RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BEN YAHIA - JIJEL

FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



N° de Série :....

Mémoire présenté pour obtenir le diplôme de Master en physique

Spécialité: physique des matériaux

Présenté Par: Boukabou Khadidja

Intitulé

Calcul théorique de la cathodoluminescence à température ambiante: Application à p-InP

Soutenu le:18 /07/2021

Devant le jury :

Président:A. BerbadjRapporteur:D. KeniecheExaminateur:H. Afer

M.C.B. Université de Jijel M.C.B. Université de Jijel M.A.A. Université de Jijel

Année Universitaire : 2020-2021

Dédicace

🛪 ma chère mère.

🛪 mon cher père.

mes sœurs et mes frères CHAIMA, AMINA. Et ZAHIRE

toute ma famílle.

A toutes mes amíes. Et enfín, à tous ceux qui m'ont aidée à réaliser ce travail.

Je dédie ce travail



Remercíements

Tout d'abord, je voudrais remercier le dieu tout puissant et Miséricordieux qui m'a aidé et m'a donné force et patience pour accomplir ce travail.

J'exprime également mes remerciements et ma profonde gratitude à mon encadreur **KENIECHE DAOUD**, Maître de Conférences à l'université de Jijel, qui m'a proposée le sujet du mémoire et m'a dirigé pour sa bonne réalisation. Je le remercie aussi pour son soutien et ses précieux conseils.

Monsieur **A. Berbadj**, Maître de Conférences à l'université de Jijel, m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de soutenance, qu'il trouve ici mes vifs remerciements et ma grande reconnaissance.

Je tiens à remercier, également, madame **H. Afer** Maître Assistante à l'université de Jijel, pour avoir accepté d'examiner et de juger mon travail et de faire partie du jury de mémoire.

Je ne saurais oublier dans mes remerciements, Monsieur **F**. **Bouzerara**, Professeur à l'université de Jijel pour ses précieux conseils et ses suggestions qui m'ont éclairé dans les moments les plus opportuns.

Enfin, Je remercie toutes les personnes qui m'ont aidé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Merci infiniment à toutes et à tous

-



Introduction générale	01
<u>Chapitre I</u> : La Cathodoluminescence dans les semiconducteurs	
I.1 Introduction	03
I.2 Définition de la cathodoluminescence	03
I.3 Techniques de la cathodoluminescence	03
I.4 Principe de la cathodoluminescence	03
I.5 Applications de la cathodoluminescence	04
I.6 Comparaison de la cathodoluminescence avec quelques techniques de caractérisation	n05
I.7 Matériau semiconducteur III-V	06
I.8 Le matériau InP	07
I.8.1 Structure cristalline du Phosphure d'indium	08
I.8.2 Propriétés physiques	09
Références	10
Chapitre II : Interaction électron-matière	
II.1 Introduction	12
II.2 Phénomènes d'interaction électron-matière	12
II.3 Différents signaux émis sous l'impact d'un faisceau d'électrons avec la matière	13
II.4 Volume d'interaction électron-matière	13
II.5 Dispersion élastique et inélastique	15
II.5.1 La diffusion élastique	15
II.5.2 La diffusion inélastique	15
II.6 La perte d'énergie des électrons incidents	16
II.7 Description d'une trajectoire électronique	16
II.7.1 Parcours électronique	16
II.7.2 Création de paires électron –trou par un faisceau électronique	19
II.7.2.1 Energie de création de paires électron-trou	19
II.7.2.2 La fonction de génération de paires électron-trou	21
II.8 Fonction de dissipation d'énergie normalisée	22
II.9 Phénomène de recombinaison	26
II.9.1 Les processus de recombinaison	27

II.9.1.1 Recombinaisons radiatives	7
II.9.1.2 Recombinaisons non radiatives	9
II.9.1.3 Recombinaisons excitoniques	9
II.10 Propriétés de surface des semiconducteurs	0
II.10.1 Les états de surface	С
II.10.2 La vitesse de recombinaison en surface	1
Références	2
<u>Chapitre III</u> : Modélisation de l'intensité de cathodoluminescence	
III.1 Introduction	4
III.2 Les bases physiques du modèle	4
III.3 Analyse de la surface libre du semiconducteur	5
III.4 Equations de transport des porteurs de charges	8
III.4.1 L'équation de continuité	8
III.4.2 Résolution de l'équation de continuité dans la zone de déplétion	9
III.4.3 Résolution de l'équation de continuité dans la zone neutre41	1
III.4.4 Conditions aux limites	2
III.5 Calcul self-consistent	4
III.6 Calcul de l'intensité du signal de cathodoluminescence	1
III.7 Organigramme de calcul de la cathodoluminescence à T=300K46	5
Références4	8
<u>Chapitre IV</u> : Résultats et discussion	
IV.1 Introduction	
IV.2 Variation des concentrations de porteurs en excès à la surface du semiconducteur)
IV.3 Dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec les conditions d'excitation	
et les propriétés du matériau5	1
IV.3.1 Variation de l'intensité I _{CL} avec les conditions d'excitation du faisceau incident5	1
IV.3.1.1 Influence de l'intensité du courant incident	1
IV.3.1.2 Influence de l'énergie incidente	2
IV.3.2 Variation de l'intensité I _{CL} avec les propriétés de volume	3
IV.3.2.1 Influence du coefficient d'absorption	3
IV.3.2.2 Influence de la longueur de diffusion	4
IV.3.2.3 Influence de la concentration de dopage55	5
IV.3.3 Variation de l'intensité I _{CL} avec les propriétés de surface	5

IV.3.3.1 Influence du niveau énergétique des défauts de surface	56
IV.3.3.2 Influence de la densité des défauts de surface	57
IV.3.3.3 Influence de la largeur de la zone de déplétion	
IV.4 Conclusion	59
Références	61
Conclusion générale et perspectives	
Annexe	
Principales propriétés physiques d'InP à 300 K	63



Le bombardement par un faisceau d'électrons d'un matériau est le premier agent responsable de la génération des différents signaux (émission X, cathodoluminescence, courant induit (EBIC), etc.) utilisés pour la caractérisation du matériau étudié.

L'une des techniques les mieux appropriées pour déterminer les propriétés des matériaux est la technique cathodoluminescence. Une méthode de caractérisation non destructive utilisant l'émission de photons (principalement ultraviolet, visible et infrarouge) d'un matériau soumis à l'irradiation d'un faisceau d'électrons. Elle est applicable en particulier aux matériaux semiconducteurs.

Lorsqu'elle est utilisée dans un microscope électronique à balayage, il est possible d'obtenir une image à deux dimensions. La variation de la tension d'accélération des électrons incidents permet ensuite de mener une étude en profondeur dans le matériau.

La cathodoluminescence peut atteindre plusieurs paramètres, à titre d'illustration nous citons la longueur de diffusion, la durée de vie des porteurs minoritaires, la concentration des porteurs, etc; et cela par la caractérisation de la lumière émise, enregistrée sous forme de spectres ou encore par la mesure de l'intensité totale de cathodoluminescence.

Le récent développement des semiconducteurs composés III-V, a montré que ces matériaux possèdent des propriétés intrinsèques plus intéressantes, parmi ces matériaux le phosphure d'indium (InP), caractérisé par une bande interdite directe ($E_g = 1.35eV$) et une mobilité électronique élevée. Ces propriétés lui offrent des perspectives très prometteuses dans le développement des composants à hautes performances dans le domaine de la microélectronique ultra rapide et de l'optoélectronique.

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier, d'une façon plus ou moins exhaustive, le phénomène de la cathodoluminescence dans le semiconducteur InP. Cette étude est basée sur des calculs théoriques de l'intensité de cathodoluminescence, qui peuvent rendre compte et prédire l'influence de différents paramètres physiques du matériau et les paramètres du faisceau d'électrons incidents.

Ce mémoire est articulé en quatre chapitres :

Dans le premier chapitre, nous présentons le phénomène de cathodoluminescence et ses applications, ainsi que les propriétés physiques principales du phosphure d'indium (InP), en plus ses applications et intérêts technologiques.

Dans le deuxième chapitre, nous exposons un rappel théorique sur l'interaction électron matière, puis nous présentons les différents modèles décrivant la dissipation d'énergie, le parcours électronique et le phénomène de génération-recombinaison des paires électron-trou ainsi que les propriétés de surface des semiconducteurs.

Le troisième chapitre est consacré aux étapes nécessaires pour modélisation du signal de cathodoluminescence, à l'analyse de la surface libre du semiconducteur, à la résolution des équations de continuité dans la zone de déplétion et la zone neutre. Ainsi que la procédure du calcul self-consistent pour obtenir l'intensité totale de la cathodoluminescence en fonction des conditions d'excitation du faisceau électronique.

Dans le quatrième chapitre, nous présentons l'ensemble des résultats de simulation obtenus dans notre étude. Nous discutons les courbes théoriques $I_{CL} = f(E_0)$ et $I_{CL} = f(I_P)$ sous l'effet des divers paramètres responsables de façon signifiante sur la variation de I_{CL} . L'ensemble de ces paramètres a été classé en deux catégories principales. La première concerne les paramètres liés à l'injection électronique: l'énergie et le courant du faisceau électronique primaire. La deuxième concerne l'influence des paramètres qualifiés de caractéristiques du matériau : paramètres de volume : longueur de diffusion des porteurs minoritaires, coefficient d'absorption, et concentration du dopage et paramètres de surface: densité de défauts, niveau énergétique associé à ces défauts et la largeur de la zone de déplétion.

Nous exposons enfin la conclusion générale de cette étude ainsi que les perspectives de recherche dans ce domaine.

Chapitre I

La cathodoluminescence dans les semiconducteurs

I.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter des notions sur la cathodoluminescence et son application pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs, ainsi que la présentation du semiconducteur binaire phosphure d'indium massif, en faisant apparaître ses propriétés les plus importantes et ayant surtout un impact sur notre étude. Enfin nous donnerons un résumé de ses principales applications technologiques.

I.2 Définition de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence est l'émission de la lumière produite par un échantillon soumis à l'irradiation d'un faisceau d'électrons, elle représente un des modes de fonctionnement du microscope électronique à balayage, qui sont :

- Le mode luminescent : cathodoluminescence et fluorescence x.
- Le mode émissif : électrons secondaires.
- Le mode conductif : courant induit (Electron Beam Induced Current: EBIC).

I.3 Techniques de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence dans un microscope électronique à balayage (MEB) est une technique de micro-caractérisation non destructive qui utilise l'émission de photons dans le domaine visible et proche infrarouge d'un échantillon (solide organique, isolant ou semiconducteur) soumis au bombardement d'un faisceau d'électrons. Elle permet l'observation des défauts et hétérogénéités présents dans les matériaux et composants de l'optoélectronique. Plus qu'une simple technique d'observation, c'est un outil d'analyse très utile pour comprendre les effets de ces défauts sur les propriétés électrique et optique des matériaux [1].

I.4 Principe de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence (CL) est la génération de photons suite au bombardement d'un échantillon par un faisceau d'électroon. Les mécanismes conduisant à cette émission de lumière peuvent être regroupés selon trois étapes principales (Figure I.1) :

- L'excitation : l'impact d'un faisceau d'électrons sur un semiconducteur génère une grande quantité de paires électron-trou, créant localement une mise hors équilibre.
- Le déplacement : les porteurs de charge ainsi créés migrent par diffusion ; ce déplacement est caractérisé par une longueur de diffusion.
- La recombinaison : le retour à l'équilibre peut s'effectuer de deux manières, soit d'une façon radiative donnant naissance une émission de lumière, soit d'une façon non radiative produisant une élévation de la température de l'échantillon.



Figure I.1 : Représentation d'une émission stimulée : (a) l'électron incident favorise le passage d'un électron de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC), laissant un trou dans la (BV). (b) Après diffusion, l'électron se recombine avec un trou et génère un photon **[2]**.

I.5 Applications de la cathodoluminescence

La CL est utilisée comme moyen non destructif pour l'étude et la caractérisation des composés inorganiques, tels que les minéraux, les céramiques et les semiconducteurs, mais rarement utilisée pour étudier les composés organiques[**3**]. En géologie, la cathodoluminescence est utilisée pour examiner la structure interne d'échantillons géologiques afin de déterminer, par exemple, l'histoire de la formation des roches [**4**].

La CL se trouve ses applications dans un large domaine d'instruments modernes, par exemple les tubes à rayons cathodiques (CRT), les écrans d'affichage (monitor displays), les écrans fluorescents, etc.

La CL est une technique à la disposition autant des physiciens que des géologues **[5,6]**, et des biologiste **[7]**, Cette technique, couplée à un microscope électronique à balayage, devient une

technique très puissante, offrant une double caractérisation spectroscopique et spatiale des semiconducteurs **[8]**, et permettant l'analyse et l'étude des propriétés optiques et électriques des matériaux à l'échelle microscopique **[1]**. Les applications de la cathodoluminescence concernent principalement les études de matériaux semiconducteurs à gap direct III-V et II-VI **[9]**.

Autres applications, les plus fréquentes, de la cathodoluminescence sont consacrées à l'imagerie. L'observation visuelle de la luminescence et la modélisation des images par la luminescence non dispersive de l'échantillon, permettent de localiser des zones de rendement radiatif différent [10, 11]. Smith [12] a proposé les différentes applications de la CL pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs, elles sont regroupées sur le tableau (I.1).

