

TABLEAU III

| Température θ en °C | $\frac{(C_{44})\theta}{(C_{44})_0}$ | $\frac{(C_{11} - C_{12})\theta}{(C_{11} - C_{12})_0}$ | $\frac{(C_{11})\theta}{(C_{11})_0}$ | Température θ en °C | $\frac{(C_{44})\theta}{(C_{44})_0}$ | $\frac{(C_{11} - C_{12})\theta}{(C_{11} - C_{12})_0}$ | $\frac{(C_{11})\theta}{(C_{11})_0}$ |
|-------------------------------|-------------------------------------|---|-------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------------|---|-------------------------------------|
| 50 | 0,99839 | 0,99839 | 0,99816 | 400 | 0,97361 | 0,97219 | 0,96944 |
| 75 | 0,99689 | 0,99683 | 0,99624 | 425 | 0,97166 | 0,97026 | 0,96743 |
| 95 | 0,99564 | 0,99554 | 0,99472 | 455 | 0,96949 | 0,96788 | 0,96474 |
| 125 | 0,99361 | 0,99341 | 0,99239 | 485 | 0,96718 | 0,96554 | 0,96220 |
| 150 | 0,99197 | 0,99167 | 0,99048 | 515 | 0,96485 | 0,96307 | 0,95956 |
| 175 | 0,99027 | 0,98991 | 0,98846 | 545 | 0,96234 | 0,96050 | 0,95711 |
| 200 | 0,98854 | 0,98810 | 0,98643 | 580 | 0,95947 | 0,95748 | 0,95422 |
| 225 | 0,98665 | 0,98612 | 0,98428 | 630 | 0,95524 | 0,95290 | 0,95005 |
| 260 | 0,98416 | 0,98346 | 0,98137 | 680 | 0,95087 | 0,94824 | 0,94558 |
| 300 | 0,98120 | 0,98017 | 0,97794 | 730 | 0,94652 | 0,94338 | 0,94090 |
| 340 | 0,97815 | 0,97696 | 0,97459 | 780 | 0,94207 | 0,93833 | 0,93604 |
| 380 | 0,97515 | 0,97387 | 0,97111 | 830 | 0,93754 | 0,93305 | 0,93133 |

TABLEAU IV

| Auteurs | Type de Si | Résistivité | Concentration de porteurs libres cm ⁻³ | Température de mesure °C | Densité mesurée g cm ⁻³ | C_{ij} en 10 dynes/cm ² | | | |
|-----------------------------------|------------|----------------------|---|--------------------------------|--|--------------------------------------|----------|-----------------------------|----------|
| | | | | | | C_{11} | C_{44} | $\frac{C_{11} - C_{12}}{2}$ | C_{12} |
| McSkimin <i>et al.</i> (28) | p | 410 | — (*) | 25 | 2,331 | 165,78 | 79,61 | — | 63,90 |
| Hall (29) | n | $3,26 \cdot 10^{-3}$ | $1,98 \cdot 10^{19}$ | » | 2,3297 | 163,94 | 79,19 | — | 64,77 |
| | n | 150 | — | » | 2,329 | 165,64 | 79,51 | — | 63,94 |
| Kadyshevich <i>et al.</i> (30) | n | — | $5 \cdot 10^{14}$ | 7 (**) | 2,320 | 164,9 | 79,4 | 50,7 | — |
| | p | — | $6,5 \cdot 10^{16}$ | » | » | 164,1 | 78,8 | 51,00 | — |
| Nos résultats | p | $220 \cdot 10^{-3}$ | $4,8 \cdot 10^{16}$ | 25 | 2,329 | 165,25 | 79,02 | 50,68 | 63,89 |

(*) Le trait plein signifie non précisé explicitement.

(**) La diminution des C_{ij} de 7 °C à 25 °C est de environ 0,1 p. cent.

IV-E. **Essai d'interprétation des résultats.** — Les constantes élastiques d'un monocristal sont définies à partir des fonctions thermodynamiques d'état. C'est ainsi qu'on définit les constantes élastiques isentropiques, C_{ijkl}^S et isothermes C_{ijkl}^T .

$$C_{ijkl}^S = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \right) S \left\{ \begin{array}{l} \text{ou } i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ \text{et } F = U - TS \end{array} \right.$$

U , S et F sont respectivement l'énergie interne, l'entropie et l'énergie libre par unité de volume du monocristal; ε_{ij} , les déformations élastiques; T , la tempé-

rature absolue. On admet que dans la méthode d'impulsions et, en général, dans toutes les méthodes dynamiques, les parties adjacentes du monocristal qui subissent une contrainte ultrasonore instantanée de signe contraire, n'ont pas le temps d'échanger l'énergie thermique. Les constantes élastiques ainsi mesurées sont alors adiabatiques et elles peuvent être considérées comme isentropiques, compte tenu de la faible atténuation des ultrasons dans le monocristal.

1) **Valeurs des constantes élastiques à 25° C.** — Le calcul de ces constantes à 25° C fait intervenir l'énergie des vibrations des atomes. Par contre, à 0° K, on peut, en première approximation faire abstraction de ces

vibrations et considérer les atomes comme étant immobiles. Malgré cette simplification, les modèles proposés jusqu'à maintenant pour calculer les constantes élastiques des monocristaux ayant la structure du diamant, et en particulier ceux du silicium, conduisent à des écarts sensibles entre les valeurs calculées et expérimentales.

