

L'EFFET DE DISLOCATIONS SUR LES PROPRIÉTÉS ÉLECTRIQUES DE L'ANTIMONIURE D'INDIUM

Par U. BAITINGER ⁽¹⁾, D. SCHNEPF et J. ARNDT,

Institut für Halbleitertechnik, Universität Stuttgart, Allemagne.

(Reçu le 5 août 1968.)

Résumé. — Des monocristaux de InSb du type n ont été fléchis plastiquement pour introduire une densité définie de dislocations. Le coefficient de Hall et la conductibilité électrique de différents échantillons ont été mesurés en fonction de la température dans la gamme $T = 50, \dots, 200$ °K. L'application du modèle de Broudy, qui interprète les propriétés électriques de dislocations dans le germanium, aux mesures effectuées montre que la dispersion diffuse des porteurs aux dislocations est d'une importance décisive, tandis que l'influence du niveau d'énergie des accepteurs de dislocation diminue en comparaison des processus dans le germanium.

Abstract. — Single crystals of n -type InSb have been bent plastically to introduce a defined dislocation density. Hall coefficient and electrical conductivity measurements have been carried out for several samples in the range $T = 50, \dots, 200$ °K. The application of Broudy's model, which explains the electrical properties of dislocations in germanium, to these measurements shows, that diffuse scattering of carriers at dislocations has a predominant importance, whereby the energy level influence of the dislocation acceptors decreases in comparison with the processes in germanium.

I. Introduction. — Dans cet article sera étudiée la possibilité d'appliquer le modèle de Broudy [1], qui interprète les propriétés des dislocations dans le germanium, aux mesures électriques sur l'antimoniure d'indium (InSb) déformée plastiquement par flexion.

Dans ce but, nous avons utilisé un monocristal avec une densité d'impuretés de $(n_D - n_A) = 7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Il s'agit surtout des éléments S, Te, Se (donneurs), Zn et Cd (accepteurs) résiduels dans le cristal non dopé [2]. Cette matière de base se trouve dans l'état d'ionisation complète des impuretés dans toute la gamme de température étudiée.

II. Déformation plastique. — Pour la formation des dislocations dans le cristal, nous avons utilisé une méthode de flexion plastique à une température élevée due à Peissker *et al.* [3]. Selon le sens de la courbure par rapport à l'ordre d'empilement du cristal, on obtient des dislocations de différents types, c'est-à-dire

du type In ou du type Sb, qui consistent entièrement en atomes d'In ou de Sb [4]. Outre ces dislocations majoritaires, il se forme toujours un certain nombre de dislocations minoritaires du signe inverse, c'est-à-dire de l'autre type.

Les détails du procédé appliqué sont décrits dans [5].

III. Le modèle de Broudy. — Selon Read [6], les dislocations agissent comme des accepteurs, c'est-à-dire que les atomes qui forment la ligne de dislocation acceptent des électrons. Si ces atomes ont un écart s les uns des autres, la dislocation possède une charge négative par unité de longueur de $-ef/s$ où f est le taux d'occupation des accepteurs de dislocation. Si, près de cette dislocation, tous les donneurs chimiques du dopage sont ionisés (parce qu'ils ont donné leurs électrons aux accepteurs de dislocation), une charge spatiale positive à répartition cylindrique se forme autour de la dislocation avec une densité linéaire de :

$$+ e\pi r_q^2 (n_D - n_A)$$

⁽¹⁾ Adresse actuelle : IBM Laboratorien, D 703 Böblingen, Schönaicher First, Dept. 785, Allemagne.

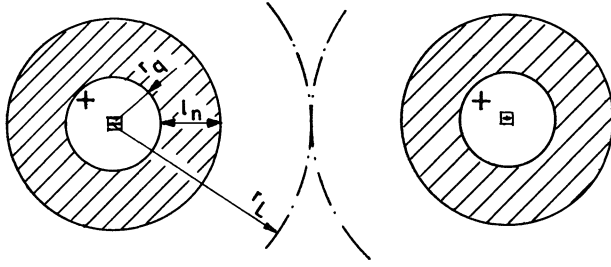


FIG. 1. — Les domaines de dispersion diffuse à l'intérieur d'un libre parcours moyen l_n des porteurs autour de la charge d'espace à répartition cylindrique, qui se forme autour des dislocations [1, 6] :

r_q : Rayon des cylindres de charge d'espace.
 $2r_L$: Écart moyen entre les dislocations.