Nature des données	Informations Obtenues
	- Homogénéité
Distribution spatiale de la luminescence	- Schéma de réaction à l'interface
	- Schéma de dislocation
	- Profil de diffusion
	- Concentration des défauts
Intensité de luminescence	- Longueur de diffusion
	- Vitesse de recombinaison en surface
	- Absorption de la lumière émise par le matériau
	- Composition chimique
Spectre de distribution de la luminescence	- Structure de bande
	- Activation du dopant
	- Densité des pièges
Variation de la CL en fonction du temps	- Effet de la température
	- Rendement des recombinaisons radiatives

Tableau I.1 : Applications de CL pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs [12]

I.6 Comparaison de la CL avec quelques techniques de caractérisation

En général, l'excitation par faisceau d'électrons conduit à l'émission de tous Mécanismes de luminescence présents dans un semiconducteur. La omparaison de la cathodoluminescence (CL) avec d'autres phénomènes de luminescence, tels que la photoluminescence (PL), électroluminescence (EL) et rayons X (RX) donne des résultats similaires, avec quelques différences possibles liées aux détails des processus de l'excitation, le taux de génération et le volume de l'excitation [1].

L'intérêt de la cathodoluminescence par rapport à la photoluminescence (émission de lumière par un matériau soumis à une excitation lumineuse) réside dans la possibilité de modifier la profondeur d'émission du signal en faisant varier la tension d'accélération des électrons incidents et donc en quelque sorte de localiser les défauts dans les trois directions de l'espace[13].

Il est utile, également de comparer la CL avec la technique de la microanalyse par les rayons X, où les deux techniques utilisent la détection des radiations électromagnétique émises sous le bombardement d'un matériau par un faisceau d'électrons. L'émission des rayons X est due aux transitions électroniques entre les niveaux profonds de l'atome, et donnent donc des informations sur la nature chimique des atomes en particuliers **[13]**, par contre le signal de CL est formé par la détection des photons émis dans le domaine de l'ultra-violet, le visible et le proche infra-rouge, qui sont dus aux transitions entre la bande de conduction et la bande de valence, et les niveaux énergétiques des défauts et des impuretés situés dans le gap du matériau, donc permet d'avoir des informations sur la nature des défauts **[14]**.

Quant à l'électroluminescence, c'est l'émission d'un matériau léger en réponse au passage d'un courant électrique ou d'un fort champ électrique. Les propriétés des structures optoélectroniques sont très souvent examinées par la mesure des phénomènes d'électroluminescence (EL) et de cathodoluminescence (CL). Dans le cas EL, l'échantillon examiné est polarisée en appliquant une tension à ses bornes électriques, dans le cas de CL la matériau est excité par le faisceau d'électrons. Dans les deux cas, la luminescence émise est enregistrée par un détecteur de lumière qui peut être par exemple un caméra CCD ou photomultiplicateur [15].

I.7 Matériaux semiconducteurs III-V

Les matériaux semiconducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3^{ème} colonne et d'un élément de la 5^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Les composés III-V les plus répandus sont le GaN, GaAs et l'InP **[16]**. Le tableau (I.2) regroupe un extrait de cette classification.

III	IV	V
^{10.81} ₅ B	^{12.01} ₆ C	^{14.01} ₇ N
^{26.98} Al	^{28.09} ₁₄ Si	^{30.97} 15 p
^{69.74} 31Ga	^{72.59} 32Ge	^{74.92} ₃₃ As
^{114.82} 49ln	^{118.69} 50Sn	^{121.75} ₅₁ Sb

Tableau I.2: Extrait de la classification périodique des éléments.

I.8 Le matériau InP

Le phosphure d'indium est un composé binaire de formule chimique InP, il est bien connu depuis 1980 [17]. Les méthodes d'élaboration et de croissance d'InP doivent être adaptées en fonction de chaque application.

Sa grande mobilité électronique qui est quatre fois supérieure à celle du silicium [18], ouvre un large champ d'applications dans des domaines tels que l'optoélectronique la microélectronique ultra rapide, analogique et digitale, les télécommunications hyperfréquences, l'InP est donc un matériau de choix pour la fabrication des dispositifs à haute rapidité de commutation en électronique ainsi des composants fonctionnant en hautes fréquences. Par exemple, Armand et al.[19], ont montré que l'InP est un matériau idéal pour l'amplification de puissance en hyperfréquence. De plus, avec sa structure de bande à transition directe, et donc la possibilité d'émission de lumière, il s'associe au développement de systèmes et de composants optoélectroniques, tels que les diodes électroluminescentes (LED) pour l'affichage et pour l'éclairage, les diodes lasers, et les photodétecteurs. L'InP, est également compatible avec les fenêtres optiques où les pertes de propagation de lumière dans les fibres optiques sont minimales.

I.8.1 Structure cristalline du Phosphure d'indium

L'InP est un semiconducteur composé qui contient deux éléments distincts, un élément indium (In) du groupe III et le phosphore (P) du groupe V. La liaison entre l'In et le P est covalente, l'InP massif cristallise dans la structure cubique de type sphalérite (structure Zinc blende) elle est constituée de deux mailles cubiques à faces centrées (CFC), où l'une est décalée par rapport à l'autre du quart, r = (a/4, a/4, a/4), de la diagonale principale du cube.

La maille élémentaire est un tétraèdre régulier, un atome III (In) est en son centre et quatre atomes V(P) sont aux sommets du tétraèdre (et vice versa). Ces liaisons forment entre elles un angle du 109.47°, le réseau réciproque d'InP est un réseau cubique centré.

Les positions des atomes sont définies par les coordonnées suivantes (Figure I.2) :

 $\bigcirc P (0 \ 0 \ 0), (0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}), (\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}), (\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}), (\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0)$ $\bigcirc In (\frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4}), (\frac{1}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{3}{4}), (\frac{3}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{3}{4}), (\frac{3}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{1}{4})$



Figure I.2 : Structure cristalline d'InP.

I.8.2. Propriétés physiques

Le récent développement des semiconducteurs composés II-V, a montré que ces matériaux possèdent des propriétés intrinsèques plus intéressantes que celles du silicium. Parmi ces matériaux l'InP, un semiconducteur ayant des caractéristiques et des propriétés qui le distinguent aux autres semiconducteurs.

- InP possède une bande interdite directe de largeur ($E_g = 1.35 \ eV$ à 300 K), elle varie en fonction de la température selon la formule empirique [20]: $E_g(T)(eV) = E_g(0) - \frac{4.5 \times 10^{-4} T^2}{T+335}$, avec : $E_g(0) = 1.422 \ eV$.

- Une mobilité des électrons supérieure à celle du silicium (InP: $4600cm^2 . V^{-1} . s^{-1}$ et Si: $1200cm^2 . V^{-1} . s^{-1}$)

- Conductivité thermique élevée $(K_T = 0.7W. cm^{-1}K^{-1})$

- Haut point de fusion ($T_f = 1062^{\circ}C$).

- Une tension de claquage très élevée.

- Des possibilités de réaliser des alliages ternaires tel que : Phosphure de gallium-indium (InGaP) et quaternaires tel que :Arséniure-phosphure de gallium-indium (InGaAsP) [21],offrant ainsi un large panel de compositions de matériau, dont les propriétés physiques sont différentes et dépendent des éléments utilisés. Le tableau (I.3) donne quelques caractéristiques d'InP, importantes dans le cadre de notre étude. D'autres propriétés physiques sont données dans l'annexe.

Caractéristique	Valeur	Référence
Largeur de la bande interdite $E_g(eV)$	1.35	[22]
Densité moléculaire (cm^{-3})	1.979×10^{22}	[23]
Concentration des porteurs intrinsèques n_i (cm^{-3})	1.2×10^{8}	[22]
Paramètre de maille $a_0(Å)$	5.8690	[20]
Densité (ρ) (g/cm^3)	4.791	[23]
Constante diélectrique relative ε_r	12.55	[23]
Mobilité des électrons (μ_n) $(cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1})$	4600	[23]
Mobilité des trous (μ_p) $(cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1})$	150	[23]

Tableau I.3 : Quelques caractéristiques d'InP à 300K.

Références

- B. G. Yacobi et D. B. Holt, Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids, Ed. Pelenum Press, New York and London (1990).
- [2] Y. El Gmili, Thèse de Doctorat, Université de Lorraine et L'Université Sidi Mohamed Ben Abdallah-Fes (2013).
- [3] https://www.sciencedirect.com. /science /article /abs /pii / S0928098711003769.
- [4] https://fr.wikipedia.org/wiki / cathodoluminescence.
- [5] V. Barbin and M. Schoever, C. R. Acad. Sci. Paris 325, 157 (1997).
- [6] F. Cesbon, A. Baumer, P. Blanc et D. Ohnenstetter, C. R. Acad. Sci. Paris t. 324, série 3a, 353 (1997).
- [7] G.V. Saparin, Biophysical Electron Microscopy, Academic Press London, 45 (1990).
- [8] J. P. Chamonal , Thèse de 3^{eme} Cycle , Université scientifique et médicale de Grenoble (1982).
- [9] J. F. Bresse et M. Dupuy, La Microscopie Electronique à Balayage dans les Semiconducteurs, Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 417 (1978).
- [10] G. R. Booker, Microscopy of Semiconducting Materials, 259 (1981).
- [11] K. Lohnert, E. Kubalek, Phys. Stat. Sol (a) 83, 307(1984).
- [12] J. P. Smith, Papier N⁰ 38 Présenté à la 3^{ème} Conférence sur "Electron Probe Analysis", Chicago (1968).
- [13] B. G. Yacobi, D. B. Hot, J. Appl. Phy. 59(4), R1 (1986).
- [14] D. Kenieche, Thèse de Magister, Université Mentouri, Constantine (2001).
- [15] M. Pluska, A. Czerwinski, J. Ratajczak, A. Szerling, and J. Kątcki, Solid State Phenomena Vol. 186, 20 (2012).
- [16] M. Billaud, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble Alpes (2017).
- [17] H. Hasegawa and T. Sawada, Thin Solid Films 103, 119 (1983).
- [18] B. K. Ridley, J. Appl. Phys.48(2), 754 (1977).
- [19] O. Baehr, Thèse de Doctorat, Université de Metz (1997).
- [20] S. Adachi, Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors, John Wiley & Sons, England (2005).
- [21] S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, John Wiley & Sons, England (2009).
- [22] A. Dargys and J. Kundrotas, Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP, Vilnius, Science and Encyclopedia Publishers, Lithuania (1994).

[23] S. Adachi, Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP, A Wiley-Interscience Publication, John Wiley & Sons, Canada (1992).

Chapitre II

Interaction électron matière

II.1 Introduction

L'objectif de ce deuxième chapitre est d'introduire, de manière qualitative et simple, quelques éléments de base liés à l'interaction électron-matière en général et électronsemiconducteur en particulier, la connaissance de base de l'interaction des électrons avec la matière est nécessaire pour acquérir une meilleure compréhension des phénomènes physiques se produisant dans le matériau. De plus, l'interaction électron-matière offre la possibilité de déterminer avec succès des informations quantitatives et qualitatives à propos, des paramètres électriques et optiques des matériaux [1]. Nous exposons donc, dans ce chapitre, les choses les plus importantes se rapportant à notre étude, et qui sont, en l'occurrence, la perte d'énergie, la fonction de génération des paires électron- trou (e-h), la pénétration des électrons, la fonction de dissipation d'énergie et la génération-recombinaison des paires (e-h).

II.2 Phénomènes d'interaction électron-matière

Beaucoup de techniques d'analyse de surfaces font appel des faisceaux d'électrons comme la microscopie électronique à balayage, dont le principe est basé sur le déplacement contrôlé d'un faisceau d'électrons sur un échantillon à caractériser. Les tensions d'accélération se situent dans la gamme de 0.5 kV à 40 kV pour des instruments commercialement disponibles. Le diamètre du faisceau d'électrons à la surface de l'échantillon (diamètre de la sonde d'électrons) se situe typiquement dans la gamme de 10 nm à 100 nm et il varie en fonction de l'énergie et du courant du faisceau. Pour la détection des signaux, plusieurs types de détecteurs peuvent être disposés à l'intérieur de la chambre contenant l'échantillon. Ceux-ci incluent le détecteur d'électrons secondaires, le détecteur d'électrons rétrodiffusés, le détecteur de rayons-X et l'appareillage de mesure de cathodoluminescence [2].

Lorsque le faisceau d'électrons incidents atteint un échantillon, une partie des électrons est absorbée, une autre est réfléchie. L'interaction électron-cible résulte diverses réponses issues des collisions élastiques et inélastiques. Après interaction, si les électrons émis par la cible ont la même énergie E_0 que les électrons incidents, il y a eu diffusion élastique. Ces collisions de type électron-noyau sont à l'origine de l'émission des électrons rétrodiffusés. Les collisions inélastiques de type électron-électron sont à l'origine de l'émission des électrons secondaires (énergie ≤ 50 eV), des électrons Auger (~1 keV), des rayons X (quelques keV) et surtout de la création de paires électron-trou qui sont la base du courant induit (EBIC) et de la cathodoluminescence [**3**].

II.3 Différents signaux émis sous l'impact d'un faisceau électronique avec la matière

L'irradiation d'un échantillon, par un faisceau d'électrons, induit un certain nombre d'effets au sein du matériau comme la création de photons (X, UV, visibles ou IR) et l'émission d'électrons secondaires et rétrodiffusés (figure II.1).



Figure II.1 : phénomènes d'interaction des électrons avec une cible semiconductrice .

II.4 Volume d'interaction électron-matière

Les électrons incidents pénètrent dans la matière en empruntant un parcours aléatoire jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique, cette pénétration s'accompagne d'un élargissement du faisceau qui crée un volume appelé familièrement "volume d'interaction" les dimensions du volume d'interaction dépendent fortement de l'énergie du faisceau incident et le numéro atomique de la matière **[4]**.

En ce qui concerne la microscopie électronique à balayage, utilisé en mode cathodoluminescent; L'enveloppe des trajectoires des électrons primaires est liée aux dimensions

latérales du volume d'interaction, donc à l'énergie incidente (E_0), et à la longueur de diffusion des porteurs (L). Pratiquement dans les semiconducteurs, la résolution spatiale offerte par la cathodoluminescence est de l'ordre de quelques microns, et se dégrade lorsque l'énergie du faisceau augmente [5].