Wohlfarth [31] a montré que le calcul de ces constantes pour le silicium à partir d'un modèle où la distribution électronique autour du noyau est supposée uniforme conduit à une valeur négative pour la constante de cisaillement $\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$. Il a aussi montré qu'un modèle à potentiel central ne convient pas non plus pour le silicium, et, en général, pour toute structure de type diamant, puisqu'il conduit à une valeur nulle pour $\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$.

Plus récemment, Simon [32] a calculé les constantes élastiques du Ge d'après un modèle dans lequel la distribution électronique supposée tient compte, du moins approximativement, des liaisons particulières de covalence entre un atome et ses quatre plus proches voisins.

Cette même méthode de calcul appliqué au Si conduit ⁽¹⁾ aux valeurs indiquées dans le tableau V où nous avons également porté nos résultats à 25° C. Bien que les écarts entre cette théorie et l'expérience restent importants, le modèle proposé par Simon a néanmoins le mérite de donner l'ordre de grandeur des constantes élastiques. On trouvera ailleurs des détails sur ce modèle [17].

TABLEAU V

| Constantes élastiques en 10 dynes/cm ² | C ₄₄ | C ₁₁ | $\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ |
|--|-----------------|-----------------|--------------------------------|
| Valeurs théoriques à 0°K . | 432 | 274 | 85 |
| Nos résultats à 298°K (*) . | 79 | 165 | 52 |

(*) L'augmentation relative des C_{ij} de 298°K à 0°K ne dépasse pas 1 p. 100.

2) **Variation des constantes élastiques en fonction de la température.** — On sait que la dilatation thermique et la variation des constantes élastiques avec la température sont dues à la nature anharmonique des vibrations atomiques. Or, nous avons vu qu'à l'heure actuelle, le modèle le plus satisfaisant pour le calcul des constantes élastiques du Si fait abstraction de ces vibrations. En fait, il n'existe actuellement aucune tentative théorique pour calculer à la fois les constantes élastiques du Si et leurs variations en fonction de la température.

En revanche, les travaux de Leibfried et Ludwig sur l'anharmonicité dans les monocristaux leur ont permis d'obtenir, moyennant certaines approximations, une relation générale entre les constantes élastiques et la température [33]. Toutefois, cette relation contient des

paramètres qu'on peut déterminer en ajustant la relation théorique à une partie de la courbe expérimentale de la variation d'une constante élastique avec la température. Cet ajustement permet alors de comparer dans tout le domaine de température les courbes théoriques et expérimentales. La relation obtenue par ces auteurs dans l'approximation dite quasi-harmonique est la suivante :

$$C_{ijkl}^s(T) = \tilde{C}_{ijkl}[1 - D_{ijkl}\bar{\varepsilon}(T)] \quad (23)$$

D_{ijkl} est une constante qui peut être calculée, en principe, d'après le modèle atomique proposé. \tilde{C}_{ijkl} est la valeur qu'aurait prise C_{ijkl}^s à 0° K s'il n'y avait pas de vibrations atomiques à cette température. Nous avons déterminé ces deux constantes d'après les résultats expérimentaux. $\bar{\varepsilon}(T)$ est l'énergie moyenne sur toutes les fréquences d'un oscillateur harmonique quantique à un degré de liberté.

On peut faire quelques remarques sur la relation précédente et sur les hypothèses faites pour la dériver. Ces remarques sont :

1) Soient ω_r^k les fréquences des vibrations dans les trois directions spatiales ($r = 1, 2, 3$) de l'atome défini par l'indice ρ dans la maille qui, elle, est définie par K. $\rho = 1, 2, \dots, S$ et $K = 1, 2, \dots, N$, où N est le nombre de mailles dans le monocristal dont chacune contient S atomes. Pour alléger l'écriture, nous omettrons, par la suite, les indices K, ρ , r sur les ω . Si $\varepsilon(\omega, T)$ est l'énergie d'un oscillateur harmonique quantique à un degré de liberté, on écrit :

$$\sum_{k\rho r} \left(\frac{\partial \ln \omega^2}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_T \cdot \varepsilon(\omega, T) = \left(\frac{\partial \ln \bar{\omega}^2}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_T \cdot \bar{\varepsilon}(T) \cdot 3SN. \quad (24)$$

Ainsi on admet implicitement l'approximation d'Einstein en supposant que tous les oscillateurs vibrent à la même fréquence, en l'occurrence $\sqrt{\bar{\omega}^2}$.

2) Il est supposé que la température n'est pas trop élevée pour que la dilatation thermique reste faible. On considère donc que l'écart entre la position moyenne de l'atome dans ses vibrations anharmoniques et sa position d'équilibre au fond du puits de potentiel est infiniment petit du premier ordre. Ensuite, on ne tient pas compte des infiniment petits d'ordre supérieur.

3) On voit que l'évaluation de $\bar{\varepsilon}(T)$ dépend de la distribution des fréquences ω sur les 3SN degrés de liberté. Nous avons supposé que cette distribution peut être approchée par celle de Debye. A vrai dire, il aurait mieux valu introduire cette hypothèse à la place de celle d'Einstein dans le premier membre de la formule (24).

4) Si l'on prend d'autres termes dans le développement qui conduit à la relation (23), en gardant les mêmes hypothèses de base, on trouve qu'une meilleure approximation ajouterait un terme en $\bar{\varepsilon}^2(T)$ au deuxième membre de cette relation. Ceci conduirait à une courbure dans la courbe théorique vers les hautes températures où $\bar{\varepsilon}(T) \sim kT$. Or, nous voyons sur les figures 23, 24

(1) Nous remercions M. SIMON qui a bien voulu nous communiquer ces résultats.