

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Jijel
Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique
Département de Physique

Thèse
Présentée par

Abderrezak LAHRECHE

pour l'obtention du diplôme de

Doctorat en sciences
Spécialité : **Sciences des Matériaux**
Option : **Semiconducteurs**



Thème

**« Modélisation du signal EBIC et du signal
Cathodoluminescence : Application à l'étude
des défauts dans les semiconducteurs »**

Soutenu le 20 /03 /2014, devant le jury :

Président	Noureddine BRIHI	Professeur	Université de Jijel
Rapporteur	Yamina BEGGAH	Professeur	Université de Jijel
Examineur	Amor DJEMEL	Professeur	Université de Constantine
Examineur	Djemel-Eddine MEKKI	Professeur	Université de Annaba
Examineur	Khiredine NOUCER	Professeur	Université de Jijel
Examineur	Azeddine CHELOUCHE	MCA	Université de Béjaïa

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Jijel
Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique
Département de Physique

Thèse
Présentée par

Abderrezak LAHRECHE



pour l'obtention du diplôme de

Doctorat en sciences
Spécialité : **Sciences des Matériaux**
Option : **Semiconducteurs**

Thème

**« Modélisation du signal EBIC et du signal
Cathodoluminescence : Application à l'étude
des défauts dans les semiconducteurs »**

Soutenue le 20 /03 /2014, devant le jury :

Président	Noureddine BRIHI	Professeur	Université de Jijel
Rapporteur	Yamina BEGGAH	Professeur	Université de Jijel
Examineur	Amor DJEMEL	Professeur	Université de Constantine
Examineur	Djemel-Eddine MEKKI	Professeur	Université de Annaba
Examineur	Khiredine NOUCER	Professeur	Université de Jijel
Examineur	Azeddine CHELOUCHE	MCA	Université de Béjaïa

Remerciements

Le présent travail est réalisé au département de physique de l'Université de Jijel, sous la direction du professeur Beggah-Benkinouar Yamina.

Je tiens à lui adresser toute ma gratitude et ma reconnaissance à Madame Beggah-benkinouar Yamina, Professeur à l'université de Jijel, d'avoir accepté de m'encadrer et de me guider durant tout ce long chemin. Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude pour tous les conseils qui m'ont apportés,

Je remercie Monsieur Noureddine Brihi, professeur à l'université de Jijel d'avoir accepté de juger le travail et de présider le jury de cette thèse.

Mes remerciements vont à Monsieur Khireddine Nuicer, Professeur à l'université de Jijel, d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Que le professeur Amor Djemel de l'Université Mentouri Constantine, trouve mes expressions de mes vifs remerciements d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Je tiens, à remercier également Monsieur Djamel-Eddine Mekki, professeur à l'Université d'Annaba, d'avoir accepté d'examiner mon travail. Je lui exprime ma gratitude pour ces conseils et son aide qu'il m'a apportés tout au début de cette thèse, qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je voudrais remercier aussi Monsieur Azeddine Chelouche, Maître de conférences à l'Université de Bejaia, pour ses conseils et son aide précieuse et d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Je tiens à remercier tout particulièrement, Monsieur René-Jean Tarento chercheur au Laboratoire de Physique du Solide à Paris-sud 11, pour tout l'intérêt qu'il a porté à ce travail et pour sa grande contribution à cette thèse.

Enfin, je ne peux conclure sans oublier d'exprimer ma grande gratitude à toute ma famille, pour l'encouragement et le soutien moral et matériel, et à tous ceux qui m'ont aidés dans ce travail.

TABLE DES MATIERES

Abréviations/Acronymes	i
Liste des Figures	v
Liste des Tableaux	viii
Introduction général	1
Chapitre 1	Interaction électron matière
1.1 Introduction.....	3
1.2 Interaction électron matière	3
1.2.1 Parcours électronique.....	4
1.2.2 Fonction de dissipation d'énergie.....	6
1.2.3 Energie de formation de paires.....	8
1.2.4 Fonction de génération.....	9
1.3 Description de la technique EBIC	14
1.3.1 La technique EBIC.....	14
1.3.2 Les différentes géométries de la technique EBIC.....	15
1.3.2.1 Excitation parallèle.....	15
1.3.2.2 Excitation perpendiculaire.....	16
1.3.3 Applications de la technique EBIC.....	16
1.3.4 Détermination de la longueur de diffusion.....	17
1.3.4 .1 Cas de la jonction parallèle au faisceau électronique.....	17
1.3.4 .2 Cas de la jonction perpendiculaire sur le faisceau électronique.....	18
1.4 Description de la technique cathodoluminescence (CL).....	18
1.4.1 Principe et applications.....	19
1.5 Modélisation du signal EBIC et CL.....	20
1.5.1 Modèle Wu et Wittery (EBIC).....	22
1.5.2 Modèle Tabet et Tarento (EBIC).....	25
1.5.3 Modèle de Donolato (EBIC)	29
1.5.4 Modèle de cathodoluminescence (CL).....	32
1.5.5 Contraste EBIC d'un défaut quelconque.....	33
1.5.6 Contraste EBIC d'un défaut ponctuel.....	36
1.5.7 Contrat EBIC de dislocation perpendiculaire à la surface.....	37
1.5.8 Contraste EBIC de Joints de grain.....	38

1.5.8.1	Modèle de Marek.....	38
1.5.8.2	Modèle de Donolato	40
1.6	Conclusion.....	44
Chapitre 2 Modélisation du signal EBIC et CL Effet des		
fonctions de génération et des parcours électroniques		
2.1	Introduction.....	45
2.2	Effet des fonctions de génération et les parcours électroniques sur les courbes de l'efficacité de collecte.....	45
2.2.1	Modèle de Wu et Wittry.....	46
2.2.2	Modèle de Tabet et Tronto.....	48
2.3	Détermination des parcours phénoménologiques.....	50
2.4	Configuration parallèle.....	54
2.4.1	Model étudié.....	54
2.4.2	Effet des fonctions de générations.....	56
2.4.3	Effet de l'énergie d'excitation	57
2.4.4	Extraction des parcours.....	60
2.5	Cathodoluminescence.....	64
2.5.1	Introduction.....	64
2.5.2	Modèle étudié.....	65
2.5.3	Effet de la longueur de diffusion.....	67
2.5.4	Effet de la vitesse de recombinaison.....	67
2.5.5	Effet du coefficient d'absorption.....	68
2.5.6	Effet des fonctions de générations.....	69
2.5.7	Effet des parcours électronique.....	71
2.5.7.1	Effet du coefficient de diffusion.....	72
2.5.7.2	Effet de la longueur de diffusion.....	72
2.6	Contraste de Défaut ponctuel.....	73
2.7	Contraste EBIC de la dislocation.....	75
2.8	Contraste joint de grain.....	76
2.9	Conclusion.....	77
Chapitre 3 Modélisation du signal CL d'un fil semiconducteur		
1.1	Introduction.....	79
3.2	Modèle proposé.....	79