Le volume de génération est le lieu de création des paires électron-trou, il prend une forme qui dépend du numéro atomique du matériau (Z) et de l'énergie d'accélération des électrons E_0 . Ce volume prend trois formes différentes, suivant la valeur de Z (figure II.2) [6].

- Z < 15 Forme en poire.
- 15 < Z < 40 Forme sphérique.
- Z > 40 Forme hémisphérique.



Forme d'une poire

Forme shèrique

Forme hémisphérique



La figure (II.3) illustre la résolution spatiale de la microscopie électronique à balayage.



Figure II.3 : Résolution spatiale de la microscopie électronique à balayage [7].

II.5 Dispersion élastique et inélastique

L'interaction entre un faisceau électronique et une cible est à l'origine de multiples phénomènes physiques. Toutes ces interactions sont classées dans deux types distincts: diffusion élastique et diffusion inélastique (figure II.4)



Fig. II.4 Schéma illustrant les deux types de diffusion d'un faisceau d'électrons.

II.5.1 La diffusion élastique

Lors d'une interaction élastique, l'électron primaire interagit avec les atomes du matériau. Il ne perd pas ou peu d'énergie, mais il subit une collision élastique, c'est-à-dire que sa direction change sans perte d'énergie.

II.5.2 La diffusion inélastique

L'interaction est inélastique lorsqu'un électron primaire (électron incident) interagit avec les électrons des atomes du matériau. Une des caractéristiques des collisions inélastiques est que l'électron est peu dévié de sa trajectoire initiale, mais par contre perd une grande partie de son énergie. Selon la localisation des électrons sur les niveaux atomiques, la perte d'énergie est plus ou moins grande.

Cette interaction donne naissance à une grande variété de processus utiles. Il s'agit principalement de l'émission électronique secondaire, de l'émission X, de la cathodoluminescence, des plasmons, des phonons, ainsi que de la création de paires électron trou.

II.6 La perte d'énergie des électrons incidents

La perte d'énergie par unité de longueur, encore appelée pouvoir d'arrêt ou transfert d'énergie linéique, est donnée par la formule de Bethe [8]:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{Z\rho}{A.E} Ln \left(1.166 \frac{E}{J} \right) \text{ (keV/cm)}$$
(II.1)

Cette loi traduit la perte d'énergie moyenne (dE) subie par un électron d'énergie (E) le long de l'élément de parcours (dS).

Le signe moins montre que l'énergie diminue en fonction de la distance parcourue.

Avec :

Z est le numéro atomique, A est le poids atomique, ρ est la densité du matériau, E est l'énergie instantanée de l'électron, et J le potentiel moyen d'ionisation du matériau que l'on peut exprimer par la formule de Berger et Seltzer [9]:

$$J (keV) = (9.76 Z + 58.5 Z^{-0.19}) 10^{-3}$$
(II.2)

Pour le InP la relation (II.2) donne : J=436.36 eV.

II.7 Description d'une trajectoire électronique

Nous présentons dans ce paragraphe les différents modèles ayant permis d'établir des expressions analytiques de la profondeur de pénétration des électrons. Les analyses des expressions décrivant la dissipation d'énergie et la génération des paires électron-trou ont une grande importance dans l'étude des matériaux semiconducteurs.

II.7.1 Parcours électronique

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersions élastiques et inélastiques dans le semiconducteur, et ont alors des trajectoires aléatoires (figure II.5). Leurs profondeurs de pénétration R (range) sont données par plusieurs expressions proposées par différents auteurs.



Figure II.5 : Trajectoire électronique simulée par la méthode Monte Carlo.

> La relation générale du parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie d'accélération c'est à dire l'énergie du faisceau incident E_0 sous la forme suivante [6] :

$$\mathbf{R} = \left(\frac{\kappa}{\rho}\right) \mathbf{E}_0^{\alpha} \tag{II.3}$$

Où :

 ρ : la masse volumique du matériau.

K, α : sont des constantes dépendent du numéro atomique du matériau et de E₀.

E₀ : est l'énergie du faisceau incident.

D'autres formules ont été également proposées par d'autres auteurs. Pour déterminer le parcours électronique, on inverse puis on intègre la perte d'énergie de Bethe (II.1) entre les valeurs limites de l'énergie (E₀, 0). On obtient le parcours de Bethe [10] :

$$R_{\rm B} = \int_{\rm E_0}^0 \frac{dE}{dE/(\rm ds)} \tag{II.4}$$

 ρ : est la masse volumique du matériau considéré.

 $\frac{dE}{dS}$: Perte d'énergie dE d'un électron le long de l'élément de parcours dS.

> En 1957, les travaux de Grüen ont conduit à un parcours électronique donné par [11] : $R_G = 4.57E_0^{1.75}$ (II.5)

Où :

 R_G est exprimé en (g/cm²) et E_0 est exprimé en (keV), (5< E_0 <25keV).

➢ Kyser (1972) propose l'expression du parcours électronique suivante [12] :

$$R_{\rm K}(\rm mg/cm^2) = 2.56 \left(\frac{E_0}{30}\right)^{1.68}$$
(II.6)

Où :

 E_0 : est exprimée en keV.

Everhart et Hoff ont proposé une expression du parcours obtenue à partir d'une étude de la génération des paires électron-trou dans le silicium, elle a la forme suivante [13]:

$$R(\mu g/cm^2) = 3.98E_0^{1.75}$$
(II.7)

Où :

 E_0 : est mesurée en keV.

Cette relation est limitée pour des énergies incidentes E_0 entre 5 et 25 keV et pour les matériaux de numéro atomique Z variant entre 10 à 15.

Une autre relation plus générale a été dérivée par Kanaya et Okayama en 1972 sous la forme suivante [14]:

$$R_{K-0}(\mu m) = \left(\frac{0.0276 \,\text{A}}{\rho Z^{0.889}}\right) E_0^{1.67} \tag{II.8}$$

Où :

 E_0 : est l'énergie incidente exprimée en keV.

A : est le poids atomique exprimé en g/mol.

 ρ : est la masse volumique exprimée en g/cm³.

Z : est le numéro atomique.

La figure (II.6) montre une comparaison entre le parcours obtenu par le modèle Grüen et de Kanaya et Okayama.



Figure II. 6: Variation des parcours électroniques (R) en fonction de l'énergie incidente (E₀), dans Si, InP, CdTe, calculée selon les modéles de Kanaya-Okayama relation (II.8) et Grüen relation (II.5)

II.7.2 Création de paires électron-trou par un faisceau électroniqueII.7.2.1 Energie de création de paires électron-trou

Un faisceau d'électrons de haute énergie ($E_0 > E_g$, $E_{g:}$ énergie du gap) perd son énergie dans un semiconducteur en produisant des paires électron -trou (e-h) et des phonons. Le nombre, N, des paires (e-h) créées dans le matériau est directement proportionnel au nombre d'électrons incidents.

L'énergie de création d'une paire électron-trou est donnée par la relation :

$$\varepsilon_{e-h} = \frac{E_A}{N} \tag{II.9}$$

Où :

E_A: est l'énergie absorbée dans le semiconducteur.

N : le nombre de paires électron-trou créées.

La formule de ε_{e-h} donnée par Klein [15] s'écrit sous la forme :

$$\varepsilon_{e-h} = E_g + \overline{E}_K + \overline{E}_R \tag{II.10}$$

Où :

 E_g : est l'énergie du gap.

 \overline{E}_{K} : La perte d'énergie moyenne due aux vibrations du réseau.

 \overline{E}_{R} : La perte d'énergie moyenne pour la génération de phonons optiques.

Klein a lié la relation entre l'énergie moyenne due aux vibrations du réseau (\bar{E}_k) et l'énergie du gap (E_g) à travers l'équation suivante [16]:

$$\overline{E}_{K} = \frac{9}{5} E_{g}$$
(II.11)

Shockley a écrit la perte d'énergie moyenne pour la génération de phonons optiques (\overline{E}_r) comme une fonction de quantum de Raman ($\hbar \omega_R$)qui s'écrit sous la forme [17]:

$$\overline{\mathbf{E}}_{\mathbf{r}} = r\,\hbar\omega_R\tag{II.12}$$

Où *r* est le nombre moyen de phonons optiques généré et ($\hbar \omega_R$) le quantum de Raman. En remplaçant (II.11) et (II.12) dans (II.10), on obtient alors :

$$\varepsilon_{\rm e-h} = \frac{14}{5} E_{\rm g} + r \,\hbar\omega_R \tag{II.13}$$

Ou encore :

$$\varepsilon_{e-h} = 2.8E_g + \text{constante}$$
 (II.14)

La constante est comprise entre 0 et 1 eV et dépend du matériau, et il est indépendant de l'énergie du faisceau d'électron [6].

Les mesures expérimentales pour différents semiconducteurs donnent toutes plus ou moins la même valeur approchée [16] :

$$\varepsilon_{e-h} \cong 3E_g$$
 (II.15)

Dans le cas d'InP, l'énergie moyenne de création d'une paire électron-trou est de 4.05 eV. Ce qui veut dire qu'un électron incident de 10 keV génère environ 2470 paires électron-trou.

II.7.2.2 La fonction de génération de paires électron-trou

Un faisceau d'électrons d'énergie incidente E_0 , et d'intensité du courant I_P cède une quantité d'énergie au matériau semiconducteur donnée par :

$$E_{\rm eff} = N_0 E_0 (1 - f) \tag{II.16}$$

Où :

E_{eff}: l'énergie effective perdue dans l'échantillon.

f : la fraction d'énergie du faisceau perdue due aux électrons rétrodiffusés.

 N_0 : le nombre d'électrons incidents par unité de temps, exprimé par : $N_0 = \frac{l_p}{q}$

I_p: l'intensité du courant primaire.

q : la charge d'électron.

 E_{eff} est l'énergie utilisée pour créer des porteurs libres dans le semiconducteur, cette création est caractérisée par un paramètre g''(cm⁻³.s⁻¹) représentant le nombre de paires électron-trou générées par unité de volume et unité de temps. Ce paramètre résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs, que l'on peut exprimer par :

$$g' = g_{\rm th} + g \tag{II.17}$$

Où :

g_{th}: est la génération thermique spontanée de porteurs, due à l'agitation thermique.

g: est la génération due à l'excitation du semiconducteur par des sources extérieures, (l'irradiation par des particules, photons,...).

Le nombre de paires créées peut s'exprimer alors par :

$$N = \frac{E_{eff}}{\varepsilon_{e-h}}$$
(II.18)

En remplaçant (II.16) dans (II.18), on obtient:

$$N' = \frac{N_0 E_0}{\varepsilon_{e-h}} (1 - f)$$
(II.19)

Dans la suite du manuscrit on notera g(x, y, z) la distribution de paires électron-trou dans le volume, elle correspond au nombre de paires créées par unité de volume et unité de temps $(cm^{-3}.s^{-1})$.

Dans certains cas pratiques, on n'a pas besoin de connaître la forme de g(x, y, z) mais seulement la forme de sa composante g(z) par exemple, c'est le cas lorsqu'on a une symétrie autour du faisceau incident, on écrit donc :

$$g(z) = \int_{x,y} g(x, y, z). dx. dy$$
 (II.20)

On définit alors le taux de génération g(z) comme étant le nombre de paires créées par unité de tempes et profondeur (cm⁻¹ .s⁻¹), il sera donné par :

$$g(z) = \frac{I_P}{q \epsilon_{e-h}} \cdot \frac{dE_A}{dz}$$
(II.21)

Où :

I_P: est l'intensité du courant du faisceau primaire.

q: est la charge élémentaire.

E_A: est l'énergie absorbée par le semiconducteur à la profondeur z.

 $\frac{dE_A}{dz}$: est l'énergie cédée par le faisceau électronique incident à la profondeur z du matériau.

Le taux de génération total G_0 (s⁻¹) correspondant au nombre de paires créées par unité de temps dans le semiconducteur est donné par l'intégrale :

$$G_0 = \int_0^\infty g(z) dz \tag{II.22}$$

Soit, compte tenu de l'équation $\left(N_0 = \frac{I_P}{a}\right)$:

$$G_0 = \frac{I_P}{q} \cdot \frac{(1-f)E_0}{\varepsilon_{e-h}}$$
(II.23)

II.8 Fonction de dissipation d'énergie normalisée

La dissipation de l'énergie du faisceau d'électrons dans le matériau est définie par la perte d'énergie des électrons primaires dans une direction normale à la surface de l'échantillon. La fonction de dissipation d'énergie normalisée $\phi(u)$ (appelée "depth-dose function") est donnée

par la relation :

$$\phi(\mathbf{u}) = \frac{d\left(\frac{E_A}{E_0}\right)}{d\mathbf{u}} \tag{II.24}$$

u = Z/R: est un paramètre sans dimension traduisant la pénétration normalisée.

Z : est la profondeur.

R : est la profondeur de pénétration.