où r_q est le rayon du cylindre (voir fig. 1). Il en résulte la condition de neutralité :

$$f/s = \pi r_q^2 (n_D - n_A)$$

d'où :

$$r_q^2 = f/s\pi(n_D - n_A). \quad (1)$$

Avec un taux d'occupation maximal adopté de $f = 0,10$ [7] et une distance $s = 4,58 \times 10^{-8}$ cm entre les atomes qui forment une dislocation de 60° dans l'InSb [6], on tire de l'équation (1) un rayon maximal des cylindres de charge d'espace positive de :

$$r_q \leq 10^{-4} \text{ cm.}$$

Broudy [1] suppose des domaines de dispersion diffuse à l'intérieur d'un libre parcours moyen l_n des porteurs (électrons dans ce cas) autour des cylindres de charge d'espace supposés par Read [6] (voir fig. 1).

Pour que ces domaines de dispersion diffuse ne se recouvrent pas, on admet (voir fig. 1) :

$$l_n + r_q \leq r_L \quad (2)$$

où $2r_L$ est l'écart moyen entre les dislocations. D'après la figure 1, on définit la densité des dislocations, c'est-à-dire le nombre total des dislocations par unité de surface :

$$n_{\text{LF tot}} = n_{\text{LF maj}} + n_{\text{LF min}} = 1/\pi r_L^2. \quad (3)$$

D'après les équations (2) et (3), on a :

$$n_{\text{LF tot}} \leq 1/\pi(l_n + r_q)^2. \quad (4)$$

Pour la matière de base utilisée, on a mesuré un libre parcours moyen maximal de $l_n \leq 2,50 \times 10^{-4}$ cm (voir fig. 2). On tire de l'équation (4), avec ces valeurs, une densité maximale de dislocations de :

$$n_{\text{LF tot}} \leq 2,60 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}.$$

Selon Bell *et al.* [8], on peut adopter :

$$n_{\text{LF maj}} = 3n_{\text{LF min}}.$$

Après un bref calcul, on a :

$$(n_{\text{LF maj}} + n_{\text{LF min}}) = 2(n_{\text{LF maj}} - n_{\text{LF min}})$$

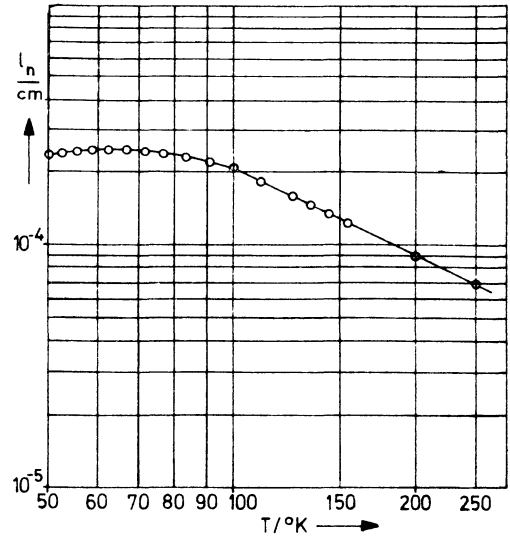


FIG. 2. — Caractéristique de température du libre parcours moyen $l_n(T)$ des porteurs dans la matière de base utilisée (n-InSb).

c'est-à-dire :

$$n_{\text{LF tot}} = 2 \times n_{\text{LF Nye}}$$

donc :

$$n_{\text{LF Nye}} \leq 1,30 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}.$$

Selon la relation de Nye [9] :

$$n_{\text{LF Nye}} = 1/r_b b_N \quad (5)$$

où r_b est le rayon de courbure et b_N la composante du vecteur de Burgers [10] dans le plan neutre de l'échantillon fléchi plastiquement (qui est de $b_N = 3,55 \times 10^{-8}$ cm dans ce cas), on trouve une valeur minimale du rayon de courbure :

$$r_b \geq 22 \text{ cm.}$$

Nous avons choisi un rayon de courbure de $r_b = 60$ cm.

