frac{n_s e^2 \tau_i(E_F)}{m^* \left[ 1 + \omega'^2 \tau_y(E_F) \tau_x(E_F) \right]} \quad (V.10)$$

et

$$\sigma_{xy}(B) = e \frac{\partial N}{\partial B} - \omega' \sigma_x(B) \tau_y(E_F) = e \frac{\partial N}{\partial B} - \omega' \sigma_y(B) \tau_x(E_F)$$

où l'on a introduit le terme homogène à une fréquence:

$$\omega' = (1-\alpha) \omega_c \quad (V.11)$$

Les définitions (V.7) et (V.8) des composantes du tenseur fréquence de collision dans l'espace des énergies, faisant ou non intervenir l'expression de  $1/\tau_{ij}(k)$ , montrent également que chacune de ses composantes diagonales dépend également de la variation de la densité d'états avec le champ magnétique:

$$\frac{1}{\tau_{ij}(E_F)} \equiv \frac{1}{\tau_{ij}^0(E_F)} \left( 1 + \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \delta_{ij} \quad (V.12)$$

En introduisant ces expressions (V.11) et (V.12), dans (V.7), (V.8) et (V.10) il est enfin possible de déterminer les composantes du tenseur de conductivité. En limitant le calcul aux ordres significatifs, il vient:

$$\sigma_x(B) = \frac{\sigma_x(0)}{1 + \omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)} \left( 1 + \frac{2\omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)}{1 + \omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)} \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (V.13)$$

et

$$\sigma_y(B) = \frac{\sigma_y(0)}{1 + \omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)} \left( 1 + \frac{2\omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)}{1 + \omega'^2 \tau_y^0(E_F) \tau_x^0(E_F)} \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (V.14)$$

où on a posé:

$$\sigma_i(0) = \frac{n_s e^2 \tau_i^0(E_F)}{m^*}$$

L'utilisation de ces deux expressions conduit finalement à la composante de résistivité longitudinale:

$$\rho_{ii}(B) = \rho_{ii}^0 \left( 1 + 2(1+\alpha) \frac{\Delta N(E_F, B)}{N_0} \right) \quad (V.15)$$

Ces dernières expressions (V.13), (V.14) et (V.15) constituent une généralisation au cas de potentiels diffuseurs anisotropes des résultats couramment utilisés dans la littérature dans les cas isotropes. Elles sont semblables aux expressions que nous avons déjà proposées par ailleurs (Bougrioua et al. 1994) en partant d'un simple modèle de Drude. Cependant, en partant des relations semi-classiques, nous adoptons ici une démarche plus juste, qui nous permet également de définir de façon claire les fréquences de collision  $\tau_{//}^{\circ}(E_F)$  et  $\tau_{\perp}^{\circ}(E_F)$  (la relation (V.7)).

Les expressions des résistivités longitudinales, données par la relation (V.15), permettent de justifier pourquoi le rapport  $\rho_{//}(B)/\rho_{\perp}(B)$  mesuré expérimentalement sur l'échantillon pseudomorphique déformé reste constant lorsque B varie. En présence de potentiels diffuseurs anisotropes, les deux résistivités longitudinales  $\rho_{//}(B)$  et  $\rho_{\perp}(B)$  décrivent au facteur  $(1+\alpha)$  près, la même variation relative de la densité d'états en fonction du champ magnétique.

Quant aux conductivités normalisées  $\sigma_{\perp}(B)/\sigma_{\perp}(0)$  et  $\sigma_{//}(B)/\sigma_{//}(0)$ , compte tenu de leurs expressions théoriques (V.13) et (V.14), il est normal que les évolutions expérimentales soient superposables (cf. figure V.2). Si les expressions des fréquences de collision ne sont pas très pratiques à calculer théoriquement, elles peuvent par contre être définies très facilement à partir des valeurs expérimentales des conductivités à champ nul:  $\sigma_{\perp}(0)$  et  $\sigma_{//}(0)$ . On trouve ainsi:

$$1/\tau_{//}^{\circ}(E_F) = 1,33 \text{ ps}^{-1} \quad \text{et} \quad 1/\tau_{\perp}^{\circ}(E_F) = 7,46 \text{ ps}^{-1}$$

à comparer avec la valeur  $1/\tau_{\text{ref}}^{\circ}(E_F) = 1,3 \text{ ps}^{-1}$  de l'échantillon de référence correspondant.

L'ensemble des résultats obtenus dans ce paragraphe ne concerne en toute rigueur, que les champs magnétiques faibles. Pour les champs magnétiques élevés, la conductivité doit être déduite directement de l'expression (V.1), en utilisant par exemple la théorie de migration des centres de rotation de Kubo (cf. §I.3.2.3). Dans cette approche, il convient de remplacer les opérateurs vitesses par les quantités

$$v_x = \frac{1}{B} \frac{\partial V}{\partial y} \quad \text{et} \quad v_y = -\frac{1}{B} \frac{\partial V}{\partial x}$$

où V représente le potentiel diffuseur total agissant sur le gaz bidimensionnel:

$$V(x,y) = V_{\text{référence}}(x,y) + V_{\text{dislo}}(x)$$

pour un ensemble de dislocations infiniment longues parallèles à l'axe Oy (et éventuellement de la rugosité 1D).

L'utilisation de telles relations montre, que la conductivité mesurée perpendiculairement aux lignes de dislocations (où  $\partial V_{\text{dislo}}/\partial y = 0$ ) devrait en principe ne refléter que la modification apportée à la densité d'états par la présence des dislocations. Par contre, la conductivité mesurée le long des dislocations  $\sigma_{//}(B)$  devrait refléter à la fois la modification apportée à la densité d'états et celle apportée à la vitesse ( $\partial V_{\text{dislo}}/\partial x \neq 0$ ). Cela ne signifie pas forcément que cette composante soit davantage affectée par les potentiels diffuseurs: les effets liés aux modifications de la densité d'états  $N(E)$  et de la vitesse sont antagonistes (cf. dans une expérience de conductivité où les champs électrique  $E$  et magnétique  $B$  sont croisés, le transport ne peut se faire dans la direction de  $E$  qu'à condition qu'il y ait des mécanismes de diffusion...). Nous n'avons pas, dans le cadre de ce travail, exploité plus avant ces résultats.

### V.3 - Contribution des dislocations à l'élargissement des niveaux de Landau

#### V.3.1. Aspect théorique

Nous avons vu au premier chapitre que l'élargissement des niveaux de Landau sous l'effet des potentiels diffuseurs pouvait être déterminé par le calcul de la "self-energy", donnée dans l'approximation autocohérente de Born par

$$\Sigma(E) = VG(E)V$$

Ses éléments de matrice peuvent être calculés dans la base des états de Landau, ce qui conduit à

$$\Sigma(E, n) = e^2 \sum_{n', x_0'} | \langle n, x_0 | V | n', x_0' \rangle |^2 G(E, n')$$

En présence des dislocations, le potentiel  $V$  est la somme des potentiels préexistant dans le matériau de référence et des potentiels associés aux dislocations. La "self-energy" se décompose donc en deux contributions et dans ce qui suit, nous ne nous intéressons qu'à la contribution supplémentaire induite par les dislocations (c'est à dire  $V = V_{\text{dislo}}$ ). A l'instar de ce qui a été rappelé au premier chapitre, on pose:

$$\Gamma_{n, n'}^2 = 4e^2 \sum_{x_0'} | \langle n | V | n', x_0' \rangle |^2$$

Cette quantité ne peut dépendre du choix de la jauge pour calculer les fonctions d'onde. Or, nous avons vu que les potentiels associés aux dislocations peuvent être représentés par une gaussienne anisotrope définie par deux longueurs caractéristiques  $d_x$  et  $d_y$ ; la longueur caractéristique dans la direction parallèle aux lignes de dislocations étant extrêmement grande (cf. IV.7).

Si nous faisons l'hypothèse que ce potentiel diffuseur anisotrope reste de forme gaussienne une fois écranté par la fonction diélectrique du milieu composite, il est possible de réécrire le potentiel efficace (tenant compte de l'écrantage) sous la forme:

$$V(x,y) = V_0 \exp \left[ - \frac{x^2}{d_x^2} - \frac{y^2}{d_y^2} \right]$$

Dans le cadre d'une description statistique (cf. IV.6 et IV.7),  $V_0$  n'est rien d'autre qu'une moyenne du potentiel écranté:  $V_0 = \sqrt{\langle V^2(x) \rangle}$ , il dépend donc de la fraction surfacique des zones occupées par les potentiels diffuseurs linéaires, on peut écrire:

$$V_0 = \sqrt{\phi \delta V^2}$$

Si nous supposons maintenant que la longueur caractéristique correspondant à la direction des dislocations  $d_y$  est suffisamment grande pour qu'il soit possible de négliger la dépendance en  $y$  du potentiel:

$$V(x,y) = V(x) \equiv V_0 \exp \left[ - \frac{x^2}{d_x^2} \right]$$

il est alors judicieux de calculer les fonctions d'ondes en faisant le choix de la jauge asymétrique  $A = \{yB, O, O\}$  pour exprimer le potentiel vecteur. Avec une telle jauge, les fonctions d'ondes s'écrivent:

$$\psi_{n,x_0}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! r_c \sqrt{\pi}}} \exp \left[ - \frac{(y-y_0)^2}{2r_c^2} \right] H_n \left( \frac{y-y_0}{r_c} \right) \exp [ikx]$$

En calculant l'expression de  $\Gamma_{n,n'}^2$ , à l'aide des expressions du potentiel et des fonctions d'onde données ci-dessus, il vient immédiatement:

$$\Gamma_{n,n'}^2 = 4e^2 \frac{1}{L_x^2} \sum_{\kappa'} \delta_{n,n'} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x)V(x') \exp [i(\kappa'-\kappa)x] \exp [i(\kappa-\kappa')x'] dx dx'$$

Soit en remplaçant la somme par une intégrale pondérée de la densité d'états  $L_x/2\pi$ :

$$\begin{aligned}\Gamma_{n,n'}^2 &= \frac{2e^2}{\pi} \frac{1}{L_x} \delta_{n,n'} \int_{-\infty}^{+\infty} |V(q)|^2 dq \\ &= \frac{2e^2}{\pi} \frac{1}{L_x} V_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-d^2 q^2/4] dq\end{aligned}$$

Cette dernière expression montre qu'un potentiel de longue portée dans au moins l'une des directions conduit à des éléments de matrice diagonaux identiques pour chaque niveau de Landau, ainsi que des éléments de matrice inter-niveaux de Landau nuls. La quantité  $\Gamma^2$  (carré de l'élargissement des niveaux de Landau) est finalement donnée par

$$\Gamma^2 = \frac{4e^2}{L_x} V_0^2$$

soit encore

$$\Gamma^2 = \frac{4e^2}{L_x} \phi \delta V^2$$

Il serait possible a priori de déterminer l'ordre de grandeur de  $\Gamma^2$  correspondant aux dislocations si on pouvait accéder à  $V_0$ , la valeur moyenne de l'amplitude du potentiel diffuseur écranté associé aux dislocations.

Il est clair que si, pour notre potentiel diffuseur anisotrope, il a été possible de définir un élargissement  $\Gamma$  indépendant de l'indice  $n$  du niveau de Landau, il en va de même pour toute autre définition de cet élargissement. C'est en particulier le cas de  $\Lambda$ , l'élargissement lorentzien des niveaux de Landau, dans l'approche présentée dans le premier chapitre pour les champs  $B$  intermédiaires. Dans cette approche, si les potentiels diffuseurs conduisent à un élargissement  $\Lambda$  identique de chaque niveau de Landau, il est alors possible d'exprimer la densité d'états sous la forme:

$$N(E) = N_0 \left( 1 - 2 \exp\left(-\frac{2\pi\Lambda_{\text{TOTALE}}}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(\frac{2\pi s(E-\Delta)}{\hbar\omega_c}\right) X(T) \right)$$

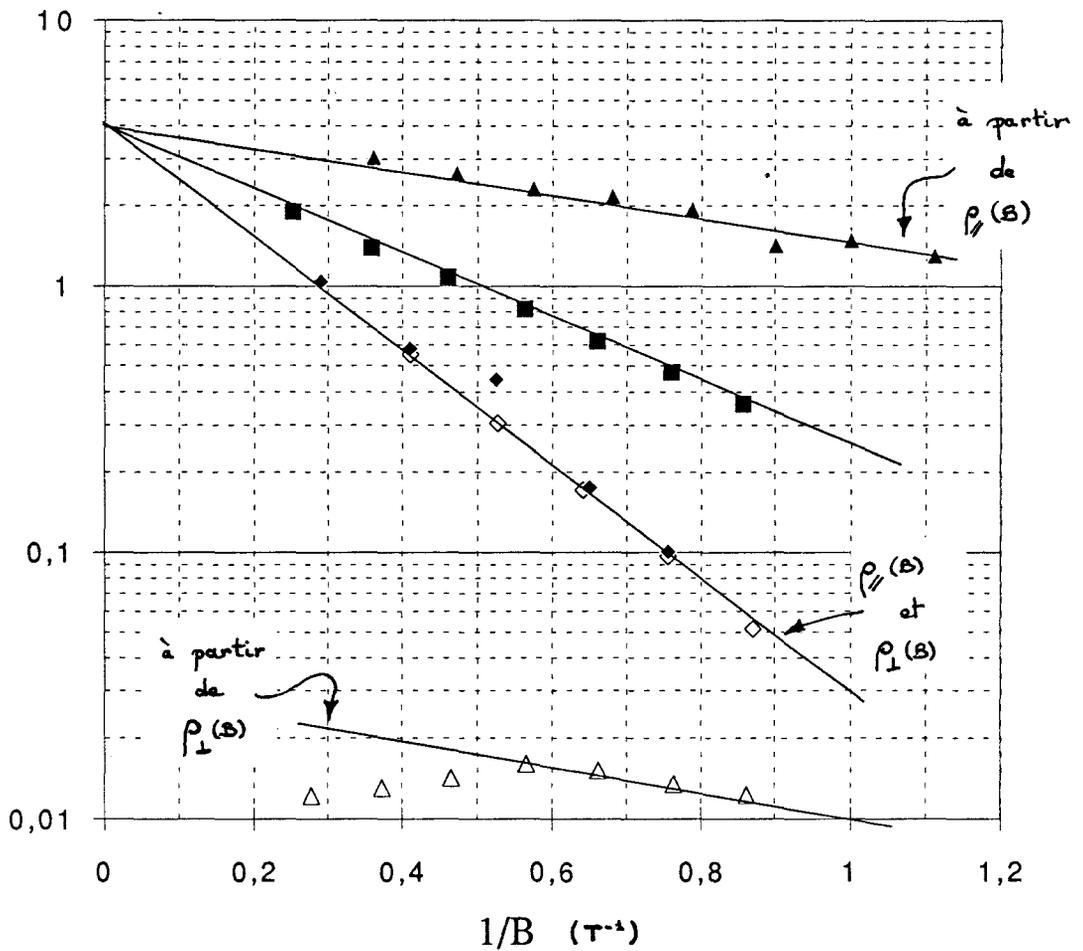
avec:  $\Lambda_{\text{TOTALE}} = \Lambda_{\text{REFERENCE}} + \Lambda_{\text{DISLO}}$