3.2.1 Choix du volume de génération.....	80
3.2.2 Vitesse de recombinaison surfacique infinie.....	82
3.2.3 Vitesse de recombinaison de la surfacique considérée.....	88
3.3 Effet de la longueur de diffusion.....	90
3.4 Effet de la vitesse de recombinaison de la surface libre.....	91
3.5 Effet du coefficient d'absorption.....	91
3.6 Effet de la longueur du fil.....	92
3.7 Effet de la vitesse de recombinaison latérale.....	93
3.8 Effet du rayon du cylindre.....	94
3.9 Conclusion.....	96
Chapitre 4 Modélisation du signal EBIC de deux joints de grain	
Proche	
4.1 Introduction.....	97
4.2 Modèle proposé.....	98
4.3 Solution du problème et résultats.....	99
4.3.1 Cas de la fonction de génération ponctuelle.....	99
4.3.2 Résultats.....	102
4.3.2.1 Effet de la vitesse de recombinaison.....	102
4.3.2.2 Effet de la longueur de diffusion du matériau.....	103
4.3.2.3 Effet de la distance d entre les deux joints.....	104
4.4.1 Cas de la fonction de génération constante avec un volume cubique.....	106
4.4.2 Résultats.....	110
4.4.2.1 Effet de la vitesse de recombinaison.....	110
4.4.2.2 Effet de la longueur de diffusion.....	112
4.4.2.3 Effet de la distance d entre les deux joints de grain.....	113
4.5 Détermination de la position des deux joints de grains.....	115
4.6 Conclusion.....	119
Conclusion générale.....	120
ANXEX1.....	123
ANNEX2.....	125
Référence.....	127
Liste de publications.....	131

Abréviations/Acronymes

A : La masse atomique du matériau.

A_s : L'air du profil du contraste du joint de grain.

a : Profondeur du défaut.

$a_1 = 1,1658$.

C(x,R) : Contrat d'un défaut ponctuel.

$c^*(z)$: Maximum de contraste du défaut ponctuel.

c(x)(c(x,R)): Contraste de joint de grain (dislocation).

c_{max} : Maximum du contraste de joint de grain (dislocation).

CL : Cathodoluminescence

D_n : Coefficient de diffusion des électrons.

D_p : Coefficient de diffusion des trous.

d: distance entre deux joints de grain.

d_e : Diamètre du faisceau électronique.

h: Longueur du fil.

EBIC: Courant induit par faisceau électronique (Electron Beam Induced current)

E(z): Champ électrique.

E_a : Energie absorbée.

E_B : Energie des électrons rétrodiffusés.

E_T : Energie transmise.

e: Charge de l'électrons ($1.9 \cdot 10^{-19}$ Col).

E_0 : Energie des électrons de bombardement.

E_B : Energie des électrons rétrodiffusés.

E_{eh} : Energie de génération d'une paires électron-trous.

E_g : Energie du gap.

$\langle E_K \rangle$: Energie cinétique résiduelle.

$\langle E_R \rangle$: Energie moyenne associée à la génération de photon-optiques.

f: Fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion.

G(x, x', z, z'): Fonction de green.

$g(\mathbf{r},z)$: Fonction de génération.

G_0 (s^{-1}): Nombre de paires créées par unité de temps dans le solide irradié.

g_{con} : Fonction de génération constante.

g_G : Fonction de génération gaussienne.

g_p : Fonction de génération ponctuelle.

g_{py} : Fonction de génération polynomiale.

g_c : Fonction de génération constante avec un volume cubique.

g_s : Fonction de génération constante avec un volume sphérique.

I_p : Courant électrique des électrons primaires.

$I(x)$: Courant EBIC calculé à une distance x de la jonction de collecte.

I_{CL} : Signal Cathodoluminescence

I_N^G : Courant EBIC normalisé en considérant la fonction de génération gaussienne.

$I_N^S(I_N^C)$: Courant EBIC normalisé en considérant la fonction de génération constante.

I_N^P : Courant EBIC normalisé en considérant la fonction de génération ponctuelle.

J : Potentiel moyen d'excitation (keV).

J_b : Densité de courant des porteurs générés dans le volume du semiconducteur obtenus dans le cadre du modèle Wu et Wittry.

J_d : Densité du courant des porteurs générés dans la zone de charge d'espace obtenus dans le cadre du modèle Wu et Wittry.

J_p : Densité du courant des trous générés dans la zone de charge d'espace obtenus dans le cadre du modèle Tabet et Toronto.

J_n : Densité du courant des électrons générés dans la zone de charge d'espace obtenus dans le cadre du modèle Tabet et Toronto.

L : Longueur de diffusion.

l : Coté du cube.

Modèle WW: Modèle Wu et Wittry.

Modèle TT: Modèle Tabet et Toronto.

N_A : Nombre d'Avogadro.

Q : Nombre de paires créés par les électrons incident.

q : Charge élémentaire.

R : Profondeur de pénétration des électrons de bombardement « le parcours électronique ».

r: Taux de recombinaison.
r_a: Rayon du fil.
R_{EH}: Parcours électronique Everhart et Hoff.
R_K: Parcours électronique Kyser.
R_{KO}: Parcours électronique Kanaya et Okayana.
R_{phc}(R_{con}): Parcours électronique phénoménologique de fonction de génération constante.
R_{sph}: Rayon de la sphère.
R_{php}: Parcours électronique phénoménologique de fonction de génération ponctuelle.
R_S: Parcours électronique phénoménologique de fonction de génération constante dans un volume de génération sphérique.
R_C: Parcours électronique phénoménologique de fonction de génération constante dans un volume de génération cubique.
S: Vitesse de recombinaison réduite.
v_p: Vitesse de collecte des trous.
v_n: Vitesse de collecte des électrons.
v_T: Vitesse de recombinaison des porteurs de charges.
v_s: Vitesse de recombinaison des porteurs au joint de grain.
v_{s1(2)}: Vitesse de recombinaison sur le premier (deuxième) joint de grain.
v_z: Vitesse de combinaison à la surface libre du fil.
v_r: Vitesse de combinaison à la surface latéral du fil.
w: Portée réduite de l'électron.
Z: Numéro atomique.
z: Profondeur.
z_d: Epaisseur de la couche de déplétion.
z_m: Epaisseur du métal.
ρ: Masse volumique.
φ(z/R): Fonction de dissipation de l'énergie.
η: efficacité de collecte.
η_I: Rendement quantique.
η_B: Fractions des électrons rétrodiffusés.

η_T : Fraction des électrons transmis.

$u=z/R$: Profondeur réduite.

$\lambda(u)$: Fonction de dissipation de l'énergie proposée par Everhart et Hoff.

Δp : Densité des trous en excès.

Δn : Densité des électrons en excès.

α : Coefficient d'absorption de la lumière.

τ : Temps de vie des porteurs de charge.

γ : Force du défaut.

ε : Rayon de la dislocation.