IV. Expériences et résultats. — Le modèle de Broudy part du concept de niveaux accepteurs localisés le long de la dislocation [1]. Il est cependant probable que les niveaux localisés sur des atomes voisins de la ligne de dislocation, qui possèdent un écart de $s = 4,58 \times 10^{-8}$ cm seulement, s'élargissent en bande d'énergie, dans laquelle une conduction peut apparaître. Pour réduire l'influence de cette conduction sur les valeurs de mesure, nous avons choisi une direction de courant, dans l'échantillon, transversale aux dislocations. Cela correspond au cas A de Broudy [1], où le vecteur de la densité de courant est perpendiculaire et le vecteur de l'induction magnétique est parallèle aux lignes de dislocation.

Il résulte des relations citées par Broudy pour son

cas A [1] que le taux de volume ε des cylindres de charge d'espace autour des dislocations est de :

$$\varepsilon = \frac{(1 - \sigma_{\perp}/\sigma_0) : (1 + \sigma_{\perp}/\sigma_0)}{1 + A(2 + A)(1 - \theta)} \quad (6)$$

et que le taux de volume Φ des domaines de dispersion diffuse aux dislocations est de :

$$\Phi = \frac{(1 - \sigma_{\perp}/\sigma_0) : (1 + \sigma_{\perp}/\sigma_0)}{(1 - \theta) + 1/A(2 + A)} \quad (7)$$

où $A \equiv l_n \sqrt{\pi(n_D - n_A) s/f} = l_n/r_d$.

Dans les équations (6) et (7), σ_{\perp} est la conductibilité électrique d'un échantillon déformé en présence d'un courant de mesure perpendiculaire aux dislocations et σ_0 la conductibilité d'un échantillon non déformé de la même matière de base. Il est opportun d'y utiliser un échantillon de contrôle recuit avec l'échantillon déformé, parce qu'il est probable que l'influence du traitement thermique est comparable ou même égale pour ces deux échantillons.

Le facteur θ représente la mobilité d'un électron à l'intérieur des domaines de dispersion diffuse par rapport à celle d'un électron à l'extérieur.

Si $\theta = 1$, il n'y a pas une telle dispersion diffuse. Les électrons évitent seulement les cylindres de charge d'espace autour des dislocations.

Si $\theta = 0$, les électrons évitent même les domaines à l'intérieur d'un libre parcours moyen autour des cylindres de charge d'espace.

La valeur réelle de θ est entre ces deux extrêmes. Selon Broudy, θ est indépendant de la température pour le germanium et peut être évalué entre 0,2 et 0,4 sans influence considérable sur les résultats pour les taux de volume ε et Φ [1], tandis que pour l'InSb les conditions sont autres. A cause des libres parcours moyens assez grands des électrons, les processus de dispersion sont d'une importance décisive, tandis que l'influence du niveau d'énergie des accepteurs de dislocation diminue. C'est qu'en effet, au départ, on ignore la valeur de θ et sa variation avec la température, les relations pour ε et Φ d'après les équations (6) et (7) doivent être présentées pour les deux valeurs extrêmes $\theta = 1$ et $\theta = 0$. Les valeurs réelles de ε et Φ seront entre les deux valeurs extrêmes correspondantes :

$$\varepsilon(\theta = 1) = \frac{\sigma_0 - \sigma_{\perp}}{\sigma_0 + \sigma_{\perp}} \quad (8)$$

$$\Phi(\theta = 1) = \varepsilon(\theta = 1) \times A(2 + A) \quad (9)$$

$$\varepsilon(\theta = 0) = \frac{\varepsilon(\theta = 1)}{1 + A(2 + A)} \quad (10)$$

$$\Phi(\theta = 0) = \frac{\Phi(\theta = 1)}{1 + A(2 + A)}. \quad (11)$$

Il va de soi que $\varepsilon + \Phi \leq 1$ est valable dans tous les cas. Il s'ensuit :

$$\varepsilon_{\max} = \frac{1}{1 + A(2 + A)} \quad (12)$$

$$\Phi_{\max} = \frac{A(2 + A)}{1 + A(2 + A)}. \quad (13)$$

Pour l'exploitation, on a besoin des caractéristiques de température du libre parcours moyen $l_n(T)$ et du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction $E_C - E_F(T)$ de la matière de base non déformée. Les figures 2 et 3 montrent les valeurs mesurées.