Ainsi pour un élargissement des niveaux de Landau  $\Lambda_{\text{TOTALE}}$  identique quel que soit l'indice  $n$ , la pente de la courbe  $\log[\rho(B)_{\text{max}} - \rho_0]/\rho_0$  en fonction de  $1/B$  donne directement la mesure de cet élargissement. Il est alors possible d'accéder à  $\Lambda_{\text{DISLO}}$

**Figure V.3** - Graphes de Dingle

- Echantillon de référence GaAlAs-GaInAs (120 Å)-GaAs
- ◆ } Echantillon déformé par flexion (puits de 120 Å)
- ▲ } Echantillon plastiquement relaxé (puits de 200Å)

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0 X(\tau)}$$



en comparant l'élargissement de la densité d'états des échantillons de référence  $\Lambda_{\text{REFERENCE}}$  et celle des échantillons déformés  $\Lambda_{\text{TOTALE}}$ .

### V.3.2 - Détermination des temps de vie quantiques

La figure (V.3) représente les graphes de Dingle associés i) à la résistivité des échantillons de référence de l'hétérostructure pseudomorphique GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs, ii) aux deux composantes de résistivité de l'échantillon GaAlAs-GaInAs(120Å)-GaAs déformé et iii) aux deux composantes de résistivité de l'échantillon contenant des dislocations de désadaptation de réseau (GaAlAs-GaInAs(200Å)-GaAs).

Excepté dans le cas de la composante correspondant à des mesures effectuées dans la direction perpendiculaire aux dislocations de désadaptation, chaque courbe est une droite, passant par la valeur  $\log 4$  à l'origine.

Ces résultats impliquent les conclusions suivantes:

- La valeur du paramètre  $\alpha$  introduit dans la section précédente est soit nul soit négligeable. Nous n'avons trouvé aucun argument de symétrie permettant de montrer a priori que ce paramètre était nul.

Compte tenu des ordres de grandeur relatifs entre les temps de collision  $\tau_{\parallel}^{\circ}(E_F)$ ,  $\tau_{\perp}^{\circ}(E_F)$  et  $\tau_{\text{réf}}^{\circ}(E_F)$ , les expressions (V.13) et (V.14) permettent, pour un tel paramètre  $\alpha$  nul, de justifier que la conductivité longitudinale  $\sigma_{\parallel}(B)$  puisse être supérieure à celle de la référence  $\sigma_{\text{réf}}(B)$ .

- Les potentiels associés aux dislocations conduisent effectivement à un élargissement dans l'espace des énergies identique pour chaque niveau de Landau.

#### V.3.2.1 - Echantillons plastiquement déformés

La détermination expérimentale du temps de vie quantique  $\tau_q$  (défini par  $\tau_q = \hbar/2\Delta$ ) conduit à une valeur plus faible pour les échantillons déformés que pour les échantillons de référence (voir figure V.3). Ceci est cohérent avec le fait que les potentiels associés aux dislocations contribuent à un élargissement

supplémentaire des niveaux de Landau. On note également une valeur unique de ce temps de vie quantique, quelle que soit la direction dans laquelle a été effectuée la mesure ce qui est conforme à la discussion développée plus haut.

Ce résultat permet d'ajouter quelques commentaires sur la largeur des plateaux d'effet Hall quantique (revoir les figures II.24 page 91). La largeur des plateaux centrés à 4,5 T et 2,7 T (correspondant respectivement à deux et trois niveaux de Landau occupés) n'est sans doute pas affectée par rapport à celle des plateaux correspondant de l'échantillon de référence. Mais, à champ magnétique intermédiaire, les plateaux ont disparu alors que ceux de l'échantillon de référence sont encore présents. Cette observation est liée à un recouvrement des niveaux de Landau supérieur dans le cas des échantillons déformés que dans le cas des échantillons de référence. A l'instar de la conclusion tirée de l'analyse des amplitudes de Shubnikov-De Haas, ce résultat signifie que les défauts linéaires introduisent bien un élargissement supplémentaire des niveaux de Landau.

#### V.3.2.2 - Echantillons plastiquement relaxés

Dans le cas des échantillons plastiquement relaxés, les mesures de résistivité réalisées parallèlement aux dislocations indiquent également que les centres diffuseurs agissant sur la couche électronique sont responsables d'un élargissement identique de chaque niveau de Landau (graphe de Dingle linéaire).

Bien que la valeur du temps de vie quantique soit nettement plus grande que celle que l'on trouve dans les échantillons de référence, aucune conclusion immédiate ne peut être tirée, l'épaisseur du puits correspondant n'est plus comparable. Cette valeur plus grande du temps de vie quantique n'est cependant pas surprenante puisque, le temps de collision dans la direction parallèle aux dislocations (associé aux fluctuations d'alliage dans le cas d'un puits GaInAs) est lui-même une fonction croissante de l'épaisseur de la couche.

L'élargissement des niveaux de Landau devrait être le même quelle que soit l'orientation des champs appliqués. Ainsi, si la courbe de Dingle, obtenue lors de mesures perpendiculaires aux lignes de dislocations, n'est pas une droite c'est que, conformément aux déductions faites à  $B=0$ , le phénomène de conductivité n'est plus réductible au comportement d'un système électronique simplement soumis à un mécanisme de diffusion supplémentaire.

Il est probable que les dislocations de désadaptation (que l'on peut assimiler à des segments rectilignes infiniment longs) introduisent une succession de barrières de potentiel qui doivent nécessairement être franchies par effet tunnel (par exemple), lors d'une expérience de conductivité perpendiculaire aux dislocations. Dans le cas de mesures parallèles, tout se passe alors comme si l'échantillon était constitué de couches bidimensionnelles indépendantes, conduisant en parallèle. Il n'est pas exclu que cette conductivité soit rehaussée par des effets balistiques qui devraient devenir prépondérants si l'on pouvait expérimentalement diminuer la distance entre les dislocations de désadaptation.

### V.3.3 - Origines possibles des différences entre dislocations de désadaptation et des dislocations développées par flexion

Les dislocations de désadaptation sont introduites en cours de croissance, lorsque l'hétérostructure est maintenue à une température suffisamment élevée et pendant un temps suffisamment long pour que des phénomènes de diffusion puissent avoir lieu. L'atmosphère de Cottrell de telles dislocations est donc probablement très différente de celles des dislocations développées par déformation plastique et pourrait justifier des différences dans l'ordre de grandeur des potentiels de diffusion associés.

La géométrie de ces défauts est également différente puisque les dislocations de désadaptation de réseau sont constituées de lignes "quasi" infiniment longues alors que la distribution des dislocations de plasticité s'apparente plus à un ensemble de longueur moyenne de l'ordre de quelques centaines de micromètres.

Les dislocations de désadaptation apparaissent à un moment donné de la croissance épitaxiale pour relaxer les contraintes introduites dans la couche. Les distributions obtenues devraient, en principe, être très régulières si la contrainte créée dans la couche est homogène, ce qui est effectivement observé en microscopie électronique ou en topographie aux rayons X. Toutefois, les sites de nucléation des dislocations de désadaptation sont probablement déterminés par l'existence de fluctuations de contraintes (associées par exemple à des fluctuations d'alliage) et la distribution réelle adoptée en définitive correspond à une distribution minimisant et uniformisant l'ensemble des contraintes présentes dans la couche. Cette dernière remarque peut également justifier le fait que l'on observe une meilleure conductivité dans les couches relaxées lors de mesures réalisées parallèlement aux

dislocations ainsi que l'on mesure un élargissement des niveaux de Landau apparemment plus faible dans les échantillons élastiquement relaxés que dans les échantillons de référence (même si ces mesures peuvent également refléter la différence d'épaisseur des puits quantiques).

Dans le cas des échantillons déformés plastiquement la distribution des dislocations est en principe uniforme, mais en réalité elle est déterminée par les sites de nucléation qui sont le plus souvent des accidents de structure situés à la surface des échantillons ou aux interfaces. Ces sources distribuées de façon hétérogène sont responsables de distributions de dislocations et de zones cisillées elles-mêmes très hétérogènes, dans le cas des échantillons que nous avons étudiés (cf. §II.3).

#### V.4 - Conclusion

Les mesures de résistivité en fonction du champ magnétique obtenues sur des échantillons plastiquement déformés peuvent être interprétées, comme nous l'avons fait pour les mesures obtenues à champ magnétique nul, par l'existence de potentiels diffuseurs anisotropes supplémentaires associés aux défauts de plasticité (dislocations, rugosité d'interface). Nous avons démontré que ces mesures pouvaient être exploitées directement pour déterminer la modification apportée à la densité d'états par les potentiels diffuseurs anisotropes, en utilisant l'analyse de Dingle.

Les dislocations de désadaptation de réseau créent par contre une succession de barrières de potentiel parallèlement à leur ligne. La conductivité parallèle reste analysable en termes de phénomènes de diffusion des porteurs libres éventuellement augmentés d'effets balistiques alors que la conductivité électrique mesurée perpendiculairement aux lignes de dislocations fait probablement intervenir des probabilités de transition tunnel ou de sauts thermiques pour franchir ces barrières.

L'origine physique de l'existence de barrières aussi importantes dans le cas des dislocations de désadaptation n'est pas très claire mais peut être attribuée à un effet de géométrie ou à une différence dans la composition des coeurs de dislocations par leur atmosphère de Cottrell.

*Conclusion  
générale*

Nous avons étudié dans ce travail, l'influence des dislocations sur les propriétés de transport électrique des systèmes bidimensionnels confinés dans des hétérostructures de type GaAlAs-GaInAs-GaAs et GaAlAs-GaAs.

Les dislocations ont été introduites dans ces structures soit par déformation plastique (flexion encastree), soit de façon "naturelle" lors de la croissance épitaxiale en choisissant une épaisseur du puits GaInAs légèrement supérieure à l'épaisseur critique. Dans les deux cas, nous avons disposé d'une sous-structure de défauts linéaires constituée de dislocations parfaitement rectilignes et toutes parallèles à une direction unique de type  $\langle 110 \rangle$ .

Dans le cas des échantillons déformés, la technique de flexion permet d'introduire des dislocations dans toute l'épaisseur de la structure. Les dislocations piégées aux interfaces du puits sont de même nature que les dislocations de désadaptation. Nous avons pu constater que la flexion pouvait également introduire aux interfaces du puits un certain taux de rugosité unidimensionnelle.

Dans le cas des structures plastiquement relaxées, les dislocations de désadaptation sont essentiellement localisées aux interfaces du puits. Leur densité et leur longueur sont supérieures à celles des dislocations développées par plasticité. Leur atmosphère de Cottrell est sans doute différente.

Les dislocations peuvent interagir avec le gaz électronique à plusieurs niveaux. Outre le fait que les dislocations sont potentiellement des systèmes électroniques "naturels" à une dimension - chose que nous n'avons pas pu vérifier lors de cette étude -, elles peuvent agir sur les propriétés de transport du système 2D en tant que centres diffuseurs anisotropes par l'intermédiaire des niveaux extrinsèques introduits dans la bande interdite du puits: si ces niveaux sont occupés, la charge piégée sur le coeur des dislocations est responsable d'un potentiel diffuseur coulombien efficace. Les deux autres potentiels de diffusion associés aux dislocations (potentiels de déformation et piezoélectrique) sont théoriquement insignifiants.

L'étude du magnéto-transport quantique à faible température - effet Shubnikov-De Haas et effet Hall quantique -, associée à l'analyse théorique fondée sur un formalisme de transport adapté aux potentiels diffuseurs anisotropes permet d'établir clairement les différents points suivants:

- Pour des densités de dislocations voisines de celles utilisées dans ce travail (au maximum  $5.10^2 \text{cm}^{-1}$ ), le caractère bidimensionnel de l'hétérostructure est préservé dans le cas des structures déformées plastiquement. Cependant, dans le cas des structures contenant des dislocations de désadaptation, le comportement du gaz électronique n'est plus purement bidimensionnel.

- Pour les deux catégories de structures étudiées, contenant des défauts linéaires, l'exploitation de la périodicité en  $1/B$  des oscillations de Shubnikov-De Haas conduit à des valeurs de densité de porteurs libres de même ordre de grandeur que celles des échantillons de référence (dans la limite des fluctuations observées sur les échantillons de référence eux-mêmes). Il semble donc assuré que la présence des dislocations ne modifie pas de façon significative la densité de porteurs libres du système électronique bidimensionnel, contrairement à ce qui se produit dans les semiconducteurs massifs. Cette invariance apparente du nombre de porteurs libres est expliquée qualitativement en invoquant les poids relatifs de la densité de centres de donneurs de la couche d'alimentation et de la faible capacité de piégeage des dislocations d'interface. Elle n'est donc pas incompatible avec la présence de lignes chargées en tant que mécanisme de diffusion.

- L'analyse des mesures de résistivité montre, par contre, que la présence des défauts linéaires (dislocations et éventuellement rugosité 1D) induit une forte anisotropie de la mobilité électrique.