 E_A : est l'énergie absorbée au bout du parcours s'exprimant sous la forme [14]:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{A}} = \mathbf{E}_0 - \mathbf{\eta}_{\mathbf{T}} \mathbf{E} - \mathbf{\eta}_{\mathbf{B}} \mathbf{E}_{\mathbf{B}} \tag{II.25}$$

Où :

E et η_T sont, respectivement, l'énergie et la fraction des électrons transmis. \overline{E}_B et η_B sont, respectivement, l'énergie moyenne et la fraction des électrons rétrodiffusés. L'expression de \overline{E}_B a été exprimée par Sternglass, sous la forme [18] :

$$\overline{E}_{B} = (0.45 + 2.10^{-3}.Z)E_{0}$$
(II.26)

Une autre expression a été proposée par Fitting et al sous la forme [19] : $\overline{E}_B = 0.5(1 + \eta_B)E_0$ (II.27)

Où η_B dépend à la fois du numéro atomique Z et de l'énergie de l'électron incident E_0 . η_B est donné par Neubert et al **[20]** :

$$\eta_{\rm B}({\rm Z},{\rm E}_0) = {\rm F}_1({\rm Z}) \left[1 + {\rm F}_2({\rm Z}) \ln \frac{{\rm E}_0}{20} \right] \tag{II.28}$$

Avec :

$$F_1(Z) = (-272.5 + 1.68.6 Z - 1.925 Z^2 + 0.00822 Z^3). 10^{-4}$$
 (II.29)
 $F_2(Z) = 0.2043 - 0.6543 Z^{-0.3}$ (II.30)

Hunger et Küchler (1979) [21], ont proposé une autre expression analytique des électrons rétrodiffusés, donnée par:

$$\eta_{\rm B}(Z, E_0) = E_0^{{\rm m}(z)}. C(Z) \tag{II.31}$$

Avec : $m(z) = 0.1382 - 0.9211Z^{-0.5}$ (II.32)

$$C(Z) = 0.1904 - 0.2236 \ln Z + 0.1292 (\ln Z)^2 - 0.01491 (\ln Z)^3$$
(II.33)

Les figures (II.7 et II.8) représentent les variations de η_B et \overline{E}_B en fonction de l'énergie des électrons pour une incidence normale à la surface du semiconducteur InP dans le cas des modèles (η_B : modèle Neubert et al.) et (\overline{E}_B : modèle Fitting et al.) cités précédemment.



Figure II.7: Variation du coefficient des électrons rétrodiffusés en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents.



Figure II.8: Variation de l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents.

Nous exposerons ci-après les différents modèles qui ont permis d'établir des expressions analytiques des fonctions de dissipation d'énergie proposés par des auteurs dans la littérature:

- Modèle d'Everhart-Hoff :

Everhart et Hoff [22] ont défini la fonction de dissipation d'énergie $\phi(u)$ en fonction de u sous la forme:

$$\phi(\mathbf{u}) = (1 - \mathbf{f})\lambda(\mathbf{u}) \tag{II.34}$$

Avec :

$$f = \eta_B \frac{\overline{E}_B}{E_0}$$
(II.35)

Où :

f : est la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion. u : est la pénétration réduite et normalisée du parcours d'Everhart-Hoff. $\lambda(u)$: est une fonction qui s'écrit sous la forme polynomiale : $\lambda(u) = 0.6 + 6.21 u - 12.4 u^2 + 5.69 u^3$ (II.36)

Cette expression est valable pour les matériaux ayant un numéro atomique Z compris entre 10 et 15 et pour une énergie comprise entre 5 et 25 keV[23].

- Modèle de Wittry et Kyser :

Wittry et Kyser (1967) **[24]** ont proposé une approximation de la fonction de dissipation d'énergie à partir d'une étude de la cathodoluminescence dans le matériau GaAs. Kyser (1972) **[12]** a modifié cette expression en introduisant un terme supplémentaire en exponentielle à partir d'une étude de l'émission X d'une cible de cuivre.

La forme finale de la gaussienne modifiée proposée est donnée alors par l'expression [25] :

$$\phi(\mathbf{u}) = \mathbf{A} \cdot \exp\left[-\left(\frac{\mathbf{u}-\mathbf{u}_0}{\Delta \mathbf{u}}\right)^2\right] - \mathbf{B} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}}{\mathbf{u}_0}\right) \tag{II.37}$$

Avec: B/A=0.4, b=4, Δu =0.35 et u₀=0.125. Ces constantes ont été utilisées par Wu et Wittry pour le cas du GaAs.

- Modèle de Kanaya et Okayama :

La fonction de dissipation d'énergie normalisée $\phi(u)$ en fonction du parcours normalisée u = z/R obtenue par Kanaya et Okayama [14] s'écrit comme suit:

$$\phi(\mathbf{u}) = \frac{1}{(1-u)^{2/5}} \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5}\right) exp\left[-\left(\frac{\gamma \cdot u}{1-u}\right)\right] + \left[\frac{1}{2^{5/6}} - (1-u)^{5/6}\right] \left[\frac{E_B}{E_0} \cdot \frac{61.9}{5} \cdot \frac{\gamma}{(1-u)^2}\right] \cdot exp\left(-\frac{1.9.\gamma \cdot u}{1-u}\right) \quad (\text{II}.38)$$

Avec:

$$\gamma = 0.187 \, z^{2/3} \tag{II.39}$$

Z est le numéro atomique des atomes constituant le matériau.

II.9 Phénomène de recombinaison

Après la génération des paires électron-trou et en absence de tout influence extérieure (champ électrique), les porteurs en excès, crées loin de la surface (la zone perturbée), sont animés d'un mouvement de diffusion pur, sous l'effet du gradient de leur concentration dans le matériau.

On caractérise la recombinaison des porteurs par un paramètre R', qui mesure les nombres de paire électron-trou disparues par unité de volume et par unité de temps (cm⁻³. s⁻¹). Le bilan de la recombinaison R' et la génération thermique G_{th} qui est spécifique du matériau est représenté par un paramètre, appelé taux de recombinaison R :

$$R = R' - G_{th}$$
(II.40)

La distance entre le point de création du porteur et le point de leur recombinaison (retour à l'état initiale) s'appelle longueur de diffusion L, et le temps qui s'est écoulé pour effectuer ce parcours s'appelle la durée de vie τ . Ce qui est donné par la relation suivante :

$$L = \sqrt{D\tau}$$
(II.41)

- Pour l'électron : $L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$ (II.42)
- Pour les trous : $L_P = \sqrt{D_P \tau_P}$ (II.43)

D_n et D_P sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous respectivement.

La recombinaison au sein d'un semiconducteur d'électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes:

 Par transition d'un électron de la bande de conduction (*Ec*) vers la bande de valence (Ev) (recombinaison « directe »).
par l'intermédiaire de centres de recombinaison; l'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successives ; tout abord l'électron (le trou) est capté par un centre localisé (dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou (l'électron) qui recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison «indirecte»).

II.9.1 Les processus de recombinaison

Selon le mécanisme de recombinaison et selon la forme sous laquelle est libérée l'énergie de porteur capté par le centre de recombinaison, on distingue les processus suivants :

II.9.1.1 Recombinaisons radiatives

Le retour à l'état d'équilibre du matériau se fait par recombinaison de l'électron avec le trou, et peut se faire d'une façon intrinsèque ou extrinsèque.

A) La luminescence intrinsèque (bande-bande)

Concernant la probabilité qu'un électron se recombine avec un trou par transition radiative, les semiconducteurs peuvent être classés en deux catégories :

i. Transition directe

Dans ce cas, le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au même vecteur d'onde k (figure II. 9a)

L'énergie du photon émis (hv) est à peu prés égale à l'énergie du gap E_g

Dans ce cas le taux de recombinaison R' est proportionnel aux nombres d'électrons et aux nombres de trous soit :

R' = k.n.p	(II.44)
1	

En tenant compte de la relation (II.40), on obtient :

 $R = k. n. p - G_{th}$ (II.45)

Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$R = k. (n. p - n_i^2)$$
(II.46)

Où :

k : le coefficient de recombinaison radiative, qui dépend de la température.

n_i : la concentration intrinsèque de porteurs.

n et p : les concentrations des électrons et des trous libres hors équilibre respectivement.

A l'équilibre thermodynamique (absence de toute excitation extérieure) on a :

$$R = 0, n = n_0, p = p_0$$

 n_0 et p_0 sont les concentrations de porteurs à l'équilibre.

En régime hors équilibre (n = $n_0 + \Delta n$, p = $p_0 + \Delta p$, $\Delta n = \Delta p$)

Où Δn et Δp représentent respectivement l'excès d'électron et de trous créés par excitation. L'expression de R devient :

$$R = \frac{\Delta n}{\tau(\Delta n)} = \frac{\Delta p}{\tau(\Delta p)}$$
(II.47)

Avec :

$$\tau(\Delta p) = \frac{1}{k(n_0 + p_0 + \Delta p)}$$
 et $\tau(\Delta n) = \frac{1}{k(n_0 + p_0 + \Delta n)}$ (II.48)

 $\tau(\Delta p)$ est la durée de vie des porteurs dans le semiconducteur excité.

Par exemple, pour un semiconducteur de type p, et en régime de faible injection ($N_a \approx P_0 >> n_0$, $\Delta p = \Delta n \ll p_0$) les expressions de $\mathbf{R_{rad}}$ ainsi que la durée de vie τ_{rad} , des électrons minoritaires sont liés par la relation : $R_{rad} = \frac{\Delta n}{\tau_{rad}}$ et $\tau_{rad} = \frac{1}{k(n_0 + p_0 + \Delta n)} \approx \frac{1}{KN_a}$.

ii. Transition indirecte

Dans ce cas, l'extremum des bandes de valence et de conduction est extrêmement éloigné dans l'espace k, la transition n'est plus verticale ceci est pour les matériaux avec un gap indirect (figure II. 9b), la différence de quantité de mouvement entre les deux niveaux n'est pas négligeable. Pour satisfaire le principe de conservation de la quantité de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, qui est le « phonon » de vecteur d'onde k_1 .

B) La luminescence extrinsèque (bande-niveau)

La luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et défauts (interstitiels, lacunes, dislocations), parce qu'ils jouent un rôle important dans le processus de recombinaison, ils sont considérés comme des centres de piégeage ou de recombinaison des porteurs.



Figure II. 9: Transitions électroniques dans les semiconducteurs.

II.9.1.2 Recombinaison non radiatives

Les niveaux profonds dans le gap peuvent occasionner des transitions non radiatives et donner lieu indirectement à un contraste.

Les mécanismes Auger qui impliquent simultanément plusieurs porteurs libres sont essentiellement non radiatifs, et se produisent surtout pour de forts dopages[26]. La luminescence est généralement atténuée par les défauts, tels que les précipités, qui perturbent fortement la périodicité du réseau, les dislocations et les joints de grains sont sans doute intrinsèquement non radiatifs.

II.9.1.3 Recombinaisons excitoniques

L'interaction coulombienne d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence peut donner naissance à une "quasi-particule" liée, nommée exciton **[7]**. A basse température, ces excitons, sont libres de se déplacer dans le cristal (excitons libres), mais peuvent également être piégés sur les impuretés (excitons liés aux impuretés). Les

recombinaisons d'excitons sont à l'origine de transitions radiatives très fines qui dominent la luminescence.

✤ La figure (II.10) représente le mécanisme de recombinaison dans un semiconducteur.



Figure II.10: Mécanismes de recombinaison. (a) transition bande-bande.(b), (c), (d), (e) la transition impliquant les impuretés chimiques ou les défauts physiques.

II.10. Propriétés de surface des semiconducteurs

II.10.1 Les états de surface

Chaque solide se termine par une surface qui détermine son volume, et cette surface est nécessaire pour contrôler les interactions du milieu environnant avec le solide. La surface des semiconducteurs est caractérisée par des états, appelée états de surface.

Les états de surface, sont dus d'une part, aux phénomènes intrinsèques résultant de la rupture de périodicité du réseau cristallin, et d'autre part, aux phénomènes extrinsèques résultant de l'adsorption à la surface d'atomes étrangers dont les plus courants sont les atomes d'oxygène qui entraînent une oxydation de la surface du semiconducteur **[27]**.

L'état électronique de la surface dépend de la densité des états de surface, de leur type et de leur position énergétique dans la bande interdite. Le nombre et la nature dépendent du traitement de la surface du cristal (polissage, revêtement,etc.), et des conditions extérieures (composition de l'atmosphère, température,etc.) [28].

II.10.2 La vitesse de recombinaison en surface

La qualité d'une surface est généralement donnée par la valeur de la vitesse de recombinaison en surface qui a un effet sur la variation de l'intensité émise par un échantillon. Pour tenir compte de son influence, il suffit de résoudre l'équation de continuité à trois dimensions, et d'introduire une condition aux limites supplémentaires qui s'exprime pour un semiconducteur de type p par [29] :

$$D_{n} \cdot \frac{\partial (\Delta n(x,y,z))}{\partial z} \Big|_{z=0} = s \cdot \Delta n(x,y,z) \Big|_{z=0}$$
(II.49)

Où :

 Δn : est la concentration des électrons en excès en surface.

z: est la profondeur.

s: est la vitesse de recombinaison en surface (cm/s), qui souvent exprimée sous la forme réduite $(S = s/v_d)$, $v_d = L_n/\tau_n$ est la vitesse de diffusion des porteurs.