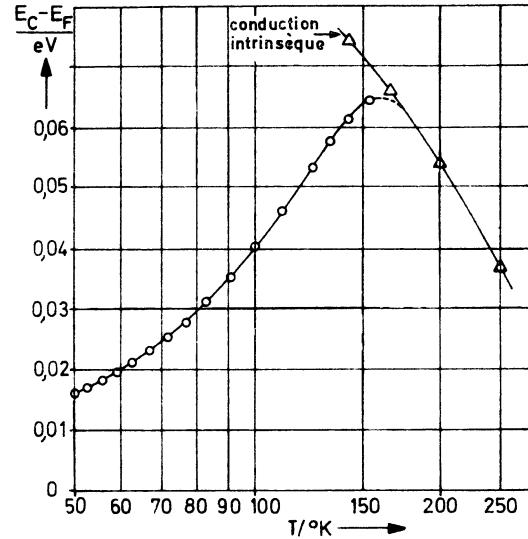


FIG. 3. — Caractéristique de température du niveau de Fermi $E_F(T)$ par rapport à la bande de conduction (E_C) de la matière de base utilisée (n -InSb).

Les figures 4 et 5 montrent le coefficient de Hall et la conductibilité électrique mesurés en fonction de l'inverse de la température, $10^3 \text{ }^\circ K/T$, pour la matière de base, pour l'échantillon de contrôle recuit et pour un échantillon fléchi plastiquement avec un excédent de dislocations du type Sb. Parce que le niveau de Fermi est bien au-dessus du centre de la bande interdite, la différence entre les niveaux d'énergie des accepteurs de dislocation du type In et du type Sb n'est pas significative.

Selon les explications de Broudy, le coefficient de Hall d'un échantillon déformé plastiquement doit être inversement proportionnel à la densité d'électrons dans la matière non perturbée à l'extérieur des cylindres de charge d'espace dans le cas d'un courant perpendiculaire aux dislocations. La figure 4 confirme cette proposition. On constate, en outre, qu'il n'y a pas contamination significative des échantillons pendant le traitement thermique : les coefficients de Hall se trouvent à l'intérieur d'une bande qui correspond aux variations du dopage du monocristal utilisé.

La caractéristique de température de la conducti-

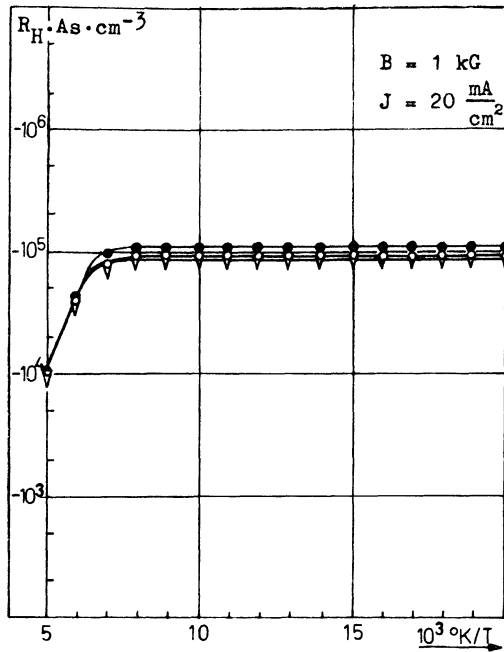


FIG. 4. — Coefficients de Hall mesurés en fonction de l'inverse de la température. Courant perpendiculaire, induction magnétique parallèle aux dislocations :

- : Matière de base.
- : Échantillon de contrôle recuit.
- ▽ : Échantillon courbé plastiquement avec un excédent de dislocations du type Sb.

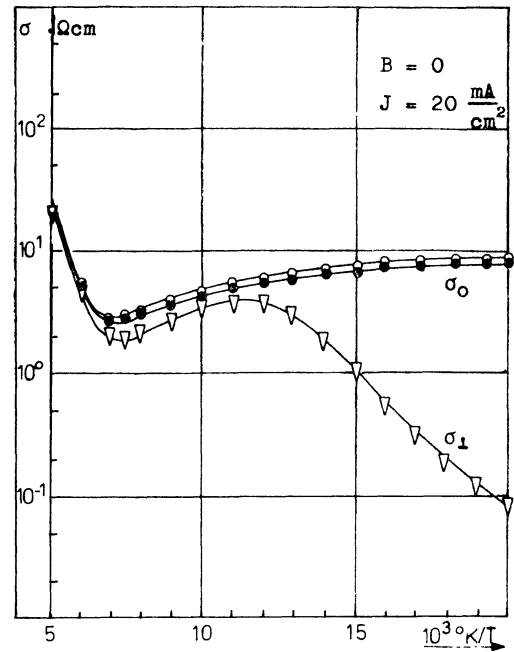


FIG. 5. — Conductibilités électriques mesurées en fonction de l'inverse de la température. Courant perpendiculaire aux dislocations.