Ainsi, à  $B=0$ , la mobilité mesurée parallèlement aux défauts linéaires est pratiquement inchangée par rapport à celle des structures de référence. Ce fait s'explique parfaitement dans le cadre du formalisme développé pour les systèmes anisotropes: la composante du tenseur fréquence de collision correspondant à la direction parallèle aux défauts linéaires est identiquement nulle si les défauts sont supposés infinis, ou non nulle mais négligeable si on leur attribue une longueur finie.

En ce qui concerne la mobilité mesurée perpendiculairement aux défauts linéaires, elle est diminuée de façon significative dans un rapport pouvant atteindre de grandes valeurs (jusqu'à 160) selon la densité de dislocations et leur nature - dislocations développées par flexion ou dislocations de croissance:-

-Pour les échantillons déformés, l'anisotropie moyenne constatée semble totalement interprétable en termes de diffusion par des potentiels associés à la charge piégée sur le coeur des dislocations et éventuellement à la rugosité 1D introduite lors de la flexion.

-Dans le cas des systèmes plastiquement relaxés (dislocations de désadaptation) les phénomènes de transport ne semblent plus être simplement réductibles aux propriétés d'un gaz 2D qui serait soumis à un potentiel diffuseur supplémentaire. La mobilité électrique mesurée perpendiculairement aux lignes de dislocations fait probablement intervenir des probabilités de transition tunnel ou de sauts thermiques pour franchir les barrières de potentiels que constituent les dislocations de désadaptation.

-Dans les deux cas, il est possible d'adapter une démarche phénoménologique conduisant à la définition d'un potentiel diffuseur exprimé sous forme d'une gaussienne anisotrope paramétrée. Pour un choix des paramètres physiquement raisonnables, cette méthode qui permet de tenir compte des longueurs finies des segments de dislocations, décrit sous une forme très synthétique l'action de l'ensemble des potentiels diffuseurs associés aux défauts linéaires voire ceux dont la nature n'est pas connue.

- En présence d'un champ magnétique  $B$ , l'existence d'un potentiel diffuseur anisotrope supplémentaire se traduit expérimentalement, comme prévu par la modélisation, par un élargissement supplémentaire des niveaux de Landau :

-L'analyse de Dingle réalisée sur les deux catégories d'échantillons fautés montre que les potentiels diffuseurs associés aux dislocations (et éventuellement à la rugosité 1D) contribuent à un élargissement de chaque niveau de Landau indépendant de  $B$ . Alors que pour les échantillons déformés ce type d'analyse est indépendante de l'orientation de mesure de la magnétorésistivité, dans le cas des

structures relaxées, seules les mesures réalisées parallèlement aux dislocations de désadaptation, conduisent à la détermination d'un élargissement des niveaux de Landau. Il est impossible d'analyser les mesures réalisées perpendiculairement. Ce fait constitue une preuve supplémentaire de la présence d'un phénomène physique non pris en compte par cette étude.

-La détermination quantitative du temps de vie quantique associé aux mécanismes de diffusion des défauts linéaires, conduit à une valeur voisine de celle associée aux mécanismes de diffusion isotropes présents dans les structures de référence (essentiellement le désordre d'alliage).

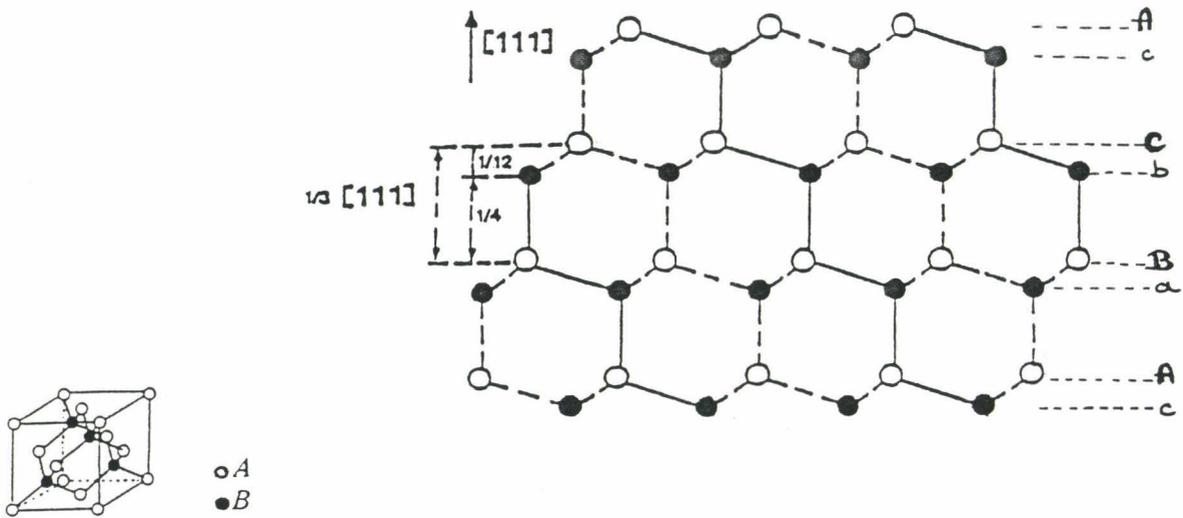
-A champ magnétique non nul, l'augmentation de la conductivité mesurée parallèlement aux défauts linéaires par rapport à la magnétoconductivité des échantillons de référence est une conséquence originale de l'anisotropie du potentiel diffuseur.

Finalement, il aurait été intéressant de compléter notre étude par la mesure de l'effet Hall quantique sur des échantillons relaxés contenant des dislocations de désadaptation. Il est probable qu'à l'instar de ce qui se produit pour des échantillons contenant des dislocations issues de la flexion, cet effet Hall ne soit pas modifié. Toutefois une telle mesure permettrait de confirmer ou d'infirmier l'existence d'une autre catégorie de phénomène physique que nous n'avons pas pris en compte. De toute façon, il faudra mener d'autres analyses comparatives sur les deux types de structures fautées pour achever cette étude. Par exemple, il serait intéressant d'envisager des mesures en hyperfréquence sur d'autres géométries d'échantillons, des mesures en fonction de la température (en l'occurrence descendre plus bas que le kelvin!) et avec un contrôle de charge. Toutes ces études permettraient peut-être de caractériser suffisamment l'interaction (dislocations 1D)-(système électronique 2D) pour envisager l'ouverture d'une nouvelle voie technologique: "l'ingénierie des défauts linéaires".

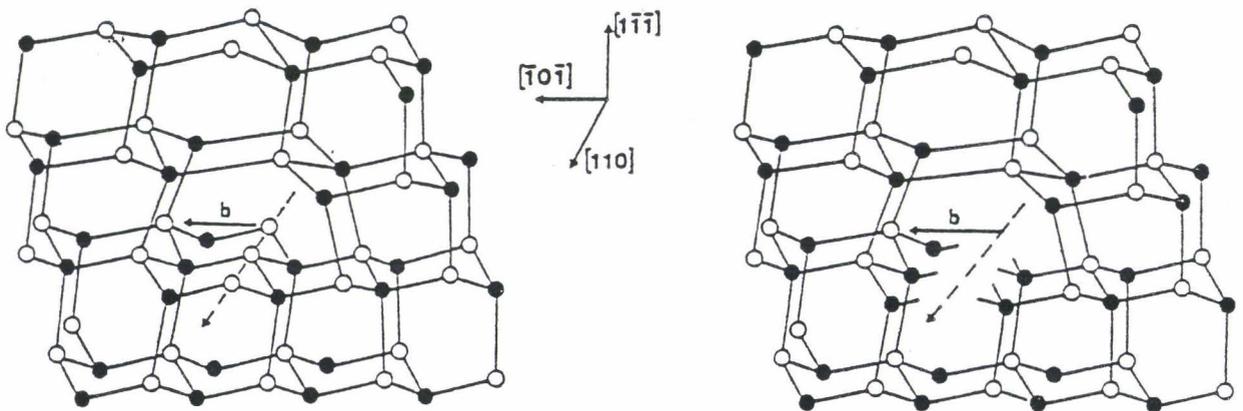
# *Annexes*

## *ANNEXE A*

**Dislocations parfaites dans les composés III-V**



**Figure A.1** - Empilement des plans  $\{111\}$ . Projection sur le plan  $(110)$ .



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

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

**Figure A.2** - Dislocations parfaites à  $60^\circ$ .

## Dislocations parfaites dans les composés III-V

---

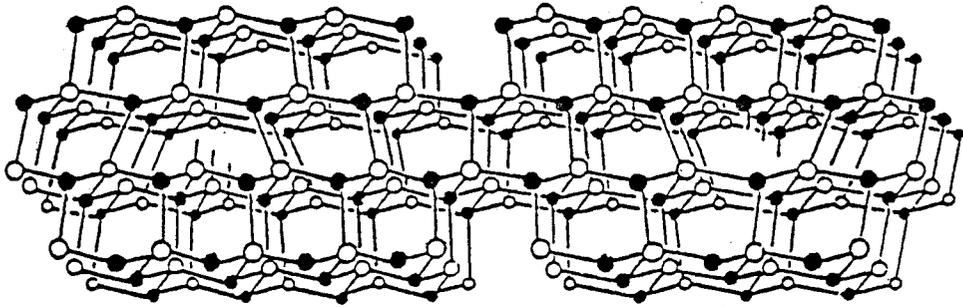
Dans la structure sphalérite, les plans de glissement des dislocations sont les plans denses  $\{111\}$ . Les lignes de dislocations sont, au moins à basse température, confinées dans les directions denses  $\langle 110 \rangle$  (vallées de Peierls) et leurs vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}$  sont du type  $a/2\langle 110 \rangle$ . Ainsi les dislocations parfaites sont, soit des dislocations vis ( $\mathbf{b}$  colinéaire à un vecteur unitaire  $\mathbf{l}$  le long de la ligne), soit des dislocations à  $60^\circ$  ( $\mathbf{l}$  et  $\mathbf{b}$  font un angle de  $60^\circ$ ).

Le détail de la structure de coeur des dislocations  $60^\circ$  (atomes situés à l'extrémité de chaque demi-plan supplémentaire) reste sujet à discussion. Il dépend de la position du plan de cisaillement du cristal dans la séquence d'empilement des plans atomiques suivant une direction  $\langle 111 \rangle$ .

Cette séquence est présentée sur la figure A.1 Elle est du type ...A aB bC cA aB b..., les plans repérés par une lettre majuscule sont des plans d'atomes trivalents (Ga, Al, In), les plans repérés par une lettre minuscule sont des plans d'atomes pentavalents (As); la distance entre deux plans repérés par la même lettre I-i (majuscule-minuscule) est trois fois plus grande que la distance entre deux plans repérés par des lettres différentes i-J.

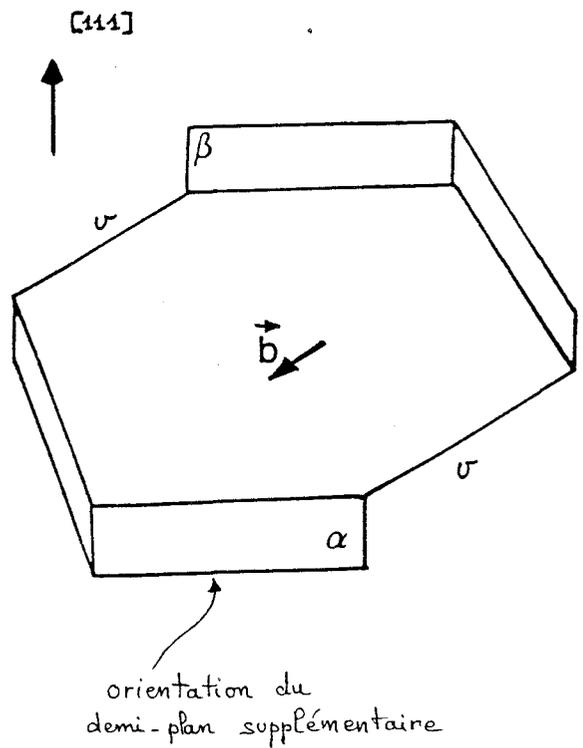
Si le cisaillement se fait entre deux plans I-i, la dislocation est dite SHUFFLE. S'il se fait entre deux plans i-J, la dislocation est dite GLIDE. Une dislocation shuffle et une dislocation glide de même ligne et de même vecteur de Burgers ont des coeurs constitués d'atomes différents (figure A.2).

Le nombre de liaisons rompues pour créer une dislocation glide étant trois fois supérieur à celui nécessaire pour créer une dislocation shuffle, le cisaillement semble énergétiquement plus probable dans la configuration shuffle. Cependant de nombreuses études, soulignant l'importance du caractère glissile ou césile des deux parties issues de la dissociation des parfaites, montrent que puisque les deux parties issues de la dissociation d'une dislocation glide sont glissiles, la configuration glide ne devrait pas être discriminée. Pour tous les raisonnements que nous avons développé dans ce travail, nous avons supposé, sans justification,



**Figure A.3** - Dislocations parfaites à 60° de vecteur de Burgers opposés.

**Figure A.4** - Répartition  
du caractère  $\alpha$ ,  $\beta$  et vis  
le long d'une boucle de  
dislocation hexagonale



que le cisaillement du cristal pour former une dislocation parfaite se produit entre deux plans les plus espacés (mode shuffle). Ce choix détermine, pour un vecteur de Burgers donné, la nature des atomes de coeur en positions très distordues. Nous adoptons la dénomination proposée par Alexander et al. (1979). La notation  $\alpha$  (respectivement  $\beta$ ) que nous utilisons correspond, dans cette convention, à des dislocations  $60^\circ$  dont le coeur est constitué d'atomes trivalents (respectivement pentavalents). La figure A.2-a représente une dislocation de type  $\alpha$  en mode shuffle.

Du fait du caractère non centrosymétrique de la structure sphalérite, deux dislocations  $60^\circ$  parallèles de vecteurs de Burgers opposés auront, dans les composés  $A_{III}B_V$ , des atomes de coeur de natures différentes: A ou B (figure A.3).