Références

- B. G. Yacobi et D. B. Holt, Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids, Ed. Pelenum Press, New York and London (1990).
- [2] D. Kenieche, Thèse de Doctorat, Université des Frères Mentouri- Constantine (2016).
- [3] F. Cleton, Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille Flandres-Artois(1995).
- [4] A. Zoukel, Thèse de doctorat, Université de Lile1 (2013).
- [5] M. Dussac, Thèse de Docteur ingénieur, Université de Grenoble (1985).
- [6] B. G. Yacobi, D. B. Hot, J. Appl. Phy. 59(4), R1 (1986).
- [7] J. P. Chamonal, Thèse de 3^{eme} Cycle, Université scientifique et médicale de Grenoble (1982).
- [8] H. A. Bethe, Handb. de. Phys. 24, 519 (1933).
- [9] M. J. Berger and S. M. Seltzer, Nat. Acad. Sci. Natl. Res. Council Publ. 1133, 205 (1964).
- [10] D. C. Joy, Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis, Oxford University Press, 57 (1995).
- [11] A. E. Grüen, Z. Naturforsch, 12A, 89 (1957).
- [12] D. F. Kyser, Poc. Of the 6thInt. Conf. On X-Rays optics and microanalysis- Osaka, University of Tokyo Press-Tokyo, 147 (1972).
- [13] T. E. Everhart, P. H. Hoff, J. Appl. Phys. 42(13), 5837 (1971).
- [14] K. Kanaya, S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys.5, 43(1972).
- [15] D. B. Holt, M. D. Muir, P.R. Grant, M. Boswarva, Quantitative scanning Electron Microscopy, Academic press (1974).
- [16] C. A. Klein, J. Appl. Phys. 39(4), 2029 (1968).
- [17] B. Sieber, Thèse de Doctorat Es-Sciences, Université de Paris Sud (1985).
- [18] E. J. Sternglass, Phys. Rev. 95(2), 345 (1954).
- [19] H. J. Fitting, J. Reinhardt, Phys. Stat. Sol. (a) 88, 245 (1985).
- [20] G. Neubert and S. Rogaschewski, Phys. Stat. Sol. (a) 59, 35 (1980).
- [21] H. J. Hunger and L. Küchler, Phys. Stat. Sol. (a) 56, K45 (1979).
- [22] T. E. Everhart, P. H. Hoff, J. Appl. Phys. 42(13), 5837 (1971).
- [23] E. Napchan, Revue Phys. Appl, colloq. C6, Suppl. au No. 6, Tome 24, 15 (1989).
- [24] D. B. Wittry, D. E. Kyser, J. Appl. Phys. 38, 375 (1967).
- [25] C. J. Wu, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 49, 2827 (1978).
- [26] M. Dussac, Thèse de Docteur Ingénieur, Université de Grenoble (1985).

- [27] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 4^{éme} ed., Ed. Masson, Paris (1998).
- [28] P. Kireev, La Physique des semiconducteurs, Ed. Mir-Moscou (1975).
- [29] T. S. Rao-Sahib, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 40 (9), 3745 (1969).

Chapitre III

Modélisation de l'intensité de cathodoluminescence

III.1 Introduction

Dans ce chapitre nous proposons un modèle d'analyse physique, nécessaire pour obtenir l'intensité de cathodoluminescence en fonction des conditions d'excitation électronique.

Le calcul de l'intensité de Cl est basé sur la résolution de l'équation de continuité des deux porteurs majoritaires et minoritaires à la fois dans la zone de déplétion et la zone neutre.

Un modèle de calcul self-consistent est suggéré afin de déterminer la largeur de la zone déplétée et ensuite de déduire l'intensité I_{CL}.

A l'aide d'un programme de simulation, nous traçons les courbes calculées, et présentons l'influence des paramètres physiques de surface (Zd, Et, Nt) ou de volume (Ln, α_b) sur le comportement de l'intensité de cathodoluminescence (I_{CL}) en fonction des paramètres du faisceau (E₀, Ip). Zd représente la largeur de la zone de déplétion, Et le niveau d'énergie des défauts de surface et Nt la concentration de ces défauts, Ln la longueur de diffusion des électrons dans la zone neutre et α le coefficient d'absorption du matériau.

III.2 Les bases physiques du modèle

Dans cette section, nous décrivons les bases physiques du modèle proposé, ainsi que les approximations et les hypothèses d'analyse utilisées dans le calcul :

- L'échantillon considéré est de phosphure d'indium de type p (p-InP).
- La forme analytique de la fonction de génération choisie est celle proposée par Wu et Wittry
 [1], c'est une gaussienne modifiée de variance (ΔZ)², centrée en Z₀ à partir de la surface
 (Figure III.1). On écartera la fonction de génération qui prend en compte l'élargissement
 latéral du faisceau dans le semiconducteur.
- L'étude se fait à une seule dimension, la profondeur z dans le matériau, et on considère que le faisceau d'électrons incidents est normal à la surface, ce qui provoque une résolution symétrique autour de l'axe du faisceau incident.
- La profondeur de pénétration R_{K-0} des électrons a été calculée d'après le modèle de Kanaya et Okayama (chapitre II, équation II.8) [2].
- Les défauts pris en compte, en l'occurrence les défauts de surface possédant un niveau énergétique unique E_t, de densité N_t, et de charge Q, donnent une barrière énergétique d'une hauteur (Eb) entre la surface et le volume. En général, pour un semiconducteur de type p le niveau énergétique Et est situé, au-dessus du niveau de Fermi intrinsèque Ei.

- La probabilité d'occuper le niveau d'énergie E_t dans la recombinaison non radiative des porteurs est contrôlée par un mécanisme Shockley-Read-Hall pour les conditions de nonéquilibre.
- Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont égales.
- Le quasi-niveau de Fermi des porteurs majoritaires est supposé constant, Pour résoudre plus aisément l'équation de continuité.

On suppose que le matériau semiconducteur soit semi-infini et séparé en deux régions (Figure III.1), que nous traitons séparément dans le calcul (la zone de déplétion et la zone neutre) où dans la zone de déplétion, on suppose que la recombinaison des porteurs en excès est presque négligeable. Dans la zone neutre, les porteurs créés par le faisceau électronique ont un régime de diffusion stationnaire, et l'intensité de cathodoluminescence provient des recombinaisons directes de ces porteurs.



Figure III.1 : Configuration utilisée pour notre modèle. L'origine du référentiel est fixée en haut de la zone déserte, de largeur Z_d . La zone de diffusion est semi-infinie, g(z) est la fonction de perte d'énergie.

III.3 Analyse de la surface libre du semiconducteur

On considère un matériau semiconducteur d'InP de type p, avec une concentration d'accepteurs (Na), et une densité de défauts de surface (Nt) ayant un niveau d'énergie (Et). L'existence d'une zone de déplétion de largeur Zd, donne une barrière énergétique d'une hauteur (Eb) entre la surface et le volume.

On explique l'apparition d'une zone de déplétion en surface comme suit : pour un semiconducteur de type p, les états de surface pleins agissent entant que donneurs, qui peuvent se vider et donner leurs électrons au volume du semiconducteur [3], et par conséquent modifier les concentrations des porteurs dans les bandes permises. Le transfert d'un nombre convenable d'électrons et de trous entre les densités d'états de volume et de la surface est nécessaire, cela se traduit par l'existence d'une charge électrostatique de surface exactement compensée par une charge égale et opposée dans le volume. Comme la densité de charges libres est très faible vis-àvis du nombre d'atomes, la charge superficielle est compensée par une zone de charge d'espace [4].

Il s'établit alors, au voisinage de surface un champ électrique \vec{E} qui s'oppose la diffusion des porteurs majoritaires vers la surface. L'équilibre thermodynamique est établit lorsque la force électrique, résultant de l'apparition du champ électrique équilibre la force de diffusion due au gradient de concentration de porteurs libres, le déficit de porteurs majoritaires (trous) au voisinage de la surface se manifeste énergétiquement par une courbure des bandes vers le bas (Figure III.2). Cette courbure montre qu'il existe une différence de potentiel (Eb) entre la surface et le volume, appelée potentiel de surface.

La charge absolue (Q) qui s'accumule à la surface a pour expression [5] :

$$Q = e. N_a. Z_d = e. N_t. (1 - f)$$
 (III.1)

Où :

Z_d est la largeur de la zone de déplétion:

$$Z_{d} = \frac{N_{t}(1-f)}{N_{a}}$$
(III.2)

f étant la probabilité d'occupation du niveau d'énergie des donneurs, elle est donnée par l'expression suivante [6] :

$$f = \frac{\Delta n(0) + n_0 + n_i \exp\left[\frac{E_i - E_t}{kT}\right]}{\Delta n(0) + n_0 + \Delta p(0) + p_0 + 2n_i \cosh\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right)}$$
(III.3)

Où : $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ sont respectivement l'excès de concentration des électrons et des trous en surface, n_i la concentration des porteurs intrinsèques, n_0 et p_0 sont respectivement la concentration des électrons et des trous à la surface, dont les expressions sont données par :

$$n_0 = \frac{n_i^2}{N_a} \exp(E_b / kT)$$
(III.4a)

$$p_0 = N_a. \exp(-E_b/kT)$$
(III.4b)

E_b est la hauteur de barrière, dont l'expression est donnée par :

$$E_{b} = \frac{e.N_{a}.Z_{d}^{2}}{2.\varepsilon}$$
(III.5)





(b) perturbation de l'arrangement périodique entre la surface et le volume.

III.4 Equation de transport des porteurs de charges

Dans ce paragraphe nous allons établir, de façon générale, les équations de transport relatives à chaque type de porteurs (électrons et trous) dans un semiconducteur en régime de faible injection.

III.4.1 L'équation de continuité

L'équation de continuité traduit le bilan de charges au cours du tems et gouverne leur distribution, son expression est écrite par rapport aux électrons et aux trous, respectivement

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -div.\,\vec{j}_n + G_n - R_n \tag{III.6a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\operatorname{div.} \vec{j}_{p} + G_{P} - R_{P}$$
(III.6b)

Où : \vec{j}_n (\vec{j}_p) est le flux des électrons (trous).

 G_n et G_P sont, respectivement, les taux de génération des électrons et des trous, et R_n et R_P sont leurs taux de recombinaison.

Lors de l'injection, les générations par unité de temps et unité de volume, des électrons et des trous sont identiques :

$$G_n = G_P = G \tag{III.7}$$

Les taux de recombinaison par unité de temps et unité de volume des électrons et des trous sont identiques, Si les états de charges des niveaux situés dans le gap ne sont pas modifiés lors des transitions électroniques.

$$R_n = R_P = R \tag{III.8}$$

En appliquant l'équation de continuité (III.6) à un modèle unidimensionnel (la profondeur Z), et en régime stationnaire, on aboutit à la forme classique suivante :

$$\operatorname{div.} \vec{j} = G(z) - R(z) \tag{III.9}$$

Le taux de génération est relié à la fonction de dissipation d'énergie $\Phi(u)$ par l'équation suivante [5]:

$$G(z) = \frac{\rho}{R} \phi \Phi(u)$$
(III.10)

La fonction de dissipation de l'énergie $\Phi(u)$ a la forme d'une gaussienne modifiée donnée par Wu et Wittry [1] sous la forme suivante:

$$\phi \Phi(\mathbf{u}) = \mathbf{A} \cdot \exp\left[-\left(\frac{\mathbf{u}-\mathbf{u}_0}{\Delta \mathbf{u}}\right)^2\right] - \operatorname{Bexp}\left(-\frac{\mathbf{b}\mathbf{u}}{\mathbf{u}_0}\right)$$
(III.11)

Où u = $z(\rho/R_{0-K})$ étant la profondeur de pénétration réduite et normalisée du parcours de Kanaya et Okayama, ρ la densité du semiconducteur en (g/cm³), R_{0-K} est la profondeur de pénétration des électrons, exprimée en (g/cm²) proposée par Kanaya et Okayama (chapitre II, équation II.8)

Les constantes A, B, b, u₀, Δu , existant dans l'expression de $\Phi(u)$ sont calculées pour le cas de GaAs [1]. $\Delta u = 0.35$, u₀ = 0.125, b = 4 et $\frac{B}{A} = 0.4$.

Les constantes A et B sont déterminées en utilisant la condition de normalisation de $\Phi(u)$:

$$\int_0^{+\infty} \phi \Phi(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \mathbf{G}_0 \tag{III.12}$$

 G_0 est le taux de génération total (cm⁻² .s⁻¹), donné par :

$$G_0 = \frac{J_b \cdot E_0 \cdot (1-f)}{e \cdot \varepsilon_{e-h}}$$
 (III.13)

Où J_b la densité de courant et E_0 l'énergie des électrons, ε_{e-h} l'énergie de création d'une paire (e-h) et f est la fraction de l'énergie des électrons rétrodiffusés

Le calcul de l'intégral de $\Phi(u)$ (relation III.12) entre 0 et + ∞ donne :

$$\int_{0}^{+\infty} \Phi(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = \mathbf{A} \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \Delta \mathbf{u}\right) \left[1 - \operatorname{efr}\left(\frac{u_{0}}{\Delta u}\right)\right] - \mathbf{B}\left(\frac{u_{0}}{b}\right)$$
(III.14)

En tenant compte de la relation (III.13) et (III.14), nous trouvons la valeur de la constante A :

$$A = \frac{2.J_{b}.E_{0}(1-f)}{e.\varepsilon_{e-h}.\sqrt{\pi}.\Delta u \left[1 + erf\left(\frac{u_{0}}{\Delta u}\right)\right] - B\left(\frac{u_{0}}{b}\right)}$$
(III.15)

III.4.2 Résolution de l'équation de continuité dans la zone de déplétion

Dans cette zone, les flux des porteurs de charge résultant simultanément de la conduction électrique et de la diffusion sont donnés par :

$$\vec{J}_n = -D_n \overline{\text{grad}}(\Delta n) - \Delta n. \mu_n. \vec{E}$$
 (III.16a)

$$\vec{j}_p = -D_P \overrightarrow{\text{grad}}(\Delta p) + \Delta p. \mu_p. \vec{E}$$
 (III.16b)

Où Δn et Δp sont, respectivement, les densités d'électrons et de trous en excès créées par l'impact du faisceau d'électrons sur la surface du semiconducteur.

 $D_n(D_P)$ et $\mu_n(\mu_p)$ sont respectivement le coefficient de diffusion et la mobilité des électrons (trous), \vec{E} le champ électrique obtenu par l'intégration de l'équation de poisson, donné par : div. $\vec{E} = -\frac{e.N_a}{\epsilon}$ (III.17)

Dans le cas d'une seule dimension, et sous l'hypothèse de faible injection, le champ électrique dans la zone de déplétion prend la forme linéaire suivante :

$$E(z) = -\frac{e.N_a(z-z_d)}{\varepsilon}$$
(III.18)

Où Z_d est la largeur de la zone de déplétion, N_a la concentration du dopant accepteur, et ε la constante diélectrique du semiconducteur.