Liste des Figures

Figure 1.1: Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie de bombardement. R_K Parcours proposé par Kyser, R_{EH} parcours proposé par Everhat et Hoff et R_{KO} parcours proposé par Kanaya et Okayama.....	6
Figure 1.2: Variation de l'énergie de création de paires électrons-trous en fonction de gap pour différents semiconducteurs et différentes sources d'énergies (d'après Klein [10])......	9
Figure 1. 3: Distribution des électrons primaires dans le volume du semiconducteur (Si et GaAs) pour $E_0 = 10$ keV et $E_0 = 30$ keV.....	13
Figure 1.4: schémas illustrative de processus de création de paires électrons trous.....	14
Figure 1.5: (a) Schéma illustrant la génération et la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semiconducteur. (b) Schéma du circuit équivalent de la mesure EBIC. R_{Se} est la résistance série. R_D est la résistance de la jonction de collecte du courant EBIC. I_m et I_{EBIC} sont respectivement les signaux du courant EBIC mesuré et idéal	15
Figure 1.6: Jonction p-n parallèle au faisceau incident I_p (a), Jonction p-n perpendiculaire au faisceau incident(b), faisceau parallèle à une diode Schottky (c), faisceau perpendiculaire à une diode Schottky (d) [18].....	16
Figure.1.7: Présentation schématique d'appareillage CL.....	19
Figure 1.8: Le schéma du partage de l'échantillon selon le modèle de WW.....	23
Figure 1.9: Schémas utilisé par Donolato.....	30
Figure 1.10: Schéma utilisé pour le calcul CL, (a) cas d'un semiconducteur semi-infini (b) cas de couche mince.....	32
Figure 1.11: Schéma utilisé pour le calcul du contraste d'un défaut quelconque.....	34
Figure 1.12: Schéma utilisé pour le calcul du contraste d'un défaut ponctuel.....	36
Figure 1.13: Schéma illustratif utilisé par Marek.....	39
Figure 2.1: Efficacité de collecte calculée par g_G-R_K , $g_{py}-R_{EH}$, g_G-R_{EH} et $g_{py}-R_K$ pour une diode de GaAs avec $z_m = 250$ A et $z_d = 0.23$ μm	47
Figure 2.2: Effet des fonctions de génération sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250$ A et $z_d = 0.23$ μm . (a) fonction de génération constante et (b) fonction de génération ponctuelle.....	47
Figure 2.3: Effet des fonctions de génération sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250$ A et $z_d = 0.23$ μm . (a) fonction de génération constante et (b) fonction de génération ponctuelle.....	48
Figure 2.4: Effet des fonctions de génération et des parcours électroniques sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250$ A et $z_d = 0.23$ μm . (a), (b) fonction de génération constante et (c), (d) fonction de génération ponctuelle.....	49
Figure 2.5: Effet du parcours phénoménologique sur les courbes de l'efficacité de collecte pour une diode de (a) GaAs et (b) Ge, avec $z_m = 250$ A et $z_d = 0.23$ μm	51

Figure 2.6: Effet des parcours phénoménologiques sur les courbes de l'efficacité de collecte.....	51
Figure 2.7: Effet de la longueur de diffusion sur les efficacités de collectes pour le cas des diodes Ge, GaAs et Si. (1) $L=0.2\mu\text{m}$, (2) $L=0.4\mu\text{m}$, (3) $L=0.8\mu\text{m}$, (4) $L=2\mu\text{m}$, (5) $L=6\mu\text{m}$, (6) $L=12\mu\text{m}$. Lignes continues présentent l'efficacité calculée par g_G-R_K et lignes discontinues présentent efficacité de collecte calculée par $g_{\text{con}}-R_{\text{phc}}$	51
Figure 2. 8: Fit des point expérimentaux pour différents semiconducteurs (a) Modèle WW, (b) et (c) Modèle TT. Ligne continue présente l'efficacité de collecte calculée par g_G-R_K et ligne discontinu présente l'efficacité de collecte calculée par $g_{\text{con}}-R_{\text{phc}}$	53
Figure 2.9: Le schéma utilisé.....	54
Figure 2.10: Variation du signal EBIC en fonction de la distance calculé par différentes formes de générations en utilisant le parcours électronique (a) Everhart et Hoff électron, (b) Kyser pour un échantillon de GaAs avec $L = 3 \mu\text{m}$. Séries (1) pour $E_0 = 10 \text{ keV}$ and (2) pour $E_0 = 20 \text{ keV}$	56
Figure 2.11: Variation du signal EBIC en fonction de l'énergie d'excitation calculé par différentes fonctions de génération (a) R_{EH} , and (b) R_K	58
Figure 2.12: Organigramme d'extraction des parcours électroniques. I_N^G et I_N^S le courant EBIC calculé par g_G et g_S respectivement; R_K parcours de Kyser and R_S parcours extrait; E_0 l'énergie des électrons primaires et E_{max} la valeur maximale de E_0	60
Figure 2.13: Variation du signal EBIC calculé avec différentes fonctions de génération et différentes valeurs de la vitesse de recombinaison (a) parcours Kyser (b) chaque fonction de génération avec son propre parcours.....	61
Figure 2.14: Variation du signal EBIC calculé avec différentes fonctions de génération et différentes valeurs de longueur de diffusion (a) parcours Kyser (b) chaque fonction de génération avec son propre parcours.....	62
Figure 2.15: Variation du courant EBIC calculé par différentes fonctions de génération en fonction de l'énergie d'excitation avec $x=8\mu\text{m}$ pour GaAs et GaN, $x=10\mu\text{m}$ pour Si.....	63
Figure 2.16: Exemple de fit des points expérimentaux pour le silicium [68] et GaP [69].....	64
Figure 2.17 Effet de la longueur de diffusion sur le signal CL.....	67
Figure 2.18: Effet de la vitesse de recombinaison sur le signal CL.....	68
Figure 2. 19: Effet du coefficient d'absorption sur le signal CL.....	68
Figure 2. 20: Effet des fonctions de génération sur le signal CL pour différentes valeurs de α	70
Figure 2.21: Effet du coefficient d'absorption sur le signal CL après l'utilisation des parcours électroniques extraits.....	72
Figure 2. 22: Effet de la longueur de diffusion sur le signal CL après l'utilisation des parcours électroniques extraits.....	73
Figure 2.23: Variation du maximum de contraste en fonction de l'énergie d'excitation calculé par la même fonction de génération et différents parcours électronique.....	74
Figure 2.24: Variation du maximum de contraste en fonction de l'énergie d'excitation calculé pour avoir le même maximum, la profondeur $a=2\mu\text{m}$ pour le cas de (g_C-R_{phc}) , $a=2.7\mu\text{m}$ pour le cas de (g_C-R_K)	74
Figure 2.25: Exemple d'un fit des points expérimentaux.....	75

Figure 2.26: Variation du contraste EBIC d'une dislocation en fonction de l'énergie d'excitation pour différentes valeurs de L	76
Figure 2.27: Variation du contraste de joint de grain calculé par différentes g et différentes R en fonction de la distance de scanne.....	77
Figure 3.1: Schémas du modèle proposé.....	80
Figure 3.2: Schémas du volume de génération pour le cas (a) $R < r_a$, (b) $R = r_a$ et (c) $R > r_a$	81
Figure 3.3: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion.....	90
Figure 3.4: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion.....	91
Figure 3.5: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de α . (a) pour les faibles valeurs de α , (b) pour les grandes valeurs de α	92
Figure 3.6: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de h	93
Figure 3.7: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de v_r	94
Figure 3.8: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de r_a	95
Figure 4.1: La géométrie du modèle.....	98
Figure 4.2: Variation de I_N en fonction de x_1 pour différentes valeurs de la vitesse de recombinaison du premier joint de grain.....	103
Figure 4.3: Variation de I_N en fonction de x_1 pour différentes valeurs de L . (a) $d = 0.1 \mu\text{m}$, (b) $d = 0.3 \mu\text{m}$	104
Figure 4.4: Variation de I_N en fonction x_1 pour différentes valeurs de d	105
Figure 4.5: Variation du profil EBIC en fonction de la distance entre les deux GBs pour différentes valeurs de la vitesse de recombinaison surfacique. (a) $d/R = 0.5$, (b) $d/R = 1$ et (c) $d/R = 2$	111
Figure 4.6: Variation du profil EBIC en fonction la distance entre les deux GBs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion. (a) $d = 0.3 \mu\text{m}$ et (b) $d = 1 \mu\text{m}$	112
Figure 4.7: Variation du profil EBIC en fonction de la distance de scan pour différentes valeurs de la distance entre les deux joints de grain d	114
Figure 4.8 Variation du profil EBIC et son deuxième dérivé vs la distance de scann x_j pour $d < R$	116
Figure 4.9 Variation du profil EBIC et son deuxième dérivée en fonction de la distance de scann x_j pour $d = 2R$ respectivement.....	117
Figure 4.10: Variation du profil EBIC et son deuxième dérivé en fonction de la distance de scannage x_j pour deux GBs le premier avec petite valeur de v_s et le deuxième avec grande valeur de v_s pour le cas $d < R$	118