Compte tenu de la direction préférentielle des lignes de dislocations due au frottement de réseau, nous pouvons schématiser la répartition des caractères  $\alpha$ ,  $\beta$  et vis des dislocations le long d'une boucle hexagonale comme décrit sur la figure A.4.

On pourra, par exemple, se reporter à l'article de George et Rabier (1987) pour plus de détails sur les dislocations dans les composés semiconducteurs, ainsi que les problèmes de dissociation des parfaites en partielles et des conséquences sur la plasticité des matériaux. Le livre de Hirth et Lothe (1982) est un bon ouvrage de référence donnant des informations plus générales.

## **ANNEXE B**

### **Fonction d'écrantage dans un matériau composite**

Note: dans les relations (6.12) et (6.15) de la page 1330  
de l'article qui suit il faut lire :  
 $(d + d_{sc})$  au lieu de  $(d)$

# Electronic dielectric response of composite materials: application to two-dimensional electronic transport

J L Farvacque and Z Bougrioua

Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide, URA CNRS 234, Université des Sciences et Technologies de Lille, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

Received 31 December 1993, accepted for publication 14 March 1994

**Abstract.** We derive the formal expression for the dielectric response of composite semiconducting materials and then show that the inverse dielectric function can be approximately deduced in the particular case of a two-dimensional electron gas (2DEG) embedded between two media. In given situations, these surrounding media contribute noticeably to the non-local dielectric response. This allows us to propose a general formulation for the actual scattering potentials acting against the motion of the 2DEG in transport experiments. The improvement brought about by our model is pointed out in the particular case of ionized impurity scattering.

## 1. Introduction

The development of transport theories based on the dielectric electronic properties of materials [1–5] has clearly shown that the physical origin of the friction forces, which act against the carrier motion during a conductivity experiment, issues from the dynamic dielectric response induced in the medium by the free-carrier motion itself. All these theories include therefore, in their fundamental principles, effective scattering potentials which correspond to the 'external' potential (which would have been created in a vacuum by the scattering centres), screened by the whole dielectric response of the medium in which the scattering centres are actually placed. It was shown in [4,5] that, as soon as standard approximations are done (use of plane waves, effective mass approximation, local field effect neglected, etc), these theoretical approaches are equivalent to those obtained by solving the Boltzmann kinetic equation in the frame of the relaxation time approximation and lead to a standard definition of a 'collision' time  $\tau_c(\mathbf{k})$  given, for elastic collisions, by

$$\frac{1}{\tau_c(\mathbf{k})} = \frac{e^2}{(2\pi)^{n-1}\hbar} \int |V_{\text{eff}}(\mathbf{q})|^2 (1 - \cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}')) \times \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) d^n \mathbf{k}' \quad (1.1)$$

with  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  and where  $n$  is the dimension of the electronic system. When the plane wave approximation is used, the effective potential appearing in (1.1) corresponds to the external potential Fourier transform, screened by the medium dielectric response

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \int \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') V_{\text{ext}}(\mathbf{q}') d^n \mathbf{q}' \quad (1.2)$$

where  $\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$  is the inverse static dielectric function. In a homogeneous three-dimensional system, the previous definition does not give rise to any difficulty in calculation since, the spatial translation invariance being evoked and umklapp processes being neglected [6,7], the dielectric function turns out to be

$$\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \epsilon(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (1.3)$$

The effective potential is then simply given by

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q})}. \quad (1.4)$$

However, for composite materials, the spatial translation invariance is obviously broken. A first difficulty arises from the fact that the inverse dielectric response is no more easily obtained. A second difficulty is connected to the fact that, even if we consider the conductivity in only one of the homogeneous parts of the composite material, the screening of the scattering potentials not only depends on the dielectric properties of this homogeneous part but remains a response of the whole material, since the dielectric response is in principle non-local.

Two-dimensional (2D) electronic systems are typical examples of such composite materials. Therefore, their electronic transport properties are totally coupled with the dielectric properties of the host material in which these 2D layers are embedded.

In the following, we derive the general expression for the dielectric function associated with any composite material containing a planar 2D electronic layer. Then

we look at the particular case of a composite material where the dielectric constants of the various regions are equal. In such a case we show that, if the width of the quantum well is considered as infinitely small, it is possible to get a general formulation for the effective potential acting against the 2DEG for any scattering centres. In the last section we carry out numerical calculations in the particular case of ionized impurity scattering, in order (i) to show the ease of use of our model and (ii) to point out the noticeable contribution of the screening by the external medium. To our knowledge, this external contribution has never been taken into account in the literature.

## 2. Background

We consider a composite medium made of various homogeneous regions connected by interfaces. The whole medium is described by a Hamiltonian  $H_0$  possessing various eigenstate families each of them being connected with the various homogeneous parts of the composite. Let  $|\alpha, j\rangle$  be the different  $\alpha$  states associated with each homogeneous domain  $j$  and corresponding to  $E_j(\alpha)$  energy states

$$H_0|\alpha, j\rangle = E_j(\alpha)|\alpha, j\rangle. \quad (2.1)$$

We now consider a perturbation introduced adiabatically and which is only composed of one  $\omega$  frequency component since the time translation invariance may always be evoked

$$V_{\text{eff}}(r, t) = V(r, \omega)e^{i\omega t}e^{\gamma t} \quad (2.2)$$

where  $\gamma$  is an infinitely small positive number indicating the adiabatic turn on of the perturbation potential. The index 'eff' attributed to the perturbing potential means that we consider in fact the sum of the external potential and of the induced one, in order to get a self-consistent result. Due to this perturbation, the density operator of the medium is modified by the quantity  $\delta\rho(\omega)$  which, introduced in its evolution equation, turns out to possess the following matrix elements [6, 7]

$$\begin{aligned} \delta\rho_{\alpha\beta}^{ij}(\omega) &= e \frac{f(i, \alpha) - f(j, \beta)}{E_i(\alpha) - E_j(\beta) - \hbar\omega + i\hbar\gamma} \\ &\times \langle \alpha, i | V_{\text{eff}}(\mathbf{r}_e, \omega) | \beta, j \rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

where  $\mathbf{r}_e$  stands for electron coordinates. Since we are looking for the static dielectric response (as required by expressions (1.1) and (1.2)),  $\omega = 0$  will be assumed in the following derivation and the imaginary term  $i\hbar\gamma$  will therefore vanish. The effective potential may be expressed by means of its Fourier transform which gives

$$\begin{aligned} \delta\rho_{\alpha\beta}^{ij} &= e \frac{f(i, \alpha) - f(j, \beta)}{E_i(\alpha) - E_j(\beta)} \frac{1}{(2\pi)^3} \\ &\times \int V_{\text{eff}}(\mathbf{q}') \langle \alpha, i | \exp(-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_e) | \beta, j \rangle d\mathbf{q}'. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Knowledge of the matrix elements of the density operator variation allows the determination of the induced charge density at any point  $\mathbf{r}$ . The induced charge density corresponds to the trace of the product of the density operator variation  $\delta\rho$  and the Schrödinger representation of the local particle density  $e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)$

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}) &= e \text{Tr}(\delta\rho\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)) \\ &= e \sum_{\substack{\alpha, i \\ \beta, j}} \delta\rho_{\alpha\beta}^{ij} \langle \beta, j | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | \alpha, i \rangle = \sum_{i, j} \rho_{\text{ind}}^{ij}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

The last expression shows that the induced charge is made of various contributions  $\rho_{\text{ind}}^{ij}(\mathbf{r})$ , each of them mixing the electronic states of two different regions  $i$  and  $j$  or electronic states of the same region. The states of a given region include the free states of the various energy bands as well as the localized states associated with impurities or defects. Interband transitions and free-to-bound state transitions give rise to the so-called dielectric constant  $\epsilon_j$  of each region and will be directly included in the Poisson equation in the following. Thus, the dielectric function will result from intraband free state contributions (in conducting regions) and from transitions between localized states (in semi-insulating regions). The contributions  $\rho_{\text{ind}}^{ij}$ , mixing the electronic states of two different regions, will exist only if there is some overlap between these electronic states

$$\begin{aligned} \langle \beta, j | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | \alpha, i \rangle &= \int \phi_{\beta, j}^*(\mathbf{r}_e) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) \phi_{\alpha, i}(\mathbf{r}_e) d^3r_e \\ &= \phi_{\beta, j}^*(\mathbf{r}) \phi_{\alpha, i}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Such contributions will be negligible when compared with the contribution from one region and will therefore be neglected in the following. Thus, the whole dielectric solution to the composite material is mainly determined by the 'one-region contributions'  $\rho_{\text{ind}}^j$

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = \sum_j \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r})$$

with

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= e^2 \sum_{\alpha\beta} \int \frac{f(\alpha) - f(\beta)}{E(\alpha) - E(\beta)} \frac{1}{(2\pi)^3} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \\ &\times \langle \alpha | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_e) | \beta \rangle \langle \beta | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | \alpha \rangle d^3\mathbf{q} \end{aligned} \quad (2.7)$$

where  $\alpha$  and  $\beta$  account for electronic states of the same region.

Now, we consider separately the contribution of the intraband free states and the localized states issuing from semiconducting regions possessing a three-dimensional character (3D regions). Then we consider the induced charge contribution of a 2DEG confined in a 2D planar quantum well.

### 2.1. Intraband free states contribution of 3D regions

For 3D regions the electronic states may be considered as plane waves

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{V_j}} e^{ik \cdot r} \quad (2.8)$$

normalized to the volume  $V_j$  of region  $j$ . In such a case, the two matrix elements appearing in (2.7) reduce to

$$\begin{aligned} \langle k' | \exp(-iq' \cdot r_e) | k \rangle &= \frac{1}{V_j} \int_{V_j} \exp[i(k' - k - q) \cdot r_e] d^3 r_e \\ &= \delta_{k', k+q} \end{aligned} \quad (2.9)$$

where  $\delta$  is the Kronecker symbol and

$$\begin{aligned} \langle k' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | k \rangle &= \frac{1}{V_j} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] && \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \langle k' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | k \rangle &= 0 && \text{elsewhere.} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Inserted into (2.7), we obtain

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= e^2 \sum_k \int \frac{f(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})} \frac{1}{V_j (2\pi)^3} \\ &\quad \times V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) e^{-iqr} d^3 q && \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 && \text{elsewhere.} \end{aligned} \quad (2.11)$$

The free-carrier scattering generally depends on the scattering potential tails in real space. We can thus make the usual assumption, which is to consider only vectors with small  $q$  modulus. Therefore

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= \frac{e^2}{V_j} \sum_k \left( \frac{\partial f}{\partial E} \right)_k V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) && \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 && \text{elsewhere.} \end{aligned} \quad (2.12)$$

A Boltzmann distribution function may be used to describe the occupation statistic of the 3D semiconducting regions (supposed not to be highly doped). This finally gives

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= -\epsilon_0 \epsilon_j k_{\text{DHj}}^2 V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) && \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 && \text{elsewhere} \end{aligned} \quad (2.13)$$

with

$$k_{\text{DHj}}^2 = \frac{n_j e^2}{\epsilon_0 \epsilon_j kT}$$

where  $n_j$  is the density of free carriers and where we have introduced the standard Debye–Hückel wavevector  $k_{\text{DHj}}$  associated with the 3D region  $j$ . This last result may be generalized to the case where more than one free band is occupied by free carriers.

### 2.2. Contribution of localized states

We restrict the derivation to the case of a given distribution of one kind of identical localized state

characterized by identical energy levels  $E_{\text{LS}}$  and a density  $N_{\text{LS}}$ . Applying (2.7), we obtain

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= e^2 \sum_{nm} \int \frac{f(E_{\text{LS},m}) - f(E_{\text{LS},n})}{E_{\text{LS},m} - E_{\text{LS},n}} \\ &\quad \times \langle n | \exp(-iq \cdot r_e) | m \rangle \langle m | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | n \rangle \frac{V_{\text{eff}}(\mathbf{q})}{(2\pi)^3} d^3 q. \end{aligned} \quad (2.14)$$

This term depends on the ratio  $(f(E_{\text{LS},m}) - f(E_{\text{LS},n})) / (E_{\text{LS},m} - E_{\text{LS},n})$ . Since the energy levels of two different localized states are identical, this ratio corresponds to the limit when  $E_{\text{LS},m}$  tends to  $E_{\text{LS},n}$  which is equivalent to the derivative of the occupation function versus the energy  $E_{\text{LS}}$  of the localized state and is independent of the indices  $n$  and  $m$ . This gives

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{\partial f(E_{\text{LS}})}{\partial E_{\text{LS}}} \\ &\quad \times \sum_{n,m} \int \langle n | \exp(-iqr_e) | m \rangle \\ &\quad \times \langle m | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | n \rangle V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) d^3 q \\ &= \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{\partial f(E_{\text{LS}})}{\partial E_{\text{LS}}} \\ &\quad \times \sum_n \int \langle n | \exp(-iqr_e) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | n \rangle V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) d^3 q. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Describing the localized states by  $\sqrt{\delta(r_e - R_n)}$  wavefunctions, where  $R_n$  stands for the coordinate vector of the  $n$ th localized state, we obtain

$$\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) = e^2 \frac{\partial f(E_{\text{LS}})}{\partial E_{\text{LS}}} \sum_n V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2.16)$$

It is easy to show that the occupation function derivative can be written as

$$\frac{\partial f(E_{\text{LS}})}{\partial E_{\text{LS}}} = -\frac{N_{\text{LS}}^{\mp} (N_{\text{LS}} - N_{\text{LS}}^{\mp})}{kT N_{\text{LS}}^2} \quad (2.17)$$

where  $N_{\text{LS}}^{\mp}$  is the density of ionized states ('+' if these localized states are donors and '-' if they are acceptors).