On peut écrire la relation (III.9) pour chaque type de porteurs sous la forme suivante :

$$\frac{dJ_n}{dz} = G_n(z) - R_n(z)$$
(III.19a)

$$\frac{\mathrm{d}J_{\mathrm{P}}}{\mathrm{d}z} = \mathrm{G}_{\mathrm{P}}(z) - \mathrm{R}_{\mathrm{P}}(z) \tag{III.19b}$$

Lorsqu'on introduit les équations (III.16), (III.17) et (III.18) dans l'équation (III.19) nous trouvons :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} + \mu_n \frac{e \cdot N_a}{\epsilon} (z - z_d) \frac{d\Delta n(z)}{dz} + \mu_n \frac{e \cdot N_a}{\epsilon} \Delta n(z) = G_n(z) - R_n(z)$$
(III.20a)

$$-D_{P}\frac{d^{2}\Delta P(z)}{dz^{2}} - \mu_{p}\frac{e.N_{a}}{\epsilon}(z - z_{d})\frac{d\Delta p(z)}{dz} - \mu_{p}\frac{e.N_{a}}{\epsilon}\Delta p(z) = G_{P}(z) - R_{P}(z)$$
(III.20b)

En négligeant le taux de recombinaison dans la zone de déplétion, on aura :

$$R_n(z) = R_P(z) = 0 \tag{III.21}$$

Compte tenu de la relation d'Einstein (D = $\mu \frac{KT}{e}$) et en posant que :

$$\alpha = \frac{e^2 N_a}{2.\epsilon kT}$$
(III.22)

L'équation de continuité (III.20) devient:

$$-\frac{\mathrm{d}^2 \Delta n(z)}{\mathrm{d}z^2} + 2\alpha(z - z_\mathrm{d})\frac{\mathrm{d}\Delta n(z)}{\mathrm{d}z} + 2\alpha\Delta n(z) = \frac{G(z)}{D_\mathrm{n}}$$
(III.23a)

$$-\frac{d^2\Delta p(z)}{dz^2} - 2\alpha(z - z_d)\frac{d\Delta p(z)}{dz} - 2\alpha\Delta p(z) = \frac{G(z)}{D_P}$$
(III.23b)

La résolution de ces équations différentielles, du second ordre, dans la zone de déplétion donne :

$$\Delta n(z) = \exp[\alpha(z - z_d)^2] \left\{ \theta_n + \xi_n \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z - z_d)\right] + \int_0^z \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{2.D_n} \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z' - z_d)\right] dz' - \operatorname{erf}\alpha z - z d0 z \pi \alpha Gz' 2.Dn dz'$$
(III.24a)

$$\Delta p(z) = \exp[-\alpha(z - z_d)^2] \left\{ \theta_p + \xi_p F\left[\sqrt{\alpha}(z - z_d)\right] + \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{G(z')}{D_p} F\left[\sqrt{\alpha(z' - z_d)}\right] dz' - F\alpha z - z d0 z 1 \alpha. Gz' DP dz'$$
(III.24b)

Avec :

 $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \operatorname{erf}(-t^2) dt$ et $F(x) = \int_0^x \exp(t^2) dt$ $\theta_n, \xi_n, \theta_p, \xi_p$ sont des constantes qui seront déterminées après avoir imposé les conditions aux limites.

III.4.3 Résolution de l'équation de continuité dans la zone neutre

Dans cette zone de volume les porteurs en excès sont animés d'un mouvement de diffusion sous l'effet du gradient de leur concentration en l'absence de tout champ électrique. Le flux des porteurs minoritaires (les électrons) est principalement dû à la diffusion qui permet d'écrire la relation (III.16a) avec un seul terme, celui dû à la diffusion :

$$\vec{j}_n = -D_n \overline{\text{grad}}(\Delta n)$$
 (III.25)

Dans le cas d'une injection faible dans un semiconducteur de type p homogène en dopage et en centres de recombinaison, de densité de trous à l'équilibre p_0 , avec (Δn et $\Delta p \ll p_0$), le taux de recombinaison des porteurs est donné, pour les électrons par :

$$R_n = \frac{n - n_0}{\tau_n} = \frac{\Delta n(z)}{\tau_n}$$
(III.26)

 τ est la durée de vie des électrons ; elle relie la longueur de diffusion L_n au coefficient de diffusion D_n par la relation :

$$\tau_n = \frac{L_n^2}{D_n} \tag{III.27}$$

En tenant compte des relations (III.25) et (III.26), on peut écrire l'équation de continuité (III.19) sous la forme :

$$-D_{n}\frac{d^{2}\Delta n(z)}{dz^{2}} = G - \frac{\Delta n(z)}{\tau_{n}}$$
(III.28)

La solution de cette équation différentielle est donnée par :

$$\Delta n(z) = B_n \exp\left[-\frac{(z-z_d)}{L_n}\right] + \frac{L_n}{2D_n} \int_{z_d}^{z} G(z') \left\{ \exp\left(-\frac{|z-z'|}{L_n}\right) - \exp\left(-\frac{z-z'-2z_d}{L_n}\right) \right\} dz'$$
(III.29)

Où B_n est une constante représentant la concentration des électrons au point ($z = z_d$) de la zone de déplétion ($B_n = \Delta n(z = z_d)$).

III.4.4 Conditions aux limites

Une résolution des équations de continuité nécessite la connaissance des expressions mathématiques des conditions aux limites.

Les conditions aux limites appropriées pour déterminer les constantes θ_n , θ_p , ξ_n , ξ_p , et B_n sont :

i. Condition aux limites à l'interface zone déplétion / zone neutre ($z = z_d$)

- Condition de continuité des excès de porteurs minoritaires (les électrons) :

$$\Delta n(z_d^-) = \Delta n(z_d^+) \tag{III.30a}$$

- Condition de continuité des excès de porteurs majoritaires (les trous) :

$$\Delta p(z_d^-) = \Delta p(z_d^+) \tag{III.30b}$$

- Condition de neutralité dans la zone neutre (neutralité de volume) :

$$\Delta n(z_d^+) = \Delta p(z_d^+)$$
(III.30c)

- Condition de continuité de flux de porteurs minoritaires :

$$J_n(z_d^-) = J_n(z_d^+)$$
 (III.30d)

En remplaçant $J_n(z_d^-)$ et $J_P(z_d^+)$ par leurs expressions (III.16a) et (III.16b) respectivement, la condition (III.30d) devient :

$$\frac{d\Delta n}{dz}\Big|_{z=z_{d}^{-}} = \frac{d\Delta n}{dz}\Big|_{z=z_{d}^{+}}$$
(III.30e)

ii. Condition à la surface libre du semiconducteur (z = 0)

Les taux de recombinaisons des porteurs minoritaires et majoritaires sont égaux (c.-à-d. le courant total est nul) :

$$J_{n}(0) = J_{P}(0) = -u(0)$$
(III.30f)

Où : u(0) est le nombre total des porteurs recombinants à la surface par unité de temps et unité de surface (cm⁻² .s⁻¹), il peut être exprimé par [7]:

$$u(0) = \frac{V_{th}\sigma_n\sigma_p N_t(pn-n_i^2)}{\sigma_p [p+n_i.exp [E_i-E_t/kT]] + \sigma_n [n+n_i.exp [(E_t-E_i)/kT]]}$$
(III.31)

 V_{th} étant la vitesse thermique des porteurs, σ_n et σ_p les sections de captures des électrons et des trous, E_t le niveau des centres recombinants, E_i le niveau de Fermi intrinsèque et n et p, sont respectivement les concentrations des électrons et des trous après l'excitation, elles sont données par :

$$n = n_0 + \Delta n(0) \tag{III.32a}$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \Delta \mathbf{p}(0) \tag{III.32b}$$

L'hypothèse (§III.2), impose que les sections de capture des deux types de porteurs soient égales ($\sigma_n = \sigma_p$), ainsi que la vitesse thermique des électrons et des trous. La relation liant le coefficient de capture (c) à la vitesse thermique est donnée par **[8]** :

$$c = \sigma. V_{th}$$
(III.33a)

Le coefficient de capture est également donné en fonction de la durée de vie des porteurs (τ) et la densité des centres de recombinaison (N_t) par la relation :

$$c = \frac{1}{\tau N_t}$$
(III.33b)

En introduisant (III.33a) et (III.32) dans (III.31) on obtient :

$$u(0) = \frac{cN_t[\Delta n(0).\Delta p(0) + p_0.\Delta n(0) + n_0\Delta p(0)]}{n_0 + \Delta n(0) + n_t + p_0 + \Delta p(0) + p_t}$$
(III.34)

Où les concentrations n_t et p_t sont données par :

$$n_{t} = N_{c} \exp[-(E_{c} - E_{t})/kT]$$
(III.35a)

$$p_{t} = N_{v} exp[-(E_{t} - E_{v})/kT]$$
(III.35b)

Les équations précédentes (III.30a, b, c, e, f) nous permettent de déterminer les constantes θ_p , ξ_n , ξ_p et B_n qui sont écrites comme une fonction linéaire de θ_n .

Le calcul de la constante θ_n se fait à partir d'une équation de 2^{ème} degré, qui s'écrit sous la forme simple **[9]**:

$$K. \theta_n^2 + L. \theta_n + M = 0$$
(III.36)

La solution de cette équation s'écrit :

$$\Theta_{n} = \frac{-L + \sqrt{L^{2} - 4.K.L}}{2.K}$$
(III.37)

III.5 Calcul self-consistent

Nous avons vu précédemment (§III.3) que la largeur de la zone de déplétion (z_d) est reliée à la probabilité d'occupation f par l'équation (III.2). La probabilité d'occupation f (équation III.3) est à son tour reliée aux excès de concentration de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ à la surface libre (Z=0) dont les expressions sont:

$$\Delta n(0) = \exp(\alpha z_d^2) \left[\theta_n + \xi_n \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} z_d) \right]$$
(III.38a)

$$\Delta p(0) = \exp(-\alpha z_d^2) \left[\theta_p + \xi_p F(\sqrt{\alpha} z_d)\right]$$
(III.38b)

Ces deux équations montrent clairement qu'il existe une relation entre les excès de porteurs et la largeur de la zone déplétion z_d .

Le calcul approprié de z_d se fait d'une façon self-consistente. La procédure de calcul de z_d est : on introduit une valeur initiale de z_d dans les équations de transport, pour une énergie E_0 et une intensité de courant I_P du faisceau électronique. Ces équations sont résolues et les excès de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ sont déterminés. Pour ces excès de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$, on déduit une nouvelle valeur de z_d , si la différence de calcul entre cette valeur de z_d et sa valeur initiale est suffisamment petite, la valeur de est la valeur recherchée, si par contre la différence est grande, on introduit cette nouvelle valeur comme valeur initiale dans les équations de transport et on détermine les nouveaux excès de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ pour arriver ainsi à une nouvelle valeur de z_d . La procédure continue de cette manière jusqu'à ce que la valeur de z_d au rang (n) soit égale à la valeur au rang (n+1). Cette valeur finale,

correspondant à la convergence, permet de résoudre d'une façon self-consistente les équations de transport et déterminer les excès de porteurs pour un niveau d'excitation donnée (E_0 , I_P).

III.6 Calcul de l'intensité du signal de cathodoluminescence

L'intensité de cathodoluminescence (I_{CL}) est le nombre total de photons émis par unité de temps par un échantillon, soumis à un bombardement électronique.

L'intensité totale du signal de cathodoluminescence se calcule par l'équation [10]:

$$I_{CL} = (1 - R) \int_{V} A(z) \eta \cdot \frac{\Delta n(z)}{\tau} \cdot dz$$
(III.39)

Avec:

V : volume de l'échantillon, $\Delta n(z)$: concentration des porteurs minoritaires en excès à la profondeur z. η : efficacité de luminescence (rendement radiatif) donnée par la relation suivante :

$$\eta = \frac{\tau}{\tau_{\rm r}} \tag{III.40}$$

 $O \dot{u}$: τ est la durée de vie totale et τ_r la durée de vie radiative.

(1-R) : coefficient de transmission à travers la surface de l'échantillon.

R : coefficient de réflexion, qui peut s'exprimer à partir de l'indice de réfraction (n) par la relation [11] :

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2$$
(III.41)

A(z): une fonction de profondeur qui tient compte des pertes optiques par l'absorption interne des photons à la profondeur z, et qui s'écrit [12]:

$$A(z) = \int_0^{\theta_c} \exp\left(\frac{-\alpha z}{\cos \theta}\right) \sin \theta \, d\theta \tag{III.42}$$

 α est le coefficient d'absorption optique et θ_c est l'angle critique pour la réflexion totale à la surface interne du semiconducteur.

Les radiations subissent des réflexions totales dans le matériau quand l'angle θ de leur incidence supérieur à θ_c . Le coefficient de réflexion R est, en première approximation, indépendant de l'angle d'incidence pour $0 < \theta < \theta_c$ [7]. L'angle critique θ_c est lié à l'indice de réfraction (n) du matériau par la relation:

$$\sin \theta_{\rm c} = 1/n \tag{III.43}$$

L'expression du terme A(z) a été, de ce fait, approximée par certains auteurs **[13,14]**, à cause des faibles valeurs de θ_c :

$$A(z) \sim \exp(-\alpha z) \tag{III.44}$$

- Pour simplifier davantage l'équation de l'intensité de cathodoluminescence (équation III.39), on introduit les hypothèses suivantes :
- Le coefficient de réflexion R est petit tant que l'angle critique de réflexion totale θ_c est petit ($\theta_c = 17^\circ$ pour InP).
- Les processus radiatifs et non radiatifs sont absolument indépendants, dans notre calcul de l'intensité de cathodoluminescence on ne considère que les processus radiatifs, la durée de vie est donc $\tau = \tau_r$.
- La zone de déplétion en surface ayant la largeur z_d ne produit aucune recombinaison radiative.
- La fonction de correction des pertes d'énergie utilisée est celle donnée par la relation (III.44).