Liste des Tableaux

Tableau 1.1: Valeurs moyennes du coefficient de rétrodiffusion η_B d'après Fitting et al [7].....	7
Tableau 2.1: Longueur de diffusion nécessaire pour que les courbes EBIC calculées avec différentes fonctions de génération et parcours électroniques se coïncident.....	49
Tableau 2.2: Vitesse de combinaison nécessaire pour les courbes EBIC calculées avec différentes fonctions de génération connectées avec parcours électronique de Kyzer se coïncident.....	59

Introduction générale

Introduction Générale

La détermination des propriétés électroniques des semiconducteurs est primordiale pour la conception des dispositifs électroniques. Les techniques de caractérisation locales basées sur l'injection des porteurs de charge par une excitation électronique (Courant Induit par Bombardement Electronique EBIC (Electron Beam Induced Current) et Cathodoluminescence (CL) ou optique (Photoluminescence (PL)) sont des outils précieux pour la détermination des paramètres électroniques intrinsèques des semiconducteurs. Les paramètres en question sont notamment la longueur de diffusion, la vitesse de recombinaison et le coefficient d'absorption. Ces techniques sont aussi importantes pour l'étude des activités électriques et optiques des défauts présents dans la matrice.

La focalisation d'un faisceau électronique (optique) d'une énergie de quelques électrons-volt sur un semiconducteur provoque la génération des paires électrons-trous dans une région d'espace appelée le volume de génération. La distribution des électrons dans ce volume est exprimée par la fonction génération. Cependant, le volume de génération est déterminé par le parcours électronique. Il représente le maximum de pénétration des électrons de bombardement dans le volume du semiconducteur. La diffusion et la recombinaison des paires électrons-trous générées donnent naissance aux signaux EBIC et CL. Le premier signal résulte de la séparation des électrons par la jonction p-n ou contact Schottky. Le deuxième signal provient de la recombinaison radiative des électrons avec les trous.

La modélisation du signal EBIC (CL) d'un semiconducteur avec ou sans défaut a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche pendant plusieurs années. Elle est basée sur la diffusion et la recombinaison des paires électron-trou générées dans le volume du semiconducteur. La diffusion des porteurs minoritaires est obtenue par la résolution de l'équation de continuité soumise à des conditions aux limites appropriées. En effet, la résolution mathématique de cette équation est difficile, en particulier lors de la prise en considération des défauts. Des hypothèses simplificatrices sont souvent imposées, e.g. le choix de la fonction ponctuelle ou constante, avec un volume de génération en forme de sphère ou d'un cube. Ces deux fonctions de génération n'ont pas de parcours électronique appropriés, tel que, la fonction de génération polynomiale ou gaussienne. Donc, elles sont souvent utilisées avec des parcours électronique adoptés pour d'autres fonctions de génération. Ceci a conduit à une diversité dans les valeurs des résultats obtenus par différents modèles basés sur ces deux fonctions de génération. Par conséquent, il est nécessaire de trouver des parcours électroniques adoptés pour ces deux simples formes de génération.

Par ailleurs, la miniaturisation des composants électroniques a atteint l'ordre du nanomètre. Ceci, a imposé l'élaboration des semiconducteurs à petite taille. Les modèles mathématiques décrivant le signal EBIC (CL), existant dans la littérature, sont adoptés aux semiconducteurs massifs. Par conséquent, ils ne sont pas adoptés aux semiconducteurs de très petite taille. Donc, il est nécessaire d'élaborer des modèles mathématique pour décrire le signal EBIC (CL) des ces semiconducteurs.

Dans ce travail, nous voulons atteindre deux objectifs :

- 1- La détermination des parcours électroniques à utiliser pour chaque type de fonction de génération ainsi que leurs effets sur le contraste EBIC des défauts.
- 2- La modélisation des signaux EBIC et CL des semiconducteurs à taille miniaturisée.

Cette thèse est composée d'une introduction générale, de quatre chapitres et d'une conclusion générale.

Le premier chapitre est consacré aux rappels théoriques des interactions électron-semiconducteur. Les modèles des parcours électroniques, la dissipation de l'énergie des électrons primaires et les fonctions de génération seront cités. De plus, un exposé sur les différentes configurations des techniques EBIC et CL utilisées pour la caractérisation des semiconducteurs sera donné. Ce chapitre se terminera par une description détaillée des modèles théoriques de l'efficacité de collecte EBIC (CL) et de contraste EBIC des défauts.

Le deuxième chapitre est réservé principalement à la mise en évidence de l'effet du choix des fonctions de génération ainsi que des parcours électroniques sur les courbes de l'efficacité de collecte EBIC (CL). Nous avons employé une méthode simple pour la détermination des parcours électronique à utiliser avec les formes simples de génération. Enfin, l'effet des nouveaux parcours électroniques sur le contraste EBIC des défauts dans semiconducteurs est mis en évidence.

Le troisième chapitre porte sur la proposition d'un modèle théorique pour le calcul du signal cathodoluminescence d'un fil semiconducteur micrométrique. L'effet des différents paramètres physiques sur ce signal est mis en évidence.

Le quatrième chapitre est dédié à la modélisation du signal EBIC de deux joints séparant trois petits grains (GB) adjacents. L'effet de la vitesse de recombinaison des GBs ainsi que la distance entre eux sur la forme est l'intensité du signal EBIC sont étudiés. Une attention particulière est réservée à l'effet de l'extension spatiale du volume de génération sur la forme du signal EBIC. Une méthode mathématique pour localiser la position des joints de grains lorsque leur signal EBIC ne le permet pas est proposée.

Chapitre 1

Interaction électron matière

1.1 Introduction

L'interaction électron matière donne naissance à plusieurs processus physiques qui peuvent être exploités lors de la caractérisation physico-chimique de la matière. Ce chapitre sera consacré à une brève description des interactions faisceau électronique-matière. Un accent particulier sera réservé à l'application de ces interactions pour la microscopie électronique à balayage en mode courant induit (EBIC) et en mode cathodoluminescence (CL).

1.2 Interaction électron matière

L'interaction entre les électrons et un matériau donne naissance à une diffusion élastique (collision élastique) et diffusion inélastique (collision inélastique).