Moreover, the sum upon  $n$  may be replaced by an integral weighted by the density  $N_{\text{LS}}$ , which finally gives

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= -e^2 \frac{N_{\text{LS}}^{\mp} (N_{\text{LS}} - N_{\text{LS}}^{\mp})}{kT N_{\text{LS}}} V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) && \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 && \text{elsewhere.} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Collecting results obtained in sections 2.1 and 2.2, we can express the contribution of each 3D region,  $\rho_{\text{ind}}^j$ , in terms of a generalized screening wavevector  $k_{\text{Gj}}$ , given by

$$\begin{aligned} k_{\text{Gj}}^2 &= \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_j kT} \left( n_j + p_j + \sum_D \frac{N_D^+ (N_D - N_D^+)}{N_D} \right. \\ &\quad \left. + \sum_A \frac{N_A^- (N_A - N_A^-)}{N_A} \right). \end{aligned} \quad (2.19)$$

So

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= -\epsilon_0 \epsilon_j k_{G,j}^2 V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) & \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 & \text{elsewhere}\end{aligned}\quad (2.20)$$

where  $n_j$  and  $p_j$  are respectively the density of free electrons and free holes present in region  $j$  and where the indices  $D$  and  $A$  represent respectively the various donor or acceptor families present in the region  $j$ .

(Note that the relation (2.19) has already been obtained in [8] for a homogeneous material by directly solving the Poisson equation, in the hypothesis of a rigid shift of any energy state and in the linear response approximation.)

### 2.3. A planar two-dimensional region

As the final result will be derived for the low-temperature range, we can assume that only one subband of the 2D planar quantum well is populated. The corresponding electronic wavefunctions are given by

$$|k\rangle = Z(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik \cdot \mathbf{r}} = Z(z) |k\rangle \quad (2.21)$$

where  $\mathbf{k}$  and  $\mathbf{r}$  are now polar vectors.  $Z(z)$  is the envelope function localizing the free states into the quantum well and  $|k\rangle$  corresponds to the 2D free motion. The induced charge in this region is therefore given by

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}, z) &= e^2 \sum_{kk'} \int \frac{f(k') - f(k)}{E(k') - E(k)} \frac{1}{(2\pi)^2} \\ &\times (k | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_e) | k') (k' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | k) \\ &\times \int Z^*(z_e) V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, z_e) Z(z_e) dz_e |Z(z)|^2 d^2q.\end{aligned}\quad (2.22)$$

Using equivalent arguments to the three-dimensional case, we easily obtain

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}, z) &= \frac{e^2}{S} \sum_k \left( \frac{\partial f}{\partial E} \right)_k \\ &\times \int Z^*(z_e) V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, z_e) Z(z_e) dz_e |Z(z)|^2.\end{aligned}\quad (2.23)$$

For a metallic 2DEG, Fermi-Dirac occupation statistics can be used and, as at low temperatures the derivative of the Fermi occupation function acts as a Dirac function, we obtain

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}, z) &= -\frac{2N(E_f)e^2}{S} \\ &\times \int Z^*(z_e) V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, z_e) Z(z_e) dz_e |Z(z)|^2\end{aligned}\quad (2.24)$$

where the factor 2 accounts for the spin degeneracy and where  $N(E_f)/S = n(E_f)$  represents the normalized 2DEG density of states. In order to get a simplified expression, the  $Z(z)$  envelope function is approximated to a  $\sqrt{\delta(z - z_L)}$  function, where  $z_L$  represents the position of the 2D layer supposed infinitely narrow. In such a case, contribution of the 2D layer to the induced charge is

$$\rho_{\text{ind}}^{2D}(\mathbf{r}, z) = -\epsilon_0 \epsilon_j \beta \delta(z - z_L) V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, z) \quad (2.25)$$

where  $\beta = 2e^2 n(E_f) / \epsilon_0 \epsilon_j$  is the standard screening wavevector associated with the 2DEG.

### 3. Static dielectric function of composite material containing a planar 2D electronic layer

We have shown in sections 2.1, 2.2 and 2.3, that in any case, the static contribution to the induced charge of any 3D region  $j$  of the composition material may be written as

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= -\epsilon_0 \epsilon_j k_{G,j}^2 V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) & \text{if } \mathbf{r} \in V_j \\ \rho_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) &= 0 & \text{elsewhere}\end{aligned}\quad (3.1)$$

and for a 2D planar quantum well

$$\rho_{\text{ind}}^{2D}(\mathbf{r}) = -\epsilon_0 \epsilon_L \beta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \delta(z - z_L). \quad (3.2)$$

These last expressions allow us to derive a standard expression for the dielectric function.

Each induced charge distribution contributes to the total induced potential  $V_{\text{ind}}(\mathbf{r})$  by a quantity  $V_{\text{ind}}^j(\mathbf{r})$  which verifies the Poisson equation

$$\Delta V_{\text{ind}}^j(\mathbf{r}) = -\frac{\rho_{\text{ind}}^j}{\epsilon_0 \epsilon_j}. \quad (3.3)$$

Introducing the Green function  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  associated with the above Poisson equation, well suited to boundary conditions (i.e. continuity of the potential at boundaries, and discontinuity of the normal electric field at the boundary due to the variation of the dielectric constants), the induced potential is then given by

$$\begin{aligned}V_{\text{ind}}(\mathbf{r}) &= -\sum_j \epsilon_0 \epsilon_j k_{G,j}^2 \int_{V_j} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{\text{eff}}(\mathbf{r}') d^3r' - \epsilon_0 \epsilon_L \beta \\ &\times \int_{V_{2D}} G_L(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{\text{eff}}(\mathbf{r}') \delta(z' - z_L) d^3r'.\end{aligned}\quad (3.4)$$

The Fourier transform of (3.4) is

$$\begin{aligned}V_{\text{ind}}(\mathbf{q}) &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_j \epsilon_0 \epsilon_j k_{G,j}^2 \\ &\times \int_{V_{\infty}} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}') \left( \int_{V_j} G_j(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}') d^3r' \right) d^3q' \\ &- \epsilon_0 \epsilon_L \beta \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_{\infty}} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}') d^3q' \int_{S_{2D}} G_L(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \\ &\times \exp(-i\mathbf{q}'_{\parallel} \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}'_{\perp} z_L) d^2r'\end{aligned}\quad (3.5)$$

where we have also expressed the effective potential in terms of its Fourier transform. Since the effective potential corresponds to the sum  $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) + V_{\text{ind}}(\mathbf{q})$ , the external potential can be written as

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) = \int_{V_{\infty}} \epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') V_{\text{eff}}(\mathbf{q}') d^3q' \quad (3.6)$$

where we have introduced the dielectric function of the composite medium containing one 2D quantum well

$$\begin{aligned}\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &= \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_j \epsilon_0 \epsilon_j k_{G,j}^2 \\ &\times \int_{V_j} G_j(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}') d^3r' + \frac{1}{(2\pi)^3} \epsilon_0 \epsilon_L \beta \\ &\times \int_{S_{2D}} G_L(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}'_{\parallel} \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}'_{\perp} z_L) d^2r'.\end{aligned}\quad (3.7)$$

Generally speaking, the actual inverse dielectric function  $\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ , needed in practical calculations will only be obtained by an iterative procedure or some approximations.

#### 4. Particular case of a homogeneous dielectric constant

This case fits best to the experimental situations and allows us to derive, in a simple way, the expression for the effective potential acting against the 2DEG motion in a quantum well.

As soon as the dielectric constant ( $\epsilon_r$ ) is the same everywhere in the material (which obviously excludes situations where metallic regions are present), the Poisson equations (3.3) possess one and the same Green function for all the regions. This corresponds to the classical expression

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad \text{or equivalently} \\ G(\mathbf{q}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\epsilon_0\epsilon_r q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'). \quad (4.1)$$

Introducing this last expression in the definition of the dielectric constant, one obtains

$$\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{1}{q^2(2\pi)^3} \sum_j k_{G,j}^2 \\ \times \int_{V_j} \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'] d^3r' + \frac{1}{q^2(2\pi)^3} \beta \\ \times \int_{S_{2D}} \exp[i(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{q}'_{\parallel})\mathbf{r}'] \exp[i(q_z - q'_z)z_L] d^2r' \quad (4.2)$$

where obviously, the various integrals entering (4.2) act as Kronecker functions

$$\int_{V_j} \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'] d^3r' \equiv V_j \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \quad (4.3)$$

and, for a quantum well situated in  $z_L = 0$

$$\int_{S_{2D}} \exp[i(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{q}'_{\parallel})\mathbf{r}'] \exp[i(q_z - q'_z)z_L] d^2r' \\ = \int_{S_{2D}} \exp[i(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{q}'_{\parallel})\mathbf{r}'] d^2r' \equiv S \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}'_{\parallel}}. \quad (4.4)$$

Introducing these results in (4.2), we easily obtain

$$\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{\sum_j V_j k_{G,j}^2}{q^2(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} + \frac{\beta}{q^2} \frac{S}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}'_{\parallel}}. \quad (4.5)$$

Finally, the static dielectric function of composite material containing a 2D planar quantum well and in which dielectric constant is the same everywhere is given by

$$\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{k_M^2}{q^2} \frac{V_{\infty}}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} + \frac{\beta}{q^2} \frac{S}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}'_{\parallel}} \quad (4.6)$$

where we have introduced a mean generalized Debye-Hückel wavevector defined by

$$k_M^2 = \frac{1}{V_{\infty}} \sum_j V_j k_{G,j}^2. \quad (4.7)$$

#### 5. Effective scattering potential acting on the 2DEG

The expression of the dielectric function (4.6) allows the determination of the external potential in terms of the effective potential. Using (3.6) we obtain

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) = \int V_{\text{eff}}(\mathbf{q}') \left( \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + \frac{k_M^2}{q^2} \frac{V_{\infty}}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \right. \\ \left. + \frac{\beta}{q^2} \frac{S}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}'_{\parallel}} \right) d^3q'. \quad (5.1)$$

The first integration including the Dirac function is trivial. The two others may be replaced by sums weighted by inverse densities of states (respectively  $(2\pi)^3/V_{\infty}$  and  $(2\pi)^2/S$ ) which, in fact, account for the finite dimensions of the whole material. Thus

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) = V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \left( 1 + \frac{k_M^2}{q^2} \right) + \frac{\beta}{q^2} \frac{1}{2\pi} \int V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, q'_z) dq'_z. \quad (5.2)$$

Obviously the last integral in (5.2) is equivalent to the inverse Fourier transform versus  $q'_z$  calculated at  $z = 0$

$$\frac{1}{2\pi} \int V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, q'_z) dq'_z = \left( \frac{1}{2\pi} \int V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, q'_z) \right. \\ \left. \times \exp(-iq'_z z) dq'_z \right)_{z=0} = V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, z = 0). \quad (5.3)$$

Actually, this last expression represents the effective scattering potential we are looking for. Thus

$$\frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{1 + k_M^2/q^2} = V_{\text{eff}}(\mathbf{q}) + V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, z = 0) \frac{\beta}{q^2 + k_M^2}. \quad (5.4)$$

We now perform the inverse Fourier transform versus  $q_z$  of this relation and take its value in  $z = 0$ . It gives

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{1 + k_M^2/q^2} dq_z = V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, z = 0) \\ \times \left( 1 + \frac{\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{q_{\parallel}^2 + q_z^2 + k_M^2} \right) \quad (5.5)$$

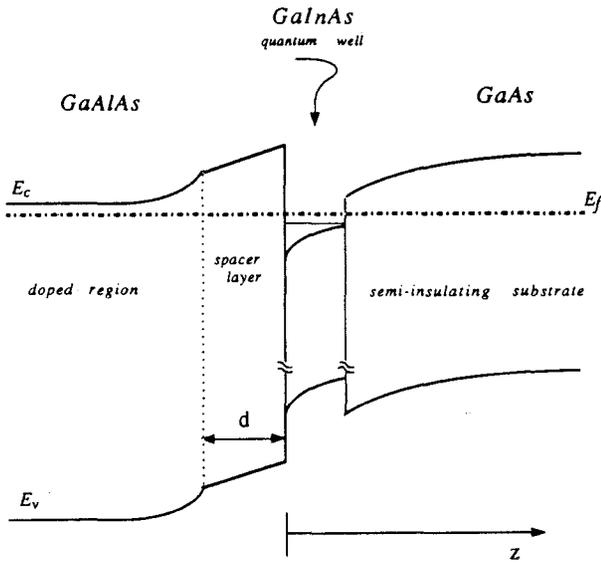
with

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{q_{\parallel}^2 + q_z^2 + k_M^2} = \frac{\pi}{\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}}. \quad (5.6)$$

The effective scattering potential acting on the 2DEG is finally given by

$$V_{\text{eff}}(q_{\parallel}, z = 0) = \frac{1}{2\pi} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q^2 V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{q^2 + k_M^2} dq_z}{1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}}}. \quad (5.7)$$

The physical meaning of the above expression is immediate: its numerator is nothing else but the external scattering potential, screened by the dielectric response of the surrounding media and calculated at the  $z = 0$  position of the quantum well. Its denominator would correspond to the direct screening of the above potential by the dielectric response of the well if  $k_M$  was absent from this expression. However, its presence is likely since it indicates that the dielectric response is non-local and includes correlations between the different parts of the composite material.



**Figure 1.** Schematic representation of the spatial band structure of the GaAlAs–GaInAs–GaAs single quantum well heterostructure used in the numerical calculation.

## 6. Ionized impurity scattering

In order to show the applicability of our method, we consider for instance the following semiconducting heterostructure: a 2D GaInAs layer (thickness  $L \rightarrow 0$ ) grown on a semi-infinite semi-insulating GaAs substrate and covered by a non-intentionally doped GaAlAs spacer (thickness  $d$ ), followed by a semi-infinite doped ( $N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) GaAlAs medium.