- : Matière de base.
- : Échantillon de contrôle recuit.
- ▽ : Échantillon courbé plastiquement avec un excédent de dislocations du type Sb.

bilité électrique de l'échantillon déformé peut être partagée en trois sections :

- $10^3 \text{ }^\circ\text{K}/T \leq 7,5$: conduction intrinsèque.
- $10^3 \text{ }^\circ\text{K}/T = 7,5, \dots, 11$: section dans laquelle la conductibilité est inférieure aux valeurs obtenues pour la matière non déformée, à cause de la diminution de la densité d'électrons du cristal déformé par le facteur $(1 - \epsilon)$ pour le volume entier du cristal [11].
- $10^3 \text{ }^\circ\text{K}/T \geq 11$: descente rapide de la conductibilité par diminution de la mobilité des électrons à cause d'une dispersion diffuse supplémentaire des électrons aux dislocations [1].

Avec les relations des équations (8) à (13) incluse et les conductibilités mesurées, les courbes pour les valeurs extrêmes des taux de volume ϵ et Φ ont été tracées en fonction de l'inverse de la température, $10^3 \text{ }^\circ\text{K}/T$, sur les figures 6 et 7.

Selon l'équation citée par Read [11] :

$$\epsilon = f n_{LF} / s (n_D - n_A) \quad (14)$$

le taux de volume ϵ doit posséder une caractéristique de température semblable à celle du taux d'occupation f des accepteurs de dislocation, parce que les autres grandeurs dans l'équation (14) sont des constantes qui dépendent de la matière étudiée.

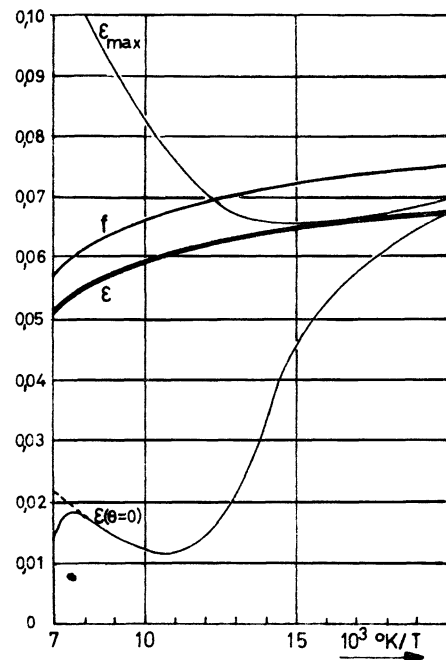


FIG. 6. — Taux de volume ϵ des cylindres de charge d'espace autour des dislocations avec ses valeurs extrêmes et taux d'occupation f des accepteurs de dislocation en fonction de l'inverse de la température.

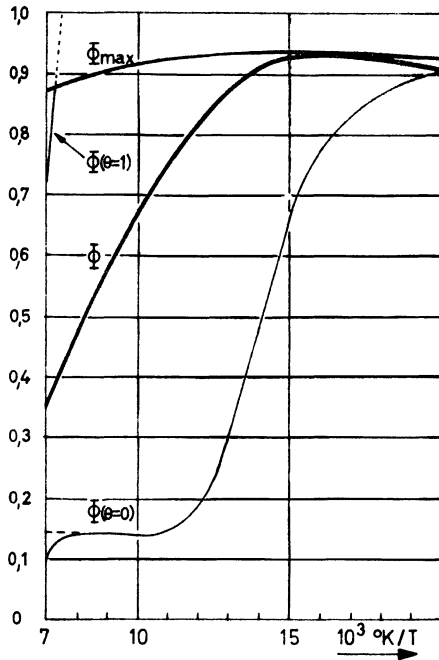


FIG. 7. — Taux de volume Φ des domaines de dispersion diffuse aux dislocations avec ses valeurs extrêmes en fonction de l'inverse de la température.