1) Les collisions élastiques des électrons incidents avec le noyau atomique provoquent des déviations successives des trajectoires électroniques. Les phénomènes de diffractions résultent essentiellement de la diffusion. En pratique, on appelle électrons rétrodiffusés, tous les électrons incidents qui, par suite de collisions successives, quittent le solide irradié après un certain parcours. Le phénomène de rétrodiffusion est responsable de l'élargissement latéral du faisceau électronique initialement focalisé en une sonde de quelques dizaines d'Angströms de diamètre. Cet élargissement peut atteindre quelques microns et, il est une fonction croissante de l'énergie du faisceau incident et du numéro atomique du matériau. Il constitue une limitation inévitable de la résolution spatiale des techniques basées sur l'excitation par faisceau électronique (EBIC, CL, microanalyse X

2) Les collisions inélastiques caractérisées par la perte d'énergie du faisceau primaire (transférée aux électrons de l'atome) provoquent l'excitation ou l'ionisation de la matière. La désexcitation des atomes ainsi ionisés s'effectue par une émission d'un photon X ou Auger. Au cours des collisions avec les électrons de valence, les transferts d'énergie sont plus faibles. Les électrons ainsi produits constituent l'émission électronique secondaire. Compte tenu de leur faible énergie ($\leq 50\text{keV}$) seuls ceux produits près de la surface la quittent.

L'interaction avec le champ coulombien du matériau provoque un freinage continu des électrons incidents. Cette perte d'énergie cinétique est à l'origine du rayonnement X continu mis à profit dans les tubes de rayon X.

Les collisions élastiques sont responsables de la forme en zigzag des trajectoires des électrons dans le matériau. Cependant, les collisions inélastiques provoquent une dissipation de l'énergie.

1.2. 1 Loi de dissipation de l'énergie et parcours électronique

Les travaux sur la dissipation de l'énergie reviennent à Bethe (1933) [1], où il a exprimé la perte d'énergie par unité de distance parcourue, sous la forme:

$$\frac{dE}{dz} = -2\pi N_A e^4 \frac{Z \cdot \rho}{A} \cdot \frac{1}{E} \cdot \text{Ln}\left(\frac{a_1 E}{J}\right) \quad (1.1)$$

avec, A la masse atomique du matériau (g), ρ la masse volumique (g/cm^3), N_A le nombre d'Avogadro, $a_1 = 1,1658$, J est le potentiel moyen d'excitation. J caractérise l'ensemble des interactions inélastiques. Son expression est donnée par:

$$J(\text{keV}) = 11.5 \cdot Z \cdot 10^{-3} \quad (1.2)$$

Une autre expression a été proposée par Berger et Seltger [2]:

$$J(\text{keV}) = (9.76 Z + 58.5 Z^{1.19}) 10^{-3} \quad (1.3)$$

La loi de la dissipation d'énergie peut être encore exprimée par:

$$\frac{dE}{d(\rho z)} = -2\pi N_A e^4 \left(\frac{Z}{A}\right) \cdot \frac{1}{E} \text{Ln}\left(\frac{aE}{J}\right) \quad (1.4)$$

La distance parcourue par un électron d'une énergie E_0 ramené au repos « la profondeur de pénétration des électrons de bombardement » est exprimée par:

$$R(\text{cm}) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/dZ} \quad (1.5)$$

ou, encore par:

$$\rho R(\text{g/cm}^2) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/d(\rho Z)} \quad (1.6)$$

avec, ρ la masse volumique (g/cm^3).

Dans la littérature, on trouve plusieurs formules mathématiques dédiées pour les parcours électroniques. Nous citons les plus utilisées désignées par leurs auteurs et donnés par les formules suivantes:

- Parcours électronique de Kyser, R_K , [3]

$$\rho R_K (g / m^2) = 2,56 \times 10^{-3} \left(\frac{E_0}{30} \right)^{1,68} \quad (1.7)$$

E_0 l'énergie des électrons primaires exprimée en keV, ρ la masse volumique (g/cm^3).

- Parcours électronique Kanaya et Okayana, R_{KO} , [4]

$$\rho R_{KO} (g / cm^2) = 2,76 \times 10^{-6} \cdot \frac{A}{Z^{8/9}} E_0^{5/3} (keV) \quad (1.8)$$

avec, A la masse atomique, Z le numéro atomique, E_0 l'énergie des électrons primaires exprimée en keV et ρ la masse volumique (g/cm^3).

- Parcours électronique d'Everhart et Hoff, R_{EH} , [5]

$$\rho R_{EH} (g / cm^2) = 4.0 \times 10^{-6} E_0^{1,75} \quad (1.9)$$

ρ la masse volumique (g/cm^3).

Les expressions mathématiques établies pour le parcours électronique ont une forme commune exprimée en fonction de l'énergie du faisceau incident E_0 et de la densité volumique du matériau. Yakobi et al. [6] ont proposé la forme:

$$\rho R (g / cm^3) = C E_0^n \quad (1.10)$$

avec, E_0 l'énergie des électrons incident C et n des constantes.

L'estimation de la profondeur de pénétration des électrons primaires (parcours électronique) dépend de l'expression mathématique utilisée comme il est affirmé par les expressions 1.8 à 1.10. La figure 1.1 présente la variation de la profondeur de pénétration en fonction de l'énergie d'excitation de GaAs. La différence entre la valeur de la profondeur de pénétration calculée par R_{EH} et celle calculée par R_K et R_{KO} augmente avec l'augmentation de l'énergie. Cependant, les valeurs de la profondeur de pénétration calculées par R_K et R_{KO} sont en accord sur toute la gamme d'énergie.

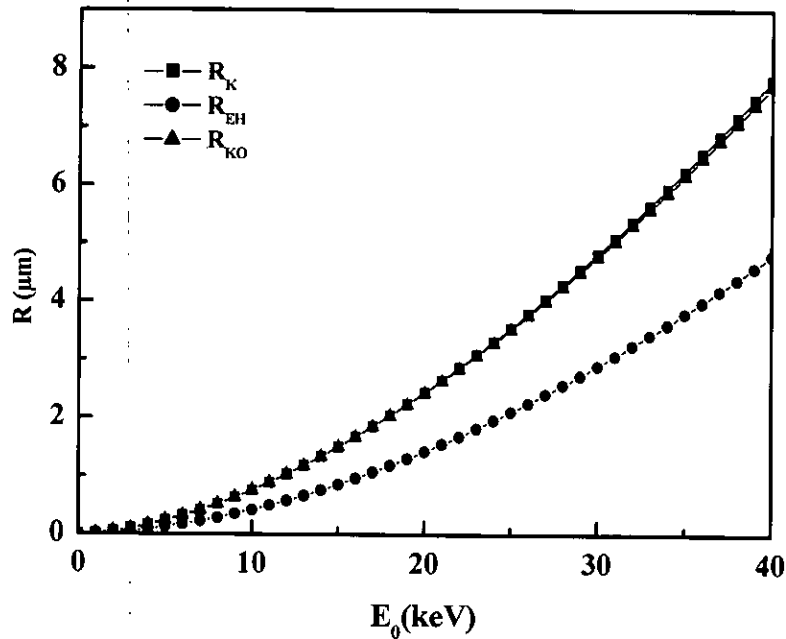


Figure 1.1 Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie de bombardement. R_K Parcours proposé par Kyser, R_{EH} parcours proposé par Everhat et Hoff et R_{KO} parcours proposé par Kanaya et Okayama.

1.2.2 Fonction de dissipation d'énergie

La fonction de dissipation de l'énergie $\phi(\frac{z}{R})$ s'exprime par la relation:

$$\phi(\frac{z}{R}) = \frac{d(E_a/E_0)}{d(z/R)} \tag{1.11}$$

E_a est l'énergie absorbée au bout du parcours normalisé $u=z/R$. Elle s'exprime sous la forme donnée par Kanaya et Okayama [4].

$$E_a = E_0 - \eta_T E_T - \eta_B E_B \tag{1.12}$$

E_B est l'énergie des électrons rétrodiffusés.