The corresponding band structure is drawn in figure 1. As can be seen in this figure, the spacer layer lies inside the space charge region (or depletion layer) where there are no free carriers and where localized states can be considered as totally ionized. Therefore, this region cannot participate in the dielectric response of the surrounding medium. The semi-insulating character of the substrate issues from the presence of deep states which compensate the residual doping. In principle, the deep states can participate in the screening. However, their density ( $10^{15-16} \text{ cm}^{-3}$ ) is generally much lower than the density of the highly doped layer so their contribution to the screening will generally be negligible in comparison with that of the highly doped medium. With the above assumptions, the generalized Debye–Hückel wavevector of the surrounding medium (4.7) depends only on the free electron density of the GaAlAs medium:

$$k_M^2 = \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r kT} n(T).$$

We now consider a distribution, at random points  $R_j$  in the whole structure, of ionized impurities bearing a charge  $Q$ . They would create, in a vacuum, an external potential whose Fourier transform is given by

$$V_{\text{ext}}(q) = \frac{Q}{q^2\epsilon_0\epsilon_r} \sum_j \exp(iq \cdot R_j). \quad (6.1)$$

Inserted in expression (5.7), it gives for the effective potential acting on the well carriers

$$V_{\text{eff}}(q_{\parallel}) = \frac{Q}{2\pi\epsilon_r\epsilon_0} \sum_j \exp(iq_{\parallel} \cdot r_j) \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(iq_z z_j)}{q^2 + k_M^2} dq_z}{1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}}} \quad (6.2)$$

where the  $r_j$  now represent 2D  $Oxy$  vectors.

The integration versus  $q_z$  is standard and leads to

$$V_{\text{eff}}(q_{\parallel}) = \frac{Q}{\epsilon_r\epsilon_0} \sum_j \exp(iq_{\parallel} \cdot r_j) \frac{\exp(-|z_j|\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})}{\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}}. \quad (6.3)$$

As the distribution of ionized impurities has various origins, the sum can be split up into various effective potential contributions:

- (i) Contribution of the compensated acceptor impurities which are distributed all over the material (inside or outside the quantum well):  $V_{\text{eff}}^{(i)}(q_{\parallel})$ ;
- (ii) contribution of the ionized deep centres in the substrate:  $V_{\text{eff}}^{(ii)}(q_{\parallel})$ ;
- (iii) contribution of the residual impurities in the spacer which are all ionized:  $V_{\text{eff}}^{(iii)}(q_{\parallel})$ ;
- (iv) contribution of the residual ionized impurities in the 2D layer (or background impurities):  $V_{\text{eff}}^{(iv)}(q_{\parallel})$ ;
- (v) contribution of the ionized charges generated by the electron transfer from the doped layer down to the well:  $V_{\text{eff}}^{(v)}(q_{\parallel})$ . These ionized charges are localized in the so-called space charge region situated at the interface of the doped region and the spacer. With a volumic density  $N_d$  of the doped layer and a resulting superficial free carrier density  $n_s$  in the well, the space charge region width is about  $d_{\text{sc}} = n_s/N_d$ . This charge transfer exists at zero temperature and is practically independent of temperature as long as  $T$  is small;
- (vi) contribution of the thermal ionization of the remote donors in GaAlAs doped layer:  $V_{\text{eff}}^{(vi)}(q_{\parallel})$ .

In order to calculate the relaxation time, we need the square modulus of the total potential given by the sum of all the previous contributions. Since any charge centre acts independently, we obtain

$$|V_{\text{eff}}(q_{\parallel})|^2 = \sum_i |V_{\text{eff}}^{(i)}(q_{\parallel})|^2. \quad (6.4)$$

In practical cases, numerical calculations indicate that only the three last contributions are significant. Their expressions are

$$|V_{\text{eff}}^{(iv)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{Q^2}{(\epsilon_r\epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \times \sum_{i,j}^{\text{Back.}} \exp[iq_{\parallel} \cdot (r_i - r_j)] \quad (6.5)$$

and

$$|V_{\text{eff}}^{(v)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{Q^2}{(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \times \sum_{i,j}^{\text{S.C.}} \exp[iq_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \times \exp\left(-(|z_i| + |z_j|)\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right) \quad (6.6)$$

and

$$|V_{\text{eff}}^{(vi)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{Q^2}{(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \times \sum_{i,j}^{\text{doped}} \exp[iq_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \times \exp\left(-(|z_i| + |z_j|)\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right). \quad (6.7)$$

In the three cases, for random distributions, the double summation vanishes except when  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ . Thus

$$|V_{\text{eff}}^{(vi)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{N_B Q^2}{(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \quad (6.8)$$

where  $N_B$  is the background impurity density, supposed to be temperature independent

$$|V_{\text{eff}}^{(v)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{Q^2}{(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \times \sum_i^{\text{S.C.}} \exp\left(-2|z_i|\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right) \quad (6.9)$$

and

$$|V_{\text{eff}}^{(vi)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{Q^2}{(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2} \times \sum_i^{\text{doped}} \exp\left(-2|z_i|\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right). \quad (6.10)$$

The last sum in (6.9) and (6.10) can be evaluated by transforming them into integrals weighted by a kind of density of states of the donor distribution:

- (i) for the doped layer ( $-\infty < z_i < -d_{\text{sc}} - d$ ), it turns out to be the volume ionized donor density  $N_D^+(T)$ ;
- (ii) for the space charge region ( $-d_{\text{sc}} - d < z_i < -d$ ) it is simply given by the donors density  $N_d$ .

We thus obtain

$$|V_{\text{eff}}^{(v)}(q_{\parallel})|^2 = \left\{ N_d Q^2 \exp\left(-2d\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right) \times \left[ 1 - \exp\left(-2d_{\text{sc}}\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}\right) \right] \right\} \times \left[ 2(\epsilon_r \epsilon_0)^2 (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2 \sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2} \right]^{-1} \quad (6.11)$$

and

$$|V_{\text{eff}}^{(vi)}(q_{\parallel})|^2 = \frac{N_D^+(T) Q^2 \exp\left(-2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2}(d+d_{\text{sc}})\right)}{2(\epsilon_r \epsilon_0)^2 \sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2} (\beta + 2\sqrt{q_{\parallel}^2 + k_M^2})^2}. \quad (6.12)$$

Introduced into (1.1), the three contributions (6.8), (6.11) and (6.12) lead respectively to the following expressions for relaxation time

$$\frac{1}{\tau_{(iv)}(k)} = \frac{N_B Q^2 e^2 m^*}{\pi (\epsilon_r \epsilon_0)^2 \hbar^3} \times \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2(\phi/2)}{(\beta + 2\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2})^2} d\phi \quad (6.13)$$

and

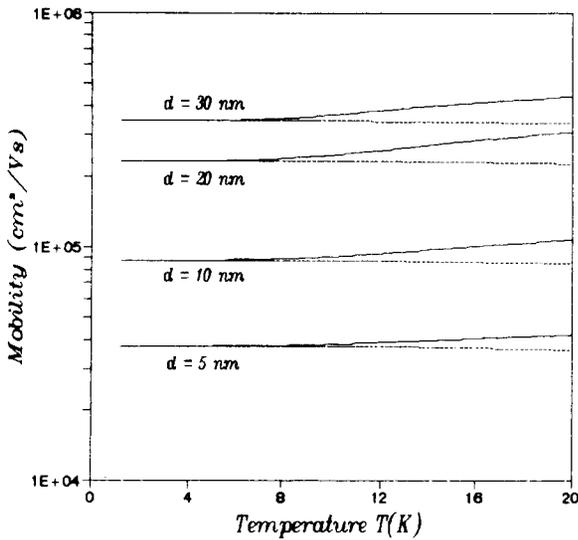
$$\frac{1}{\tau_{(v)}(k)} = \frac{N_d Q^2 e^2 m^*}{2\pi (\epsilon_r \epsilon_0)^2 \hbar^3} \times \int_0^{2\pi} \left\{ \exp\left(-2d\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2}\right) \times \left[ 1 - \exp\left(-2d_{\text{sc}}\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2}\right) \right] \times \sin^2(\phi/2) \right\} \left[ \sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2} \times (\beta + 2\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2})^2 \right]^{-1} d\phi \quad (6.14)$$

and

$$\frac{1}{\tau_{(vi)}(k)} = \frac{N_D^+(T) Q^2 e^2 m^*}{2\pi (\epsilon_r \epsilon_0)^2 \hbar^3} \times \int_0^{2\pi} \left[ \exp\left(-2\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2}(d+d_{\text{sc}})\right) \sin^2(\phi/2) \right] \times \left[ \sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2} \times (\beta + 2\sqrt{4k^2 \sin^2(\phi/2) + k_M^2})^2 \right]^{-1} d\phi. \quad (6.15)$$

These angular integrals will be done numerically.

If the screening by the 2DEG surrounding media was not taken into account (or equivalently if  $k_M = 0$ ), one can find that those results would correspond to the classical ionized impurity relaxation time expressions found in the literature (see for instance [9]).



**Figure 2.** Mobilities versus temperature, obtained for various thicknesses  $d$  of the spacer layer. Results taking into account the contribution to the dielectric response of the surrounding media are drawn in full curves (upper curves). Results neglecting it are drawn in broken curves (lower curves). The parameters used are:  $Q = e$ ,  $N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_B = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\epsilon_r = 12.85$ ; the 2DEG density  $n_s$  is kept fixed ( $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) while the spacer thickness  $d$  is varied.

## 7. Numerical results and conclusions

For a 2D system, the current density is given by the well known relation

$$j = -\frac{e^2 \hbar^2}{2\pi^2 m^2} \int \frac{\partial f}{\partial E} \tau(k) (k \cdot E) k \, d^2 k. \quad (7.1)$$

Since the relaxation times  $\tau_{(iv)}(k)$ ,  $\tau_{(v)}(k)$  and  $\tau_{(vi)}(k)$  associated with impurities do not depend on the angle  $\theta = (k, 0x)$ , the 2DEG conductivity can easily be derived

$$\sigma = -\frac{e^2 \hbar^2}{2\pi m^2} \int \frac{\partial f}{\partial E} \tau(k) k^3 \, dk. \quad (7.2)$$

Restricting the calculation to the low-temperature range, where the derivative of the  $f$  function can be approximated to  $-\delta(E - E_f)$ , we simply obtain

$$\sigma \simeq \frac{n_s e^2 \tau(k_f)}{m^*} \quad \text{and} \quad \mu \simeq \frac{e \tau(k_f)}{m^*} \quad (7.3)$$

where  $k_f = \sqrt{2\pi n_s}$  is the Fermi wavevector, and

$$\frac{1}{\tau(k_f)} = \frac{1}{\tau_{(iv)}(k_f)} + \frac{1}{\tau_{(v)}(k_f)} + \frac{1}{\tau_{(vi)}(k_f)}. \quad (7.4)$$

Numerical applications have been carried out. The corresponding results are presented in figure 2. The 2D free carrier mobilities are represented versus temperature for various thicknesses of the spacer layer. We have drawn the results obtained (i) by considering

the screening of the whole material and (ii) as it is usually done in the literature, by neglecting the screening contribution of the surrounding media (i.e. by taking  $k_M = 0$  in the relaxation time expressions).

One notices that, for temperatures lower than or around the liquid helium temperature, both curves are nearly identical, therefore justifying the common practice which consists of neglecting the contribution due to screening by the surrounding media in this temperature range. Indeed, this physically means that there are not enough free carriers in the surrounding 2D layer at too low a temperature; which leads to a negligible neighbouring contribution to the dielectric response.

However, our numerical results indicate that this contribution becomes quite important at temperatures larger than the liquid helium temperature, and can no longer be neglected. For instance, for the realistic case of a 10 nm spacer layer, the correction can reach 20% at 20 K.

The purpose of the present work was mainly to point out the non-negligible contribution of the surrounding medium to the dielectric screening of the scattering potentials acting against the carriers of a 2DEG in a transport experiment. Although accurate transport expressions can be deduced from the Kubo transport quantum theory, we have chosen a Boltzmann-like approach since, as shown in [4, 5], it is the easiest way to explicitly demonstrate the screening contribution to transport properties, which is far from being trivial in the Kubo quantum formalism. Such quantum approaches are mainly used to describe transport in 2DEG when submitted to strong magnetic fields. In order to describe such situations, including the present effect of the neighbouring contribution to the screening, even in the simple frame of the Boltzmann transport theory, it would be necessary to derive an expression for the dielectric function in the presence of strong magnetic fields, taking into account the appearance of the Landau levels in the neighbouring materials as well as in the 2DEG. This is far from being done in the present work, which cannot therefore be directly applied to the description of quantum transport phenomena.

## References

- [1] Calkin M G and Nicholson P J 1962 *Rev. Mod. Phys.* **39** 361
- [2] For a review see Gerlach E and Grosse P 1977 *Festkörperprobleme XVII*
- [3] Farvacque J L 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1682
- [4] Farvacque J L 1994 *Phys. Status Solidi b* **181** 189
- [5] Farvacque J L 1994 *Phys. Status Solidi b* **181** 405
- [6] Lindhard J 1954 *K. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Meddr.* **28** 8
- [7] Adler S L 1962 *Phys. Rev.* **126** 413
- [8] Massut R, Penchina C M and Farvacque J L 1982 *J. Appl. Phys.* **53** 4964
- [9] Lee K, Shur M S, Drummond J J and Morkoç H 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 6432

## *ANNEXE C*

**Potentiel diffuseur efficace associé aux dislocations**

## Potentiel de diffusion efficace associé aux dislocations

---

Le module carré du potentiel diffuseur associé aux dislocations extérieures du puits quantique est donné par la relation (IV.21):

$$\left| V_{\text{vol}}^{\text{eff}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{L_x D_v}{2\pi \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^4 |V_{\text{vol}}^{\text{ext}}(q)|^2 dq_z}{(q^2 + k_M^2)^2}$$

Celui correspondant aux dislocations d'interface du puits est donné par la relation (IV.22):

$$\left| V_{\text{interf}}^{\text{eff}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{L_x D_s}{4\pi^2 \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)^2} \cdot \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q^2 V_{\text{surf}}^{\text{ext}}(q) dq_z}{q^2 + k_M^2} \right|^2$$

Si on remarque que pour tout opérateur linéaire P on a les relations:

$$|P(a+ib)|^2 = |P(a)|^2 + |P(b)|^2$$

et

$$\delta^2(q_y) = (L_y/2\pi) \delta(q_y) \quad \text{et} \quad L_x L_y = S$$

on aboutit à l'équation de base:

$$\left| V_{\text{eff}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{S \delta(q_y)}{2\pi^3 \left( 1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right)^2} \times$$

$$\left( 2\pi D_v \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(C + Pf(\psi))^2 + (Dq \sin(\psi))^2}{(q_z^2 + (q_{//}^2 + k_M^2))^2} dq_z \right] + D_s \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{C + Pf(\psi)}{q_z^2 + (q_{//}^2 + k_M^2)} dq_z \right]^2 + \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Dq \sin(\psi)}{q_z^2 + (q_{//}^2 + k_M^2)} dq_z \right]^2 \right)$$

Les changements de variables:

$$u = q_z/q_x \quad \text{et} \quad q'' = \frac{\sqrt{q_x^2 + k_M^2}}{q_x}$$

permettent de réécrire aisément les fonctions  $f(\theta)$  et  $\sin(\theta)$  en fonction de  $u$ :

$$f(\theta) = f(u) = K_1 + \frac{K_2}{1+u^2} + \frac{K_3u}{1+u^2} + \frac{K_4}{(1+u^2)^2} + \frac{K_5u}{(1+u^2)^2}$$

et

$$\sin(\theta) = \frac{K_6u + K_7}{\sqrt{1+u^2}}$$

où les constantes  $K_i$  sont des combinaisons linéaires de fonctions trigonométriques dépendant de l'angle  $\alpha = (Ox, b_c)$ . Dans le cas de dislocations toutes de caractère  $60^\circ$ , l'angle  $\alpha$  vaut  $-54,74^\circ$ . Les expressions qui suivent restent bien évidemment valables quel que soit le caractère des dislocations.