Dans notre étude, nous utilisons le modèle simplifié de faible injection, ce qui permet d'écrire l'intensité I_{CL} dans le cas d'un semiconducteur de type p sous la forme finale suivante :

$$I_{CL} \approx \int_{z_d}^{+\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_r} \exp(-\alpha z) dz$$
(III.45)

III.7 Organigramme de calcul de la cathodoluminescence à T=300K

L'intensité de cathodoluminescences dans le matériau considéré (p-InP) est obtenue en poursuivant les étapes décrites dans l'organigramme représenté sur la figure III.3, et en exécutant le programme FORTRAN traduisant cet organigramme.



Figure III.3: Organigramme des différentes étapes de calcul de l'intensité de cathodoluminescence à T=300 K.

Références

- [1] C. J. Wu, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 49(5), 2827(1978).
- [2] K. Kanaya, S. Okayama, J. phys. D : Appl. Phys. 5, 43(1972).
- [3] J. Derrien, Techniques de l'Ingenieur, Traité Généralités A 245, 2 (1990).
- [4] C. Sebenne, Interface Semiconducteur-Vide, Ecole d'Eté d'Aurssois en Photoélectrochimie, Octobre (1984).
- [5] A. Djemel, R. J. Tarento, J.Castaing, Y. Marfaing and A. Nouiri, Phys. Stat. Sol. (a)168, 425(1998).
- [6] R. J.Tarento, Y. Marfaing, J. Appl. Phys. 71(10), 4997(1992).
- [7] S.M. Sze, Physics of semiconducteurs Devices , 2nd edi., Ed. John Wiley et sons, New York (1981).
- [8] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 4^{éme} ed., Ed. Masson, Paris (1998).
- [9] D. Kenieche, Thèse de Magister, Université Mentouri, Constantine (2001).
- [10] F.Cléton, B. Sieber, R. A. Masut, L. Isnart, J. M. Bonard and J. D. Ganiére, Semicond. Sci. Technol. 11, 726 (1996).
- [11] B. G. Yacobi et D. B. Holt, Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids, Ed. Pelenum Press, New York and London (1990).
- [12] W. Hergert and L. Pesemann, phys. Stat. Sol. (a) 85, 641(1984).
- [13] W. Hergert, P. Reck, L. Pasemann and J. Schreiber, Phys. Stat. Sol. (a) 101, 611(1987).
- [14] S. Achour, Phil. Mag. Lett. 59, 205 (1989).



IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons les résultats de calcul ainsi que nous discuterons les différentes courbes de l'intensité totale du signal cathodoluminescence I_{CL} obtenues par la simulation numérique dans le matériau InP.

Le comportement du signal cathodoluminescence est influencé par certain nombre de paramètres, dont les plus importants sont : les paramètres du faisceau (l'énergie et l'intensité du courant des électrons primaires), les paramètres physiques du matériau (coefficient d'absorption α , longueur de diffusion des porteurs minoritaire L_n et concentration de dopage N_a). On déterminera également l'influence des paramètres physiques gouvernants les propriétés de surface tels que: la concentration N_t des défauts de surface et la position du niveau d'énergie E_t associé à ces défauts. La largeur de la zone de déplétion z_d est un autre paramètre peut influer sur le signal de cathodoluminescence.

IV.2 Variation des concentration de porteurs en excès à la surface du semiconducteur

Les figures (IV.1a) et (IV.1b) montrent les variations des porteurs excédentaires minoritaires $\Delta n(0)$ et majoritaires $\Delta p(0)$ à la surface du semiconducteur en fonction de E₀ pour différentes valeurs de I_P.

Les courbes de $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ présentent un maximum dans le domaine des faibles énergies, l'accroissement jusqu'au maximum dû au phénomène de génération puis une décroissance de $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ pour les fortes énergies due à l'augmentation du volume de génération et au phénomène de recombinaison.

On remarque que lorsque I_P augmente, $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ augmentent parce que I_P joue un rôle important dans la création de paires électron-trou et donc conduit à une augmentation des porteurs en excès $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$, les courbes continuent à décroître pour les hautes énergies et la différence entre ces courbes devient faible et les valeurs de concentration de porteurs en excès se rapprochent de zéro, ce qui indique que tous les porteurs se sont recombinés.



(a)



Figure IV.1: Variation de la concentration des porteurs en excès à la surface, $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$, en fonction de l'énergie incidente, pour différentes valeurs de l'intensité du courant.

IV.3 Dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec les conditions d'excitation et les propriétés du matériau

Les courbes théoriques de l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie incidente sont les plus utilisées pour la détermination quantitative des valeurs physiques de volume et de surface, tels que: la longueur de diffusion L_n , le coefficient d'absorption α , la durie de vie des porteurs minoritaire τ la densité d'états de surface N_t , le niveau associé E_t , etc. La détermination d'un paramètre exige un ajustement des courbes théoriques et expérimentales.

IV.3.1 Variation de l'intensité I_{CL} avec les conditions d'excitation du faisceau incident

Nous nous limiterons dans ce qui suit aux deux paramètres du faisceau incident (l'énergie, l'intensité du courant), qui ont les plus influents.

IV.3.1.1 Influence de l'intensité du courant incident

L'effet de l'intensité du courant I_P du faisceau incident sur les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ est représenté sur la figure (IV.2).

On constate pour les cinq courbes que l'intensité I_{CL} passe par un maximum située dans l'intervalle [20 à 30 keV] de l'énergie du faisceau incident, où l'augmentation de la valeur I_{CL} en fonction de E_0 est liée à la recombinaison en surface, lorsque ce maximum est atteint, on constate une diminution de I_{CL} en fonction de E_0 , cela est due au phénomène d'absorption optique.

On constate, également, que pour toutes les valeurs de I_P choisies il y a une proportion entre I_P et I_{CL} , plus I_P est élevée, plus I_{CL} est élevée, en plus de la présence d'une diminution rapide de I_{CL} pour des valeurs relativement élevées de I_P comparativement aux faibles valeurs. Pour expliquer ce dernier phénomène, on doit tenir compte de deux comportements compétitifs, la recombinaison des porteurs, qui génère le signal de cathodoluminescence et le phénomène d'absorption optique, qui au contraire, fait diminuer l'intensité de ce signal.



Figure IV.2 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes intensité du courant.

IV.3.1.2 Influence de l'énergie incidente

La figure (IV.3) montre l'influence de l'énergie du faisceau incident sur les courbes $I_{CL} = f(I_P)$

D'après ces courbes, on remarque que la relation entre I_{CL} et I_P est une relation linéaire. Ce résultat a été confirmé par des travaux antérieurs réalisés par Rao-Sahib [1] qui donnent l'expression $I_{CL} \propto I_p^m$, avec 1 < m < 2, m dépendant de I_P et E_0 .

L'analyse de ces courbes indique que : quand E_0 augmente, I_{CL} augmente, on peut expliquer cette dépendance par l'influence de E_0 c'est à dire pour les faibles excitations ce sont les recombinaisons en surface, non radiatives en majorité qui dominent, alors que pour les fortes excitations ce sont les recombinaisons radiatives qui deviennent dominantes.

Nos résultats, sont similaires à des résultats trouvés par A. Boudjani et al.[2] pour le matériau d'InP et A. Djamel et al. [3] pour GaAs.



Figure IV.3 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'intensité de courant pour différentes énergies.

IV.3.2 Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de volume

IV.3.2.1 Influence du coefficient d'absorption

La figure (IV.4) représente l'effet du coefficient d'absorption sur le signal de cathodoluminescence.

On remarque qu'une augmentation de α réduit l'intensité de cathodoluminescence, car la forte absorption optique atténue fortement la luminescence comme on peut remarquer sur la courbe de $\alpha = 1.2 \times 10^4$ cm⁻¹.

On remarque également que le maximum de l'intensité I_{CL} se déplace légèrement vers les grandes énergies incidentes quand le coefficient d'absorption décroît ; ce qui est logique car on a une quantité plus grande de paires (e-h) donc beaucoup plus de recombinaisons radiatives et donc beaucoup plus de luminescence, qui s'accentue par la décroissance du coefficient d'absorption. L'influence de ce paramètre ne devient significative que pour des énergies d'excitations relativement élevées, ce qui signifie bien que c'est un paramètre de volume plus qu'il n'est de surface.

Ces courbes sont similaires à celles obtenues par S. Soualmia et al. [4] et J. C. H. Phang et al. [5] pour matériau GaAs.



Figure IV.4 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différents coefficients d'absorption.

IV.3.2.2 Influence de la longueur de diffusion

La longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès dans des semiconducteurs massifs a été, pendant longtemps pour les semiconducteurs, le paramètre le plus étudié [6-8].

La figure (IV.5) représente la variation de I_{CL} en fonction de E_0 sous l'influence de la longueur de diffusion L_n .

On observe à partir des courbes qu'une augmentation de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires (les électrons) L_n entraîne une diminution de la l'intensité I_{CL} . On peut expliquer ce phénomène par le fait que les porteurs excédentaires prennent beaucoup plus de temps pour se recombiner ($L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$), ce qui fait augmenter la probabilité des recombinaisons non radiatives et par suite diminuer I_{CL} .

Les résultats indiqués sur la figure IV.5 sont similaires à des résultats antérieurs obtenus dans la littérature notamment de F. Cléton et al. [9], A. Boudjani et al.[2] pour l'InP, J. C. H. Phang et al.[5], W. Hergert et al.[10] pour le GaAs.



Figure IV.5 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes longueurs de diffusion.

IV.3.2.3 Influence de la concentration de dopage

Les courbes de la figure (IV.6) montrent l'effet de la concentration des accepteurs N_a sur l'intensité de la cathodoluminescence I_{CL} .

On remarque que le dopage influe notablement sur l'intensité de cathodoluminescence dans l'intervalle des grandes énergies, son influence est importante après une valeur de $E_0 \approx$ 15 keV, alors que pour l'intervalle des faibles énergies, on constate une légère différence pour des trois dopages différents. D'autre part, à partir de l'expression de la zone de déplétion en fonction du dopage ($Z_d = \frac{N_t(1-f)}{N_a}$), on remarque qu'une augmentation du dopage diminue la largeur de la zone de déplétion, déplaçant ainsi le maximum de la courbe vers les grandes tensions d'accélérations.

Pour les forts dopages, la largeur de cette zone devient extrêmement faible et conduit à une intensité I_{CL} très élevée. Egalement, une autre explication peut être donnée, est que l'intensité de cathodoluminescence augmente avec la concentration d'impuretés (dopage) à cause d'une décroissance de la durée de vie radiative.



Figure IV.6 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes concentration de dopages.

IV.3.3 Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de surface

IV.3.3.1 Influence du niveau énergétique des défauts de surface

La présence de défauts ou impuretés introduisant des niveaux d'énergie dans la bande interdite du semiconducteur, influe directement sur les caractéristiques électriques du composant fabriqué à partir d'un tel semiconducteur [11].

La figure(IV.7) montre l'influence de différentes valeurs de E_t sur I_{CL} . Pour les basses énergies, les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ sont évidemment les plus affectées par le changement de Et, où on observe une assez grande différence d'une courbe à une autre, mais cette différence devient négligeable et les courbes se confondent pour les hautes énergies.

Une augmentation de Et provoque une augmentation de l'intensité de cathodoluminescence sur toute la gamme d'énergie. Ceci peut être expliqué par la diminution de la durée de vie des porteurs de charge piégés sur les défauts introduits dans la bande interdite. En effet, des défauts ayant des niveaux d'énergie situés loin du milieu de la bande interdite, où la recombinaison non radiative est faible, piègent moins de charges que ceux ayant un niveau proche du milieu. On remarque que plus Et s'éloigne du milieu de la bande interdite, le maximum de I_{CL} se trouve légèrement déplacé vers les faibles énergies (il passe de 35 à 27 keV lorsque Et varie de 1.25 eV à 1.34eV).

On constate une assez grande différence d'une courbe à une autre, mais cette différence devient négligeable et les courbes se confondent pour les hautes énergies. La compréhension de ce phénomène devient assez facile si l'on se rend compte que Et est un paramètre de surface, donc son influence ne peut apparaître que pour les basses énergies d'excitation du faisceau incident.



Figure IV.7 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différents niveaux d'énergie (E_t) associés au défaut de surface.

IV.3.3.2 Influence de la densité des défauts de surface

La figure (IV.8) représente l'influence de la densité totale des défauts N_t sur l'intensité I_{CL} .

On remarque que l'augmentation de la densité de défauts réduit l'intensité I_{CL} . En fait, à basse énergie, les porteurs excédentaires créés par le faisceau d'électrons prés de la surface du matériau peuvent se recombiner par processus non radiatif, par conséquent une augmentation de la densité de défauts Nt entraîne un abaissement de l'intensité I_{CL} . On remarque, également, que lorsque l'énergie des électrons incidents augmente cela signifie l'existence d'une grande profondeur de pénétration des électrons dans le volume du matériau et par conséquent l'effet de surface diminue.

Enfin, signalons que la charge électrique du défaut dépend directement de la densité N_t (Chapitre III, équation III.1). On peut donc conclure que son influence est tout à fait similaire à celle de N_t .



Figure IV.8 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes densité de défauts de surface.

IV.3.3.3 Influence de la largeur de la zone de déplétion

La variation de l'intensité I_{CL} en fonction de E_0 pour différentes largeurs de la zone de déplétion Z_d est représentée sur la figure (IV.9), On note que la forme générale des courbes est quasiment la même quelle que soit la valeur de Z_d .

On note également que lorsque Z_d augmente, I_{CL} diminue, ceci peut être expliqué par le fait que la zone de déplétion est une zone exempte de recombinaisons radiatives (zone morte), ce qui conduit à imaginer que cette région est une barrière pour les recombinaisons radiatives et que son augmentation entraîne, de ce fait, une diminution de celles-ci et donc une diminution de I_{CL} .