η_T et η_B sont les fractions d'électron transmis et rétrodiffusés respectivement. L'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés E_B peut être calculée à partir de l'expression:

$$E_B = (0.45 + 2.10^{-3} Z)E_0 \tag{1.13}$$

Plusieurs autres expressions analytiques de la fonction de dissipation ont été proposées dans la littérature à savoir:

- La fonction de dissipation de l'énergie proposée par Kanaya et Okayama [4]:

$$\phi(u) = (1-u)^{-2/5} \cdot \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5} \right) \exp\left(-\frac{\gamma u}{1-u}\right) + 2.28 \frac{E_B}{E_0} \times \frac{\gamma}{(1-u)^2} \left[2^{-5/6} - (1-u)^{5/6} \right] \exp\left(\frac{-1.9 \cdot \gamma u}{1-u}\right) \quad (1.14)$$

$$\gamma = 0.187 \cdot Z^{2/3} \quad (1.15)$$

Z, le numéro atomique, $u=z/R$.

- La fonction de dissipation de l'énergie proposée par Everhart et Hoff [5]:

$$\lambda(u) = \frac{\frac{dE}{(1-f)} E_0}{du} \quad (1.16)$$

avec,

$$f = \frac{\eta_B E_B}{E_0} \quad (1.17)$$

f est la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion. Le tableau 1.1 regroupe quelques valeurs moyennes de η_B .

Pour des cibles à numéro atomique Z compris entre 10 et 15 les auteurs obtiennent:

$$\lambda(u) = 0,6 + 6,21u - 12,4u + 5,69u^3 \quad (1.18)$$

avec,

$$\phi(u) = (1-f) \lambda(u) \quad (1.19)$$

f la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion.

Tableau 1.1 Valeurs moyennes du coefficient de rétrodiffusion η_B d'après Fitting et al [7].

Elément	Be	C	Al	Si	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Cu	Ge	Ag	Au
η_B	0.06	0.1	0.18			0.32		0.42	0.45	

- La fonction de dissipation de l'énergie proposée par Wu et Wittry [8]:

$$\phi(u) = A' \exp\left(-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right) - B \exp\left(-\frac{bu}{u_0}\right) \quad (1.20)$$

$$\frac{A'}{B} = 0.4, b = 4.0, \Delta u = 0.35, u_0 = 0.125$$

1.2.3 Energie de formation de paires

La création des paires électrons-trous est l'un des processus inélastiques accompagnant la pénétration des électrons dans un semiconducteur. L'énergie de formation d'une paire électron-trou est donnée par la relation:

$$Q = \frac{E_A}{E_{eh}} \quad (1.21)$$

Q étant le nombre de paires créés par les électrons incident et E_A est l'énergie absorbée dans le semiconducteur. Selon Klein [9] E_{eh} peut être exprimée par:

$$E_{eh} = E_g + \langle E_R \rangle + \langle E_K \rangle \quad (1.22)$$

$\langle E_R \rangle$ est l'énergie moyenne associée à la génération de photon-optiques, $\langle E_K \rangle$ est l'énergie cinétique résiduelle dissipée au cours du processus de thermalisation des porteurs générés. L'énergie $\langle E_R \rangle$ s'écrit sous la forme:

$$\langle E_R \rangle = r \hbar \omega \quad (1.23)$$

Pour $\langle E_K \rangle$, Klein [10] propose la relation:

$$\langle E_K \rangle = \frac{9}{5} E_g \quad (1.24)$$

donc,

$$E_{eh} = \frac{14}{5} E_g + r \hbar \omega \quad (1.25)$$

La figure 1.2 montre la dépendance de E_{eh} en fonction de l'énergie du gap. Les valeurs expérimentales sont bien ajustées à l'aide de l'expression 1.22 ($r\hbar\omega$ utilisé comme paramètre d'ajustement est quasi constant $0,5 \text{ eV} \leq r\hbar\omega \leq 1 \text{ eV}$).

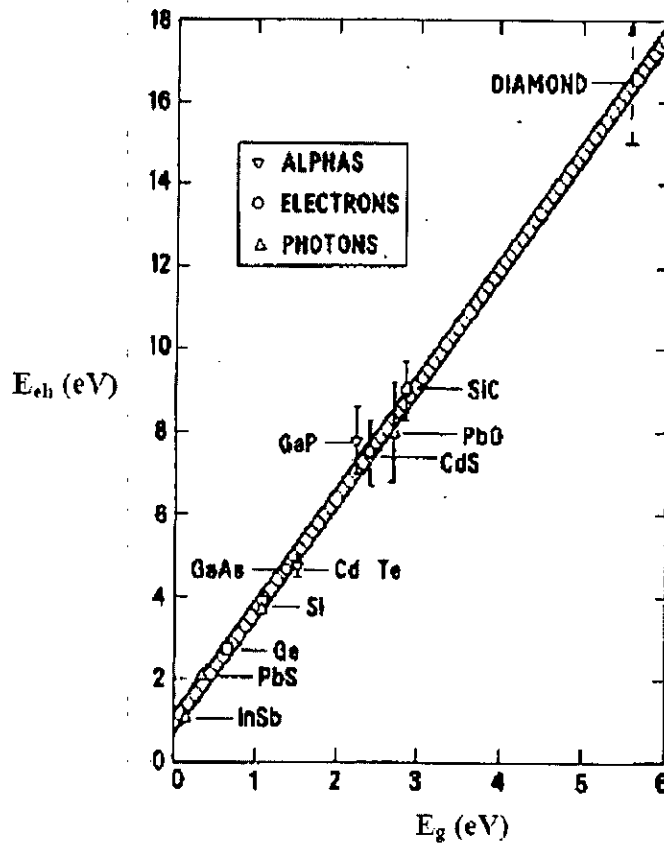


Figure 1.2 Variation de l'énergie de création de paires électrons-trous en fonction de gap pour différents semiconducteurs et différentes sources d'énergies (d'après Klein [10]).

L'énergie de création de paires électrons-trous augmente avec l'augmentation du gap. Les valeurs concernant cette énergie, données dans la littérature, présentent une dispersion. A titre d'exemple, à $T=300 \text{ °K}$, Klein [9,10] propose la valeur $E_{eh}=2.80 \text{ eV}$ pour le germanium et, la valeur $E_{eh}= 3.6 \text{ eV}$ pour le silicium tandis que Zulliger [11] propose des valeurs de E_{eh} comprises entre 2.38 eV et 2.81 eV pour le germanium et entre 3.26 eV et 3.85 eV pour le silicium.

1.2.4 Fonction de génération

Le bombardement d'un semiconducteur par un faisceau électronique provoque la génération des paires électrons-trous dans une région d'espace appelée le volume de génération. La distribution de ces paires dans ce volume est définie par une fonction $g(\vec{r}, R)$. Elle correspond au nombre de paires électrons-trous créés par unité de volume et de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)

dans un point \vec{r} (x,y,z). R est le parcours électronique. Il relève la dépendance de la distribution des paires électron-trou générées en fonction de l'énergie des électrons incidents.