Si on pose:

$$a = \frac{1}{4} \cos(4\alpha) + \frac{5}{4\sqrt{2}} \sin(4\alpha) \qquad b = -\frac{1}{4} \sin(4\alpha) - \frac{5}{4\sqrt{2}} \cos(4\alpha)$$

$$c = -\frac{1}{6} \sin(2\alpha) - \frac{2\sqrt{2}}{3} \cos(2\alpha) \qquad d = -\frac{1}{6} \cos(2\alpha) + \frac{2\sqrt{2}}{3} \sin(2\alpha)$$

alors

$$\begin{aligned} K_1 &= c + b = -0,373 & K_2 &= -8b - 2c = 5,813 & K_3 &= -4a + 2d = -3,112 \\ K_4 &= 8b = -6,756 & K_5 &= 8a = 2,8912 & K_6 &= \cos\alpha = 0,5773 \\ K_7 &= \sin\alpha = 0,8165 \end{aligned}$$

D'où la nouvelle formulation du potentiel global:

$$\begin{aligned} |V_{\text{eff}}(q_x, z=0)|^2 &= \frac{S\delta(q_y)}{2\pi^3 q_x^2 \left(1 + \frac{\beta}{2\sqrt{q_x^2 + k_M^2}}\right)^2} \times \\ &\left\{ \frac{2\pi D_v}{q_x} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(C^2 + P^2 f(u)^2 + 2CPf(u) + D^2 (K_6 u + K_7)^2 q_x^2)}{(u^2 + q_x'^2)^2} du \right] \right. \\ &\left. + D_s \left[ \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(C + Pf(u))}{u^2 + q_x'^2} du \right)^2 + \left( \frac{D}{q_x} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(K_6 u + K_7)}{u^2 + q_x'^2} du \right)^2 \right] \right\} \quad (C.0) \end{aligned}$$

Le calcul d'intégration est long mais ne présente pas de difficulté majeure (pourvu que l'on ait sous la main un bon livre sur les intégrales; par exemple: Gradshteyn et Ryzhik 1965).

Dans le cas des dislocations du puits quantique, l'expression finale du module carré du potentiel diffuseur écranté est donnée par:

$$\left| V_{\text{eff}}^{\text{intert}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{S \delta(q_{//}) \cdot D_s}{2\pi (2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2} + \beta)^2} \times \left( D^2 K_7^2 q_x^2 + \left[ C + K_1 P + \frac{PK_2 |q_x|}{|q_x| + \sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} + \frac{PK_4 |q_x|^2}{k_M^2} \left( \frac{\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}}{2|q_x|} - \frac{|q_x|}{|q_x| + \sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} \right) \right]^2 \right) \quad (C.1)$$

Pour ce qui est des dislocations distribuées en volume:

$$\text{Si on pose } \frac{|q_x|}{\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2}} = \alpha$$

$$\left| V_{\text{eff}}^{\text{vol}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{S \delta(q_{//}) \mathcal{D}_s}{\pi (2\sqrt{q_{//}^2 + k_M^2} + \beta)^2 q_x} \left\{ \frac{\mathcal{D}^2}{2} \left( \alpha k_2^2 + \frac{k_2^2}{2} \right) q_x^2 + C_0 \alpha + \left( \frac{q_x^2}{k_M^2} \right) C_1 \left( -\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{1+\alpha} \right) \right. \\ \left. + \left( \frac{q_x^4}{k_M^4} \right) \left[ C_2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2\alpha^2} - \frac{2}{1+\alpha} \right) + \left( \frac{3}{8} C_3 + \frac{5}{16} C_4 \right) \frac{1}{\alpha^2} \right] \right. \\ \left. + \left( \frac{q_x^6}{k_M^6} \right) \left[ C_3 \left( -\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2\alpha^2} + \frac{3}{1+\alpha} \right) - C_5 \left( \frac{3}{4\alpha^2} \right) \right] + \left( \frac{q_x^8}{k_M^8} \right) C_5 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{5}{2} \frac{1}{\alpha^2} - \frac{4}{1+\alpha} \right) \right\} \quad (C.2)$$

où les constantes  $C_i$  désignent les quantités:

$$C_0 = \frac{1}{2} (\mathcal{C} + k_1 \mathcal{D})^2$$

$$C_1 = \mathcal{D}^2 k_2^2 + 2 \mathcal{D} k_2 (k_1 \mathcal{D} + \mathcal{C})$$

$$C_2 = 2 \mathcal{D} k_1 (k_1 \mathcal{D} + \mathcal{C}) + \mathcal{D}^2 (k_2^2 - k_3^2 + 2 k_3 k_2)$$

$$C_3 = \mathcal{D}^2 (k_2^2 + 2 k_1 k_2 - 2 k_3 k_2)$$

$$C_4 = \mathcal{D}^2 (k_1^2 - k_3^2)$$

Dans les deux expressions ci-dessus, les contributions des effets de coeur et piezoélectrique sont, comme prévu, intimement liés. Ce type de couplage apparait naturellement toutes les fois qu'on est en présence de potentiels issus du même centre diffuseur et en phase.

En reprenant l'étude ci-dessus à partir de la relation (C.0), il est possible de dériver les expressions des modules carrés des potentiels diffuseurs écrantés uniquement par la réponse diélectrique du gaz bidimensionnel. Il suffit de poser  $q''=1$  (situation correspondant à une constante d'écran généralisée  $k_M$  nulle). A l'issu du calcul, nous trouvons :

$$\left| V_{\text{vol}}^{\text{eff}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{S\delta(q_y)D_v}{\pi(2q_x + \beta)^2} \cdot \left\{ \frac{D^2(K_6^2 + K_7^2)q_x^2}{2} + C_0 + \frac{3}{8}C_1 + \frac{5}{16}C_2 + \frac{35}{256}C_3 + \frac{63}{513}C_4 \right\} \quad (C.3)$$

et

$$\left| V_{\text{interf}}^{\text{eff}}(q_{//}, z=0) \right|^2 = \frac{S\delta(q_y)D_s}{2\pi(2q_x + \beta)^2} \cdot (D^2K_7^2q_x^2 + C^2) \quad (C.4)$$

Il est remarquable de constater que le potentiel piezoélectrique associé aux dislocations d'interface, est identiquement nul lorsqu'il n'est couplé à aucun potentiel coulombien de coeur ( $\lambda=0$ ) et lorsqu'il n'est écranté que par la réponse diélectrique du gaz 2D (relation (C.4)). L'écrantage composite permet d'en donner une expression fini non nulle (relation (C.2)), mais il existe toujours une valeur de l'angle  $\theta$ , différente des valeurs singulières 0 et  $\pi/2$ , pour laquelle la fréquence de collision associée devient nulle (artefact mathématique?). Cet angle est fonction de la densité de porteur  $v$  et de la constante piezoélectrique  $P$ , ou de façon plus générale de la constante  $K_1P+C$ .

Le potentiel diffuseur global associé aux distributions de dislocations s'écrit finalement:

$$\left| V_{\text{eff}}(q) \right|^2 = \left[ \left| V_{\text{Coeur}}^{\text{eff}}(q) \right|^2 + \left| V_{\text{Défor}}^{\text{eff}}(q) \right|^2 \right]_{\text{vol}} + \left[ \left| V_{\text{Coeur}}^{\text{eff}}(q) \right|^2 + \left| V_{\text{Défor}}^{\text{eff}}(q) \right|^2 \right]_{\text{interf}}$$

où chacun des modules carrés peut se mettre sous la forme:

$$|V_{\text{type}}^{\text{eff}}(q)|^2 = \delta(q_y) |V_{\text{type}}^{\text{eff}}(q_x)|^2$$

$$|V_{\text{type}}^{\text{eff}}(q)|^2 = \delta(q_y) \frac{D_s \text{ ou } v}{2\pi \left[ 2\sqrt{q^2 + k_M^2 + \beta^2} \right]} W_{\text{type}}(q_x)$$

Les expressions des quantités  $W_{\text{type}}(q_x)$  se déduisent par identification à partir des relations (C.1) et (C.2).

**Remarque:** les termes S (surface du système 2D) disparaissent une fois les fréquences de collision calculées. Il revient au même de poser dès à présent  $S=1$ .

# *Bibliographie*

## Bibliographie

- ALAMKAN J. 1993, Thèse de 3° cycle en Electronique, U.S.T. Lille.
- ALEXANDER H., HAASEN P., LABUSCH R. and SCHROTER W. 1979, J. Phys. C (6) **40**, Introduction.
- ANDERSON R.L. 1960, IBM Journal, Letter to the Editor, July 1960, 283-287.
- ANDERSON T.G., CHEN Z.G., KULAKOVSKII V.D., UDDIN A. and VALLIN J.T. 1987, Appl. Phys. Lett. **51** (10), 752-754.
- ANDO T., FOWLER A.B. and STERN E. 1982, Rev. Mod. Phys. **54** (2), 437.
- ANDO T. 1974, J. Phys. Soc. Jap. **37** (5), 1233-1237.
- ANDO T. 1982, Journal of the Physical Society of Japon **51** (12), 3900-3907.
- ASHIZAWA Y., AKBAR S., SCHAFF J., EASTMANN L. F., FITZGERALD E.A. and AST D.G. 1988, J. Appl. Phys. **64** (8), 4065-4073.
- BAHL S.R., AZZAM W.J. and DEL ALAMO J.A. 1991, J. Cryst. Growth **III**, 479-483.
- BARDEEN J. and SHOCKLEY W. 1950, Phys. Rev. **80** (1).
- BASTARD G. 1988, Wave Mechanics applied to semiconductor heterostructures, Monographies de physique, les Editions de Physique.
- BATTACHARYYA K, ORWA J.O. and GOODNICK S.M. 1993, J. Appl. Phys. **73** (9), 4396-4403.
- BAUDRY L. 1993, Thèse de 3° cycle en Electronique, U.S.T. Lille.
- BAUER E.G., DODSON B.W., EHRLICH D.J., FELDMAN L.C., FLYN C.P., GEIS M.W., HARBISON J.P., MATYI R.J., PEERCY P.S., PETROFF P.M., PHILLIPS J.M., STRINGFELLOW G.B. and ZANGWILL A., 1990, J. Mater. Res. **5** (4), 852-890.
- BEENAKKEN C.W.J. and VAN HOUTEN H. 1991, Solid State Physics **44**, 1-228.
- BEN AMOR S., DMOWSKI L., PORTAL J.C., MARTIN K.P., HIGGINS R.J. and RAZEGHI M. 1990, Appl. Phys. Lett. **57** (27), 2925-2927.
- BOUGRIOUA Z. 1990, Rapport de D.E.A. Science des Matériaux, U.S.T. Lille.
- BOUGRIOUA Z., FERRE D. and FARVACQUE J.L. 1994, Mat. Science Engineering **B 24**, 82-86.
- BRUM and BASTARD G. 1985, Solid State Communication **53**, 727.
- BURLE-DURBEC N. 1989, Thèse de 3° cycle, Université Aix-Marseille III.
- CALKIN M.G. and NICHOLSON P.J. 1962, Rev. Mod. Phys. **39**, 361.