Dans la figure 6, on trouve le taux d'occupation $f(1/T)$ calculé selon la méthode de Broudy *et al.* [12] pour un niveau d'énergie des accepteurs de dislocation par rapport à la bande de valence de :

$$E_L - E_V = 0,085 \text{ eV.}$$

La théorie de la bande d'énergie linéaire des dislocations par Güth *et al.* [13] donne pour l'énergie des accepteurs de dislocation :

$$E_L - E_V = 0,132 (-q_L \cdot e)/K \quad (15)$$

et pour le rayon du « nuage » des places acceptrices, c'est-à-dire des « trous » positifs autour de la dislocation :

$$r_1^2 = K \cdot \hbar^2 / 0,824 \cdot m_p^* \cdot e(-q_L) \quad (16)$$

où q_L est la charge linéaire négative de la dislocation, K la constante diélectrique statique et m_p^* la masse effective des trous dans l'InSb. Güth *et al.* montrent [13] que r_1 est dans l'ordre de la constante du réseau cristallin C (qui est de $C = 6,48 \text{ \AA}$ dans l'InSb). Avec une valeur $m_p^* = 0,34 m_0$ [14], on trouve des équations (15) et (16) :

$$E_{LV} \equiv E_L - E_V = 0,16 \frac{\hbar^2}{m_p^* \cdot C^2} = 0,085 \text{ eV.}$$

Parce qu'on ignore la variation de ce niveau d'énergie des accepteurs de dislocation avec la température, la valeur $E_{LV} = 0,085 \text{ eV}$ a été adoptée pour $T = 50 \text{ °K}$ et sa variation avec T a été admise égale à celle de la bande interdite E_{CV} mesurée par Roberts *et al.* [15].

La caractéristique $\varepsilon(1/T)$ insérée dans la figure 6 correspond à la caractéristique $f(1/T)$ conformément à l'équation (14) et elle est compatible avec ses deux courbes limites.

Une modification de l'énergie E_{LV} entre 0,070 et 0,100 eV influe seulement sur le montant absolu du taux f , mais elle ne change la forme de la courbe $f(1/T)$ que dans une mesure négligeable. Étant donné que les deux courbes limites pour ε sont très proches l'une de l'autre à des températures basses, cette modification de l'énergie E_{LV} n'influe pas la caractéristique $\varepsilon(1/T)$ mais seulement le rapport ε/f suivant l'équation (14).

Avec la relation pour Φ résultant des équations (6) et (7) :

$$\Phi = \varepsilon A(2 + A) \quad (17)$$

on reçoit de la caractéristique $\varepsilon(1/T)$ celle de $\Phi(1/T)$ tracée dans la figure 7. On voit que cette courbe est de même située entre ses courbes limites.

Enfin, on peut calculer la caractéristique de température du rapport de mobilité $\theta(T)$ en écrivant l'équation (6) avec l'équation (8) pour θ :

$$\theta = 1 - \frac{\varepsilon(\theta = 1) - \varepsilon}{\varepsilon A(2 + A)} \quad (18)$$

d'où :

$$(1 - \theta) = \frac{\varepsilon(\theta = 1) - \varepsilon}{\varepsilon A(2 + A)}. \quad (19)$$

La figure 8 montre ces caractéristiques de température.

V. Conclusion. — On voit sur la figure 8 que la dispersion supplémentaire subie par les électrons qui

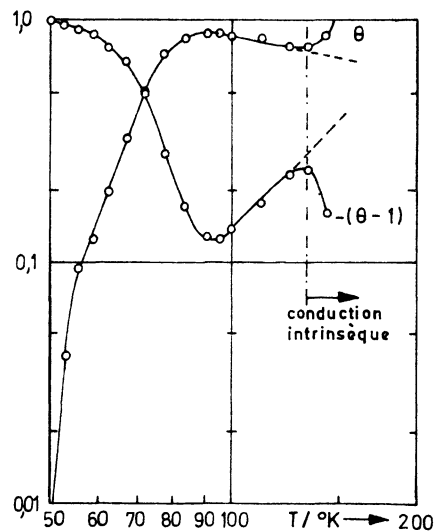


FIG. 8. — Caractéristique de température du facteur θ , qui représente la mobilité d'un électron à l'intérieur des domaines de dispersion diffuse par rapport à celle d'un électron à l'extérieur :