Dans certains cas, un semiconducteur semi-infini par exemple, on n'a pas besoin de connaître la forme explicite de $g(r, z)$ mais seulement sa projection $g(z)$ sur un plan (xy par exemple) donc:

$$g(z) = \int_0^{\infty} G(r, z) 2\pi r dr \quad (1.26)$$

$g(z)$ correspond au nombre de paires créées par unité de profondeur et unité de temps ($\text{cm}^{-1}\text{s}^{-1}$) à la distance z de la surface bombardée. Elle s'exprime par:

$$g(z) = \frac{I_p}{qE_{\text{ch}}} \frac{dE_A}{dz} \quad (1.27)$$

I_p : intensité du courant du faisceau incident, q la charge élémentaire, E_A l'énergie absorbée. Compte tenu de 1.11 on obtient:

$$g(z) = \frac{I_p E_0}{qE_{\text{ch}} R} \phi(z/R) \quad (1.28)$$

On définit le taux de génération total G_0 (s^{-1}) correspondant au nombre de paires créées par unité de temps dans le solide irradié.

$$G_0 = \int_0^{\infty} g(z) dz \quad (1.29)$$

Sa forme explicite est:

$$G_0 = \frac{I_p (1-f)}{q E_{\text{ch}}} E_0 \quad (1.30)$$

La connaissance de la distribution latérale des paires électrons-trous créés dans le volume de génération est souvent nécessaire pour analyser le signal EBIC (CL) en présence de défauts.

Donolato propose une expression $g(r,z,R)$ due à Possin pour analyser le contraste EBIC associé aux dislocations [12]:

$$g(r, Z, R) = \frac{A(z, R)}{2\pi\sigma^2(z, R)} \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma^2(z, R)}\right) \quad (1.31)$$

avec,

$$\sigma^2 = 0,36d_e^2 + 0,11Z^3/R \quad (1.32)$$

d_e le diamètre du faisceau électronique, R la profondeur de pénétration. $A(Z, R)$ est donné par:

$$\int_0^{\infty} g(r, z, R) 2\pi r dr = A(Z, R) = g(z) \quad (1.33)$$

$$A(Z, R) = \frac{I_p}{q} \cdot \frac{E_0}{R} \phi(z/R) \quad (1.34)$$

L'établissement des expressions mathématiques pour la fonction de génération n'est avantageux que dans la mesure où cela permet l'établissement de modèles analytiques pour les signaux EBIC et CL. Pour le cas des modèles EBIC (CL) décrivant les défauts dans un semiconducteur tels que les dislocations et les joints de grains, la fonction de génération est souvent prise comme simple telle que la fonction de génération constante avec un volume sphérique tangent à la surface [13, 14]. Kanaya et Okayama [5] ont montré que le volume de génération peut être simulé à une sphère tangente à la surface uniquement lorsque le numéro atomique est compris entre 10 et 15. La méthode Monté Carlo présente une autre approche utilisée par plusieurs auteurs pour dériver des expressions mathématiques pour la fonction de génération [15,16].

Les fonctions de génération les plus utilisées dans la modélisation du signal EBIC et CL avec ou sans défauts sont :

- Fonction de génération ponctuelle, g_p :

$$g_p(z) = G_0 \delta(z - z_1) \quad (1.35)$$

avec, $z_1 = 0.3R$ (R étant le parcours électronique) et G_0 le taux de génération.

- Fonction de génération constante, g_{con} :

$$g_{con}(z) = \begin{cases} G_0 & \text{si } z \leq R \\ 0 & \text{si } z \geq R \end{cases} \quad (1.36)$$

R étant le parcours électronique et G_0 le taux de génération.

- Fonction de génération polynomiale, g_{py} :

$$g_{py}(z) = \frac{G_0}{R_{EH}} \left(0.6 + 6.21 \left(\frac{z}{R_{EH}} \right) - 12.41 \left(\frac{z}{R_{EH}} \right)^2 + 5.69 \left(\frac{z}{R_{EH}} \right)^3 \right) \quad (1.37)$$

R_{EH} parcours électronique d'Everhart et Hoff et G_0 le taux de génération..

- Fonction de génération gaussienne, g_G :

$$g_G(z) = A' \exp \left[- \left(\frac{z/R_K - u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \exp \left(\frac{-bz/R_K}{u_0} \right) \quad (1.38)$$

$\frac{A'}{B} = 0.4, b = 4.0, \Delta u = 0.35, u_0 = 0.125$ et R_K parcours électronique de Kyzer.

- Fonction de génération constante dans un volume sphérique, g_S :

$$g_S = g(r) = \begin{cases} \frac{G_0}{\frac{4}{3} \pi R_{Sph}^3}, & \text{si } r \text{ est dans le volume de génération,} \\ 0, & \text{si } r \text{ à l'extérieur.} \end{cases} \quad (1.39)$$

avec, $R_{Sph} = 0.5R$ (R_{Sph} le rayon de la sphère) et R étant le parcours électronique.

- Fonction de génération constante dans un volume cubique, g_C :

$$g_C = g(r) = \begin{cases} \frac{G_0}{l^3}, & \text{si } r \text{ est dans le volume de génération,} \\ 0, & \text{si } r \text{ à l'extérieur,} \end{cases} \quad (1.40)$$

avec, $l=R$ (l le coté du cube) et R le parcours électronique.

Pour pouvoir montrer la dépendance du volume de génération avec le numéro atomique et l'énergie des électrons primaires on a utilisé le logiciel Casino [17]. Ce dernier peut tracer le parcours des électrons dans le matériau ainsi que leur profil de dissipation de l'énergie.

L'extension spatiale du volume de génération dépend de l'énergie de bombardement tel qu'il est montré sur les figures 1.3a-d. Cependant, la forme du volume de génération dépend du numéro atomique. Il est sphérique pour le cas du silicium (figure 1.3a, b) et, hémisphérique pour le cas du GaAs (figures 1. 3c, d).