- CARNEZ B., FAUQUENBERGUE R., SALMER G. and CONSTANT E. 1980, IEEE Transactions on electron device, E.D. 27 (11).
- CHEN J., FERNANDEZ J.M. and WIEDER H.H. 1992, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **263**, 377.
- COLERIDGE P.T. 1991, Phys. Rev. **B 44** (8), 3793-3801.
- COLERIDGE P.T., STONER R. and FLETCHER R. 1989, Phys. Rev. **B 39** (2), 1120-1124.
- CORDIER Y. 1992, Thèse de 3<sup>e</sup> cycle en Electronique, U.S.T. Lille.
- DALTON K.S.H. et al. 1993, Physica **B 184**, 202-205.
- DEBYE P., ANDERSON H.R. and BRUMBERGER H. 1957, J.A.P. **28** (6), 679-683.
- DELAGEBEAUDEUF D., DELESCLUSE P., ETIENNE P., CHAPLART J. and LINH N.P. 1980, Elctron. Lett. **16**, 607.
- DEXTER D.L. and SEITZ F. 1952, Phys. Rev., 86-964.
- DE HAAS W.J. and VAN ALPHEN P.M., Leiden Comm. 208 d, 212 a (1930), 220 d (1933).
- DIALLO A.O. 1990, Thèse de 3<sup>e</sup> cycle en Science des Matériaux, U.S.T. Lille.
- DINGLE R.B. 1952, Proc. Roy. Soc. **A 211**, 517-525.
- DÜSTER F. and LABUSCH R. 1973, Phys. Stat. Sol. (b) **60**, 161-168.
- ECONOMOU E.D. 1990, Green functions in quantum physics, Solid State Science 7.
- ESQUIVEL A.L., SEN S. and LIN W.N. 1975, J. Appl. Phys. **47** (6), 2588-2603.
- FAIVRE G. and SAADA G. 1972, Phys. Stat. Sol. (b) **52**, 127.
- FANG F.F. and HOWARD W.E. 1966, Phys. Rev. Lett. **16**, 797.
- FARVACQUE J.L. 1989, Phys. Rev. **B 39** (3), 1682-1688.
- FARVACQUE J.L.(a)- 1994 Phys. Stat. Sol. (b) **181**, 189-200.
- FARVACQUE J.L. 1995, soumis à Semicond. Sci. Technol.
- FARVACQUE J.L.(b)-1994, Phys. Stat. SOL (b) **181**, 405-419.
- FARVACQUE J.L., BOUGRIOUA Z. 1994, Semicond. Sci. Technol. 9, 1324-1331.
- FERRE D. 1987, Thèse de docteur d'Etat es Sciences Physiques, U.S.T. Lille.
- FERRE D., DIALLO A. and FARVACQUE J.L. 1990, Revue Phys. Appl. **25**, 177-182.
- FITZGERALD E.A. 1989, Journal of Metals **41** (4), 20-24.
- FITZGERALD E.A., AST D.G., ASHIWA Y., AKBAR S. and EASTMAN LL. 1988, J. Appl. Phys. **64**, 2473.

- FOWLER A.B., FANG F.F., HOWARD W.E. and STILES P.J. 1966, Phys. Rev. Lett. **16** (20), 901-903.
- FOX B.A. and JESSER W.A. 1990, J. Appl. Phys. **68** (6), 2739-2746.
- FREUND L.B. 1992, MRS Bulletin (July 1992), 53-60.
- FRITZ I.J., GOURLEY P.L., DAWSON L.R. 1987, Appl. Phys. Lett. **51** (13), 1004-1006.
- GEORGE A. and RABIER J. 1987, Rev. Phys. App. **22**, 941-966.
- GERHARDTS R.R. 1976, Surf. Sci. **58**, 227-234.
- GERLACH E. 1974, Phys. Stat. Sol. (b) **61**, K 97- K 100.
- GERLACH E. and GROSSE P. 1977, Fertkörperprobleme XVII, 157-193.
- GOIRAN M., GUASCH C., VOILLOT F., CARLES R., PEYRADE J.P., BEDEL E. and MUNOZ-YAGUE A. 1993, Europhys. Lett. **23** (9), 647-652.
- GOLD A. 1988, Phys. Rev. **B.38** (15), 10798-10811.
- GORNIK E. 1987, Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices, Plenum Press, 189-215.
- GRADSHTEYN I.S. and RYZHIK I.M. 1965, Table of Integrals, series and products, Académic Press.
- GREEN G.S. and TANNER B.K. 1990, Phil. Mag. Lett. **62** (3), 131-137.
- GRUNMAN M., LIENERT U., CHRISTEN J. and BIMBERG D. 1990, J. Vac. Sci. Technol. **B 8** (4), 751-757.
- GUDMUNDSSON V. and GERHARDTS R.R. 1988, Phys. Rev. **38** (6), 4218-4230.
- HALPERIN B.I. 1982, Phys. Rev. **B 25**, 2185.
- HAPPY H. 1992, Thèse de 3° cycle en Electronique, U.S.T. Lille.
- HARRIS J.J., PALS J.A. and WOLTJER R. 1989, Rep. Prog. Phys. **52**, 1217-1265.
- HAUG R.J. 1993, Semicond. Sci. Technol. **8**, 131-153.
- HERBEAUX C. 1990, Thèse de 3° cycle en Science des Matériaux, U.S.T. Lille.
- HIRAKAWA and SAKAKI 1986, Phys. Rev. **B 33** (12), 8291-8303.
- HIRTH J.P. and LOTHE J. 1982, Theory of dislocations, 2<sup>nd</sup> Ed, Wiley-Interscience Publication.
- HOWARD F. 1966, Phys. Rev. Lett. **16**, 797.
- ISHIHARA A. and SMRCKA L. 1986, J. Phys. C. : Solid State Phys. **19**, 6777-6789.
- ITO H., ISHIBASHI T. 1986, Jap. J. Appl. Phys. **25** (5), L 421-L 424.

- JONES R., OBERG A. and MARKLUND S. 1981, *Phil. Mag.* **B 43**, 839.
- KAVANAGH K.L., CAPANO M.A., HOBBS L.W., BABOUR J.C., MAREE P.M.J., SCHAFF W., MAYER J.W., PETTIT D., WOODALL J.M., STROSCIO J.A. and FEENSTRA R. M. 1988, *J. Appl. Phys.* **64** (10), 4843-4852.
- KIREEV P. 1975, *La Physique des Semiconducteurs*, Editions MIR, Moscou.
- KRAAK W., OELZE B., KUNZEL M., BACH H.G., BOTTGER J., NAKOV V., SCHULZE D. and GOBSCH G. 1994, *Phys. Stat. Sol. (b)* **183**, 437-453.
- KROEMER H. 1993, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 11** (4), 1354-1361.
- KUBO R. and HASEGAWA H. 1958, *Phys. Rev. Lett.* **8** (1), 279-281.
- KUBO R. and MIYAKE S.J. 1965, *Solid State Physics* **17**, 269.
- KUSTERS R.M., JANSSEN T.J.B.M., LANGERAK C.J.G.M., SINGETON J., PERENBOOM J.A.A., JONES G.A.C., RITCHIE D.A. and FROST J.E.F. 1992, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 961-967.
- LANDWEHR G. 1986, *Metrologica* **22**, 118-127.
- LASSNIG R. 1988, *Solid State Communications* **65** (7), 765-768.
- LAUGHLIN R.B. 1981, *Phys. Rev.* **23** (10), 5632-5633.
- LEE K., SHUR M.S., DRUMMOND J.J. and MORKOC H. 1983, *J. Appl. Phys.* **54** (11), 6432-6438.
- LUO J.K., OHNO H., MATSUZAKI K. and HASEGAWA H. 1988, *Jap. J. Appl. Phys.* **27** (10), 1831-1840.
- MACDONALD A. H. 1989, *Quantum Hall effect: a perspective*, Jaca Book.
- MARKUS Y., MEIRAV U., SHTRIKMAN H. and LAIKHTMAN 1994, *Semicond. Sci. Technol.* **9**, 1297-1304.
- MATTHEWS J.W. 1975, *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 126.
- MATTHEWS J.W. and BLAKESLEE A.E. 1974, *J. Cryst. Growth* **27**, 118-125.
- MERTEN L. 1964, *Phys. Kondens. Materie* **2**, 53.
- MONTGOMERY H.C. 1971, *J. Appl. Phys.* **42** (7), 2971-2975.
- NAKASHIMA H., KISHINO S., CHINONE N. and ITO R. 1977, *J. Appl. Phys.* **48** (7), 2771-2775.
- NAKATA H. and NINOMIYA T. 1977, *J. of the Phys. Soc. of Japan* **42**, 552.
- NEUMARK G.F. 1970, *Phys. Rev.* **B 1** (6), 2613-2622.
- NINOMIYA T.J. 1979, *J. de Phys.* **40** (6), 143.

- PETROFF J.F., SAUVAGE M., RIGLET P. and HASHIZUME H. 1980, *Phil. Mag. A* **42** (3), 319-338.
- PICHAUD B., JEAN P. and MINARI F. 1986, *Phil. Mag. A* **54** (4), 479-487.
- PÔDÔR B. 1975, *Acta Technica Academia Scientanum Hungaricae* **80**, 231-236.
- PRANGE R.E. 1981, *Phys. Rev. B* **23**, 4802.
- PRANGE R.E. and GIRVIN S.M. 1990, *The Quantum Hall Effect*, New York Springer-Verlag.
- PRICE W.L.V. 1972, *J. Phys. D.: Appl. Phys.* **5**, 1127-1132.
- PRICE W.L.V. 1973, *Solid State Electronics* **16**, 753-762.
- RADULESCU D.C., WICKS G.W., SCHAFF W.J., CALAWA A.R. and EASTMAN L.F. 1988, *J. Appl. Phys.* **63** (10), 5115-5120.
- READ W.T. 1954, *Phil. Mag.* **45** (367), 775.
- REICHL L.E., *A modern course in statistical physics*, Edward Arnold LTD.
- RIDLEY B.K. 1988, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 111-115.
- RIKKEN G.L.J.A., VAN HAAREN J.A.M.M., VAN DEBWEL W., VAN GELDER A.P., VAN KEMPEN H., ANDRE J.P., PLOOG K. and WEIMANN G. 1988, *Physical Review B* **37** (11), 6181-6186.
- SAKAKI H., NODA T., HIRAKAWA K., TANAKA M. and MATSUSUE T 1987, *Appl. Phys. Lett.* **51** (23), 1934-1936.
- SCHUBERT E.F., PLOOG K., DAMBKES H. and HEIME K. 1984, *Appl. Phys. A* **33**, 63-76.
- SCHWEIZER T., KOHLER K., ROTHEMUND W. and GANSER P. 1991, *Appl. Phys. Lett.* **59** (21), 2736-2738.
- SHUBNIKOV L. and DE HAAS W.J. 1930, *Leiden Comm.* 207 a, 207 c, 270 d, 210 a.
- SICHEL E.K., KNOWLES M.L., SAMPLE H.H. 1986, *J. Phys. C.* **19**, 5695-5713.
- STERN F. 1972, *Phys. Rev. B* **5** (12), 4891-4899.
- STORMER H.L. 1992, *Physica Scripta T* **45**, 168-173.
- STREDA 1982, *J. Phys. C. : Solid State Phys.* **15**, L 717-L 721.
- SUN Q., MORRIS D., LACELLE C. and ROTH A.P. 1990, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **160**, 783-788.
- SZE S.M. 1990, *High-speed semiconductor devices*, Wiley-Interscience John Wiley & Sons, Inc.
- TANNER B.K. and BOWEN D.K. 1980, *Characterization of Crystal Growth Defects by X ray Methods*, *Nato adv. Sta. Inst. Ser. B* **63**.

- THOBEL J.L., BAUDRY L., BOUREL P., DESSENNE F. and CHAREF M. 1993, J. Appl. Phys. **74** (10), 6274-6280.
- UCHIDA Y., KAKIBAYASHI H., GOTO S. 1993, J. Appl. Phys **74** (11), 6720-6725;
- ULHAQ-BOUILLET C. 1993, Thèse de 3<sup>e</sup> cycle, U.S.T. Lille.
- ULHAQ-BOUILLET C., LEFEBVRE A. and DI PERSIO J. 1994, Phil. Mag. A **69** (5), 995-1015.
- VAN DER PAUW L.J. 1958, Philips Res. Repts **13**, 1-9.
- VAN HALL P.J., KLAVER T. and WOLTER J.H. 1988, Semicond. Sci. Technol. **3**, 120-123.
- VIGNAUD D. 1994, communication personnelle.
- VIGNAUD D. and FARVACQUE J.L. 1989, J. of Appl. Phys. **65**, 1516.
- VIGNAUD D., FARVACQUE J.L. and FERRE D. 1982, Phys. Stat. Sol. (b) **110**, 601-609.
- VON KLITZING K. 1986, Rev. Mod. phys. **58** (3), 519-531.
- VON KLITZING K., DORDA G. and PEPPER M. 1980, Phys. Rev. Lett. **45**, 494.
- WAGNER G. and PAUFLER P. 1993, Phys. Stat. Sol.(a) **138**, 389-402.
- WAGNER G., PAUFLER P., ROHDE G. 1989 and Z. fur Kristallog **189**, 269-292.
- WASSCHER J.D. 1969, Philips Res. Rep. Suppl. **8**, 17-24.
- WOLTJER R. 1989, Semicond. Sci. Technol. **4**, 155-167.
- WOLTJER R., BLANK M.J.M., HARRIS J.J., FOXON C.T. and ANDRE J.P. 1988, Phys. Rev. **B 38** (18), 13297-13306.
- WOODALL J.H., PETTIT G.D., JACKSON T.N. and LANZA C. 1983, Phys. Rev. Letters **51** (19), 1783-1786.
- ZHAO D. and KUHN K.J. 1991, IEEE Transactions on electron devices **38** (12), 2582-2589.

### *Abstract*

We have studied transport properties alteration by dislocations in two dimensionnal electronic gas (2DEG). The semiconducting heterostructures which support the 2D systems used in this work are mainly pseudomorphic structures of GaAlAs-GaInAs-GaAs type.

A first set of structures contains dislocations which have been introduced by bending experiments. This kind of plastic deformation may also generate some one-dimensionnal interface roughness. In the second set of stuctures, the GaInAs layer thickness is chosen slightly higher than the critical thickness, in order to develop native misfit dislocations. In both kind of systems, the sub-structure of dislocations is made up of one family of absolute straight and relatively long dislocations lines, all parallel to one single direction  $\langle 110 \rangle$ .

Quantum transport experiments at low temperature (Shubnikov-De Haas effect and quantum Hall effect) have been carried out on both kind of structures. They can be explained theoretically in the frame of a new transport formalism particularly suitable for anisotropic scattering potentiels. Several results can be pointed out. Scattering mecanisms induced by dislocation charge line and by possible 1D interface roughness are responsible for a reduction of the electric mobility when measured perpendicular to the linear defects, while no modification is expected when the mobility is measured parallel to this defects. The electronic gas density is kept constant which is not in contradiction with the existence of 1D extrinsic states associated to dislocations. The electronic gas still behave like a 2DEG in bent structures unlike the plastically relaxed ones. The difference is certainly due to both the density of dislocations near the quantum well and the difference of the Cottrell atmosphere of the two kind of dislocations. The Dingle plot modification can be understood as an extra Landau levels broadening and can be theoretically explained when considering the existence of the extra anisotropic scattering potentiel induced by the linear defects.