$$\theta \equiv \mu_{in}/\mu_{ex}; \quad 1 - \theta \equiv (\mu_{ex} - \mu_{in})/\mu_{ex}.$$

s'approchent à moins d'un libre parcours moyen des cylindres de charge d'espace positive autour des dislocations ne commence qu'au-dessous d'une température $T = 90$ °K. La variation thermique de θ due à une variation thermique du rayon de charge d'espace r_q est comprise dans le facteur :

$$A \equiv l_n(T)/r_q(T) = l_n \sqrt{\pi(n_D - n_A)} s/f$$

dont tous les éléments et leurs variations thermiques sont connus (voir *fig. 2* et *6*).

De l'équation (14) on obtient avec la valeur adoptée $\varepsilon/f = 0,9$ (voir *fig. 6*) la densité des accepteurs de dislocation :

$$n_L = n_{LF}/s = 6,3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}.$$

Si on admet que chaque atome de dislocation donne une place acceptrice, on calcule une densité de dislocation en prenant $s = 4,58 \times 10^{-8} \text{ cm}$:

$$n_{LF} = n_L \cdot s = 2,89 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}.$$

Cette densité de dislocations, qui produit un effet électrique, est plus élevée que la densité :

$$n_{LF \text{ tot}} = 0,94 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$$

qu'on trouve de l'équation (5) pour le rayon de courbure choisi $r_b = 60 \text{ cm}$ avec la relation [8] :

$$n_{LF \text{ maj}} = 3n_{LF \text{ min}}$$

qui est d'ailleurs peu sûre. Une autre cause pour l'élévation de la densité réelle des dislocations est certainement les contraintes mécaniques dans le cristal déformé, qui ne sont pas considérées par l'équation (5).

De plus, la densité de dislocations :

$$n_{LF} = 2,89 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$$

calculée à l'aide de l'équation (14) semble ne pas satisfaire la condition $n_{LF \text{ tot}} \leq 2,60 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$, qui a été dérivée pour que les domaines de dispersion diffuse aux dislocations ne se recouvrent pas. Cette valeur maximale pour $n_{LF \text{ tot}}$ a été cependant calculée pour un taux d'occupation maximal $f = 0,10$ estimé par Read [7]. L'analyse du problème montre que la valeur maximale pour le taux d'occupation est $f = 0,075$, qui mène à $n_{LF \text{ tot}} \leq 3,01 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$ (voir *fig. 6*).

BIBLIOGRAPHIE

- [1] BROUDY (R. M.), *Adv. in Physics*, 1963, **12**, 135.
 [2] WILHELM (M.) (communication privée).
 [3] PEISSKER (E.), HAASEN (P.) et ALEXANDER (H.), *Phil. Mag.* (8), 1962, **7**, 1279.
 [4] HAASEN (P.), *Acta Met.*, 1957, **5**, 598.
 [5] BAITINGER (U.), ARNDT (J.) et SCHNEPF (D.), *J. Maths. Sci.* (à paraître).
 [6] READ (W. T.) jr, *Phil. Mag.* (7), 1954, **45**, 775.
 [7] READ (W. T.) jr, *Phil. Mag.* (7), 1954, **45**, 1119.
 [8] BELL (R. L.) et WILLOUGHBY (A. F. W.), *J. Maths. Sci.*, 1966, **1**, 219.
 [9] NYE (J. F.), *Acta Met.*, 1953, **1**, 153.
 [10] BURGERS (J. M.), *Proc. Kon. Akad. Wet. Amst.*, 1939, **42**, 378.
 [11] READ (W. T.) jr, *Phil. Mag.* (7), 1955, **46**, 111.
 [12] BROUDY (R. M.) et MCCLURE (J. W.), *J. Appl. Phys.*, 1960, **31**, 1511.
 [13] GÜTH (W.) et HAIST (W.), *Phys. Stat. Sol.*, 1966, **17**, 691.
 [14] BELL (R. L.) et ROGERS (K. T.), *Phys. Rev.*, 1966, **152**, 746.
 [15] ROBERTS (V.) et QUARRINGTON (J. E.), *J. Electr.* (1), 1955, **1**, 152.