Il est aussi important de noter que le champ électrique présent dans cette zone sépare les paires électron-trou et conduit généralement à une baisse des recombinaisons radiatives en surface. L'épaisseur effective Zd de cette zone dépend des conditions expérimentales et de la qualité de l'échantillon [12].

La largeur de la zone de déplétion joue également un rôle important dans le déplacement du maximum des courbes vers les basses énergies quand Zd diminue, comme le montre la figure. Un autre renseignement concerne la partie de la courbe avant le maximum qui est la seule partie affectée par les différentes variations de Zd. Pour les valeurs d'énergie incidente ($E_0 > 37$ keV), les courbes deviennent presque identiques et se confondent c'est-à-dire qu'il n'y a plus d'effet de Z_d sur l'intensité de I_{CL}, ce résultat est similaire à celui trouvé par W. Hergert et al. [**10**].



Figure IV.9 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes largeurs de la zone de déplétion.

IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés essentiellement à l'interprétation des résultats obtenus par la simulation numérique de l'intensité du signal de cathodoluminescence dans le semiconducteur InP à température ambiante.

Nous avons montré l'influence des différents paramètres physiques de surface (Z_d , N_t et E_t), de volume (L_n , α et N_a) et du faisceau d'électrons (E_0 et I_P) sur l'intensité I_{CL} .

Nous avons constaté dans cette étude que l'ensemble des courbes de $I_{CL} = f(E_0)$ gardent la même allure générale. En effet, l'intensité I_{CL} garde le même comportement, elle croît, passe

par un maximum, puis décroît quand l'énergie augmente. De plus, la variation de chaque type de paramètres modifie différemment ces courbes, ce qui donne la possibilité de déterminer, l'origine des variations locales de l'intensité I_{CL} .

L'étude de I_{CL} au domaine de faibles énergies du faisceau nous a permis de conclure que la contribution des paramètres de surface dominent, alors que pour le domaine des énergies élevées la contribution des paramètres du volume dominent. L'observation des différentes variations de l'intensité I_{CL} , nous a permis de dire que la relation entre celle-ci et les paramètres caractérisants le semiconducteur est non linéaire.

Notre résultat, $I_{CL} = f(I_p)$, a montré une dépendance linéaire entre I_{CL} et I_p . Comme nous l'avons signalé, nos résultats sont, tout à fait similaires aux résultats trouvés dans la littérature.
Références

- [1] T. S. Rao-Sahib, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 40 (9), 3745(1969).
- [2] A. Boudjani, B. Sieber, F. Cléton, A. Rudra, Materials Science and Engineering B42, 192 (1996).
- [3] A. Djemel, R. J.Tarento, J. Castaing, Y. Marfaing and A. Nouiri, Phys. Stat. Sol. (a)168, 425(1998).
- [4] S. Soualmia, A. Bouldjedri, and A. Benhaya, Scanning 33, 252 (2011).
- [5] J. C. H. Phang, K. L. Pey and D. S. H. Chan, IEEE Trans. Electron Devices 39, 782 (1992).
- [6] C. J. Wu, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 49, 2827 (1978).
- [7] I. D. Makuta and A. I. Kulak, J. Phys. Chem. Solids 55(2), 21(1994).
- [8] J. Tousek, D. Kindl, J. Touskova, Solar Energy Materials & Solar Cells 64, 29 (2000).
- [9] F.Cléton, B. Sieber, R. A. Masut, L. Isnard, J. M. Bonard and J.D. Ganiére, Semicobd. Sci. Technol. 11, 726 (1996).
- [10] W. Hergert, P.Reck, L. Pasemann, and J. Schreiber, Phys. Stat. Sol. (a) 101, 611(1987).
- [11] L. Meng et al, J. Phys. D: Appl. Phys. 48(44), 445105 (2015).
- [12] S. Achour, Phil. Mag. Lett. 59, 205 (1989).

Conclusion générale et Perspectives

Conclusion générale

Dans ce mémoire nous avons proposé un modèle théorique simple pour le calcul de la cathodoluminescence, à température ambiante, dans un matériau massif de phosphure d'indium de type P et pour des conditions de faible injection.

Notre objectif principal était la détermination de l'influence des différents paramètres physiques intrinsèques (paramètres de surface: Nt, Et et de volume : Na, Ln, α) et extrinsèques (paramètres d'injection du faisceau incident: E₀, Ip) sur le comportement de l'intensité du signal de cathodoluminescence, en faisant varier les grandeurs de ces paramètres.

La modélisation de l'intensité de cathodoluminescence, est basée sur l'établissement et la résolution des équations de continuité, dans la zone de déplétion et neutre du matériau, pour chaque type des porteurs de charges en excès à l'aide d'une méthode de calcul self-consistent.

L'analyse des résultats obtenus par simulation numérique, montrent que toutes les courbes de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents E_0 ($I_{CL} = f(E_0)$) présentent le même comportement général ; elles augmentent à basse énergie, atteignent un maximum et puis diminuent à haute énergie. Ceci est dû à deux processus compétitifs et prédominants qui sont la recombinaison de porteurs en excès à basse énergie et l'absorption optique à haute énergie. La position du maximum dépend fortement des paramètres de surface et du volume. Les courbes $I_{CL}=f(Ip)$ montrent un caractère linéaire.

Les allures générales des courbes obtenues dans cette étude sont comparables à celles données dans la littérature pour d'autres matériaux, tels que : GaAs et CdS.

Perspectives

- Amélioration du modèle en introduisant d'autres paramètres tels que: le diamètre de sonde électronique et l'effet de la température sur le signal cathodoluminescence.

- Validation du modèle proposé en comparant les résultats de calcul numérique aux résultats expérimentaux et l'extraction de quelques paramètres physique du matériau.





Principales propriétés physiques d'InP à 300 K

Propriété	Symbole	Valeur
Numéro atomique	Z	41.77
Longueur de liaison (A°)	r ₀	In-In (P-P) 4.15
		In-P 2.54
Paramètre de maille (A°)	a	5.8690
Masse moléculaire (g)	М	145.792
Densité (g/cm ³)	ρ	4.791
Point de fusion (C°)	T _f	1062
Conductivité thermique (w.cm ⁻¹ .k ⁻¹)	K _T	0.7
Chaleur spécifique (J/g .K)	C _P	0.322
Diffusité thermique (cm ² .s ⁻¹)	D _{th}	0.372
Coefficient de dilatation linéaire (K ⁻¹)	α ₁	$4.56 imes 10^{-6}$
Ionicité	f _i	0.42
	C ₁₁	10.22×10^{10}
Constantes d'élasticité	C12	5 72 \(1010)
(N. m ⁻²)	C ₄₄	4.42×10^{10}

Affinité électronique (eV)	χ	4.38
Travail de sortie (eV)	w ₀	5.65
Longueur d'onde d'émission fondamentale (µm)	$\lambda_{ m g}$	0.92
Densité d'état : bande de valence (cm ⁻³)	N _V	2×10^{19}
Densité d'état : bande de conduction (cm ⁻³)	N _C	0.05×10^{19}
Résistivité intrinsèque (Ω. Cm)	$ ho_{i}$	$10^6 - 10^8$
Mobilité des électrons, trous (cm ² /V. s)	μ _n , μ _p	4600, 150
Masse effective des électrons, trous en (m_0)	m _e , m _p *	0.073, 0.089
Constante diélectrique statique	ε _r (0)	12.55
Indice de réfraction	n	3.4
Coefficient d'absorption (cm ⁻¹)	α	$7 \times 10^3 - 1.4 \times 10^4$
Vitesse thermique des trous, électrons (cm. s ⁻¹)	V _{th}	4.32×10^7 , 1.25×10^7
Densité de porteurs intrinsèques (valeur théorique) (cm ⁻³)	n _i	1.2×10^{8}

The theoretical calculation of cathodoluminescence at room temperature: Application on p type indium phosphide semiconductor (p-InP)

Abstract

The objective of this work is the theoretical study of the intensity of the cathodoluminescence signal I_{CL} of p type indium phosphide semiconductor (p-InP), at room temperature, in order to determine the influence of physical parameters on it; incident electron beam parameters (incident energy E_0 and current intensity I_P), surface parameters (depletion region width Zd, density of surface defects Nt and their associated level Et) and bulk parameters (diffusion length of minority carriers Ln, optical absorption coefficient α , and doping concentration Na).

A theoretical model that allows the calculation of the total intensity of the cathodoluminescence signal as a function of incident electron beam parameters has been carried out. Through this model, we were able to estimate the influence of each of these parameters.

The continuity equation was solved for each of the two types of carriers in the depletion region and the neutral region, using the self-consistent calculation method to determine the width of the depletion region and the concentration of excess carriers at the semiconductor surface.

The results of theoretical calculations have shown that the intensity of cathodoluminescence depends strongly on the surface parameters in the low-energy domain of the incident electron beam, while the bulk parameters have a much greater influence at high energies. In addition, these results showed a linear dependence between I_{CL} and I_{P} .

Keywords: Cathodoluminescence, InP, Depletion region, Self-consistent calculation, Surface defects, Electron-hole pairs.

الحساب النظري للتألق المهبطي عند درجة حرارة الغرفة: تطبيق على نصف الناقل فوسفيد الأنديوم من النوع الموجب(p-InP)

ملخص

p الهدف من إعداد هذه المذكرة هو الحساب النظري لشدة إشارة التألق المهبطي في نصف الناقل فوسفيد الأنديوم من النوع p (p-InP) عند درجة حرارة الغرفة ، و ذلك من أجل تحديد تأثير مختلف المعاملات الفيزيائية عليها ، معاملات الحزمة الإلكترونية الواردة (الطاقة الواردة E_0 و شدة التيار الوارد I_P) معاملات السطح (كثافة العيوب السطحية المعاملات الطاقة الواردة E_0 و شدة التيار الوارد I_P) معاملات السطح (كثافة العيوب السطحية المعاملات الطاقة الواردة E_0 و شدة التيار الوارد I_P) معاملات السطح (كثافة العيوب السطحية N_t معاملات الطاقة الواردة (الطاقة الواردة E_0 و شدة التيار الوارد الوارد I_P) معاملات السطح (كثافة العيوب السطحية N_t و شدة التيار الوارد و الطاقة العرونية الواردة (الطاقة الواردة E_0 و شدة التيار الوارد معاملات الصطح (كثافة العيوب السطحية N_t و شدة التيار الوارد و معاملات الصطح (كثافة العيوب السطحية I_n) معاملات الطاقة الواردة (الطاقة الواردة I_p) معاملات السطح (كثافة العيوب السطحية N_t) معاملات الطاقة المرافقة لها و عرض المنطقة الناضبة I_n و معاملات الحجم (طول انتشار الحاملات الأقلية I_n) معاملات الصوئي عليها و تركيز التطعيم عليها.

بناءا على ذلك قمنا بإنجاز أنموذج نظري يسمح بحساب الشدة الكلية لإشارة التألق المهبطي بدلالة معاملات الحزمة الإلكترونية الواردة. تمكنا باستخدام هذا النموذج من تقدير مدى تأثير هذه المعاملات الفيزيائية لقد تم حل معادلة الاستمر ارية لكلا النوعين من حاملات الشحنة في المنطقة الناضبة وكذا المحايدة ، وذلك باستعمال طريقة الحساب الذاتي التي سمحت لنا بتحديد عرض المنطقة الناضبة و تركيز الحاملات الزائدة على سطح نصف الناقل.

بينت نتائج الحسابات النظرية أن شدة إشارة التألق المهبطي نتأثر أكبر بالمعاملات السطحية عند الطاقات المنخفضة لحزمة الإلكترونات الواردة، بينما يظهر التأثير الكبير للمعاملات الحجمية على هذه الشدة عند الطاقات الواردة المرتفعة إضافة إلى ذلك بينت النتائج وجود علاقة خطية بين I_{CL} و I_P.

كلمات مفتاحية : التألق ألمهبطي، InP، المنطقة الناضبة، حساب ذاتي، العيوب السطحية، أزواج إلكترون- ثقب.

<u>Résumé</u>

L'objectif de ce mémoire est l'étude théorique de l'intensité du signal de cathodoluminescence I_{CL} dans le semiconducteur de phosphure d'indium de type p (p-InP), à température ambiante, afin de déterminer l'influence des paramètres physiques sur celle-ci; paramètres du faisceau d'électrons incidents (énergie incidente E_0 et intensité du courant I_P), paramètres de surface (largeur de la zone de déplétion Z_d , densité des défauts de surface N_t et leur niveau associé E_t) et paramètres de volume (longueur de diffusion des porteurs minoritaires L_n , coefficient d'absorption optique α , et la concentration de dopage N_a).

Un modèle théorique qui permet le calcul de l'intensité totale du signal de cathodoluminescence en fonction des paramètres du faisceau d'électrons incidents a été réalisé. Nous avons pu, grâce à ce modèle, estimer l'influence de chacun de ces paramètres.

L'équation de continuité a été résolue pour chacun des deux types de porteurs dans la zone de déplétion et la zone neutre, en utilisant la méthode de calcul self-consistent pour déterminer la largeur de la zone de déplétion et la concentration de porteurs en excès à la surface du semiconducteur.

Les résultats des calculs théoriques ont montré que l'intensité de la cathodoluminescence dépend fortement aux paramètres de surface dans le domaine des basses énergies du faisceau d'électrons incidents, alors que les paramètres de volume ont une influence beaucoup plus importante pour les hautes énergies. De plus, ces résultats ont montré une dépendance linéaire entre I_{CL} et I_{P} .

Mots Clés: Cathodoluminescence, InP, Zone de déplétion, Calcul self-consistent, Défauts de surface, Paires électron-trou.