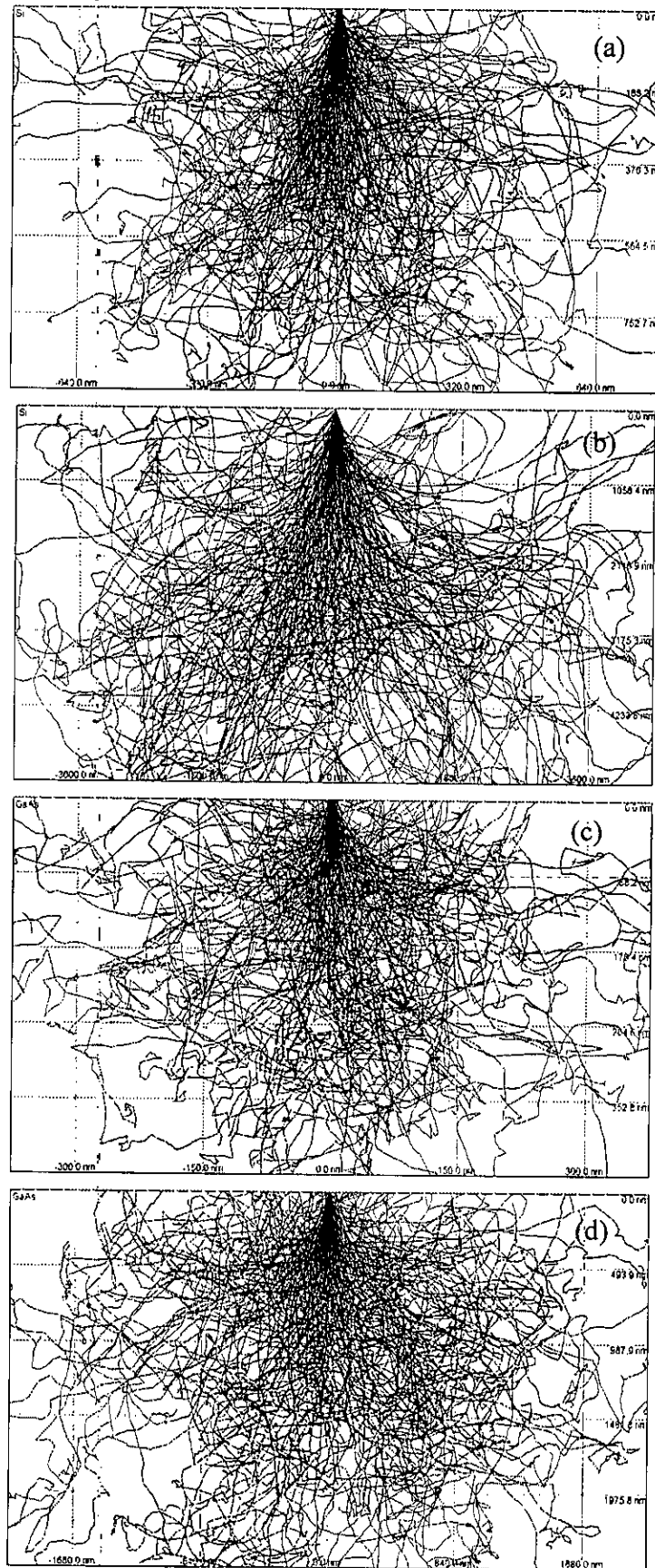


Figure 1. 3 Distribution des électrons primaires dans le volume du semiconducteur (Si et GaAs) pour $E_0 = 10$ keV et $E_0 = 30$ keV

1.3 Description de la technique EBIC et CL

1.3.1 La technique EBIC

La focalisation d'un faisceau d'électrons de quelques kilos électronvolt d'énergie sur une surface d'un semiconducteur excite les électrons de la bande de valence vers la bande de conduction en créant des paires électrons-trous, comme il est schématisé sur la figure 1.4.

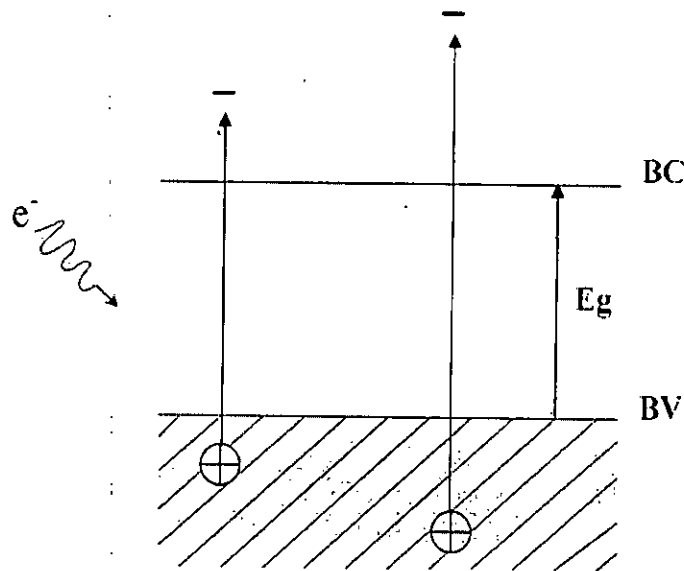


Figure 1.4 Schémas illustrative de processus de création de paires électrons-trous.

Cette création de paires électrons-trous aura lieu dans un volume appelé volume de génération. En l'absence de champs électrique, les porteurs en excès diffusent sous l'effet de leur gradient de concentration. Ils parcourent une distance appelée la longueur de diffusion, L , pendant un temps appelé durée de vie, τ , avant de se recombiner.

En présence d'un champ électrique, ces paires sont séparées en donnant naissance à un courant dans le circuit extérieur. Pour pouvoir effectuer des mesures EBIC, il faut avoir une jonction p-n, ou un contact Schottky comme il est montré sur la figure 1.5.

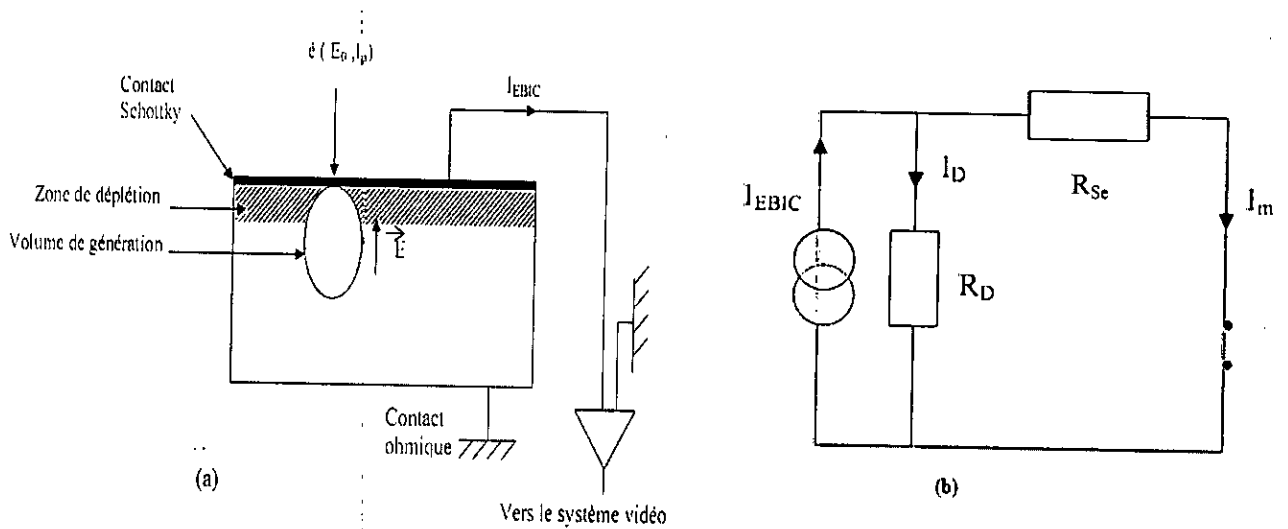


Figure 1.5 (a) Schéma illustrant la génération et la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semiconducteur. (b) Schéma du circuit équivalent de la mesure EBIC. R_{Se} est la résistance série. R_D est la résistance de la jonction de collecte du courant EBIC. I_m et I_{EBIC} sont respectivement les signaux du courant EBIC mesuré et idéal.

1.3.2 Les différentes géométries de la technique EBIC

Pour effectuer des mesures EBIC, deux configurations sont principalement utilisées : la configuration où le faisceau électronique est parallèle au contact (jonction p-n) et la configuration perpendiculaire (faisceau perpendiculaire au contact) [18]. Les principaux dispositifs de la technique EBIC sont illustrés sur la figure 1.6.

1.3.2.1 Excitation parallèle

Les figures 1.6a, c illustrent le cas de la jonction p-n et du contacte Schottky perpendiculaire à la surface bombardée de l'échantillon respectivement. Le faisceau arrive parallèlement à la surface de la jonction et le balayage s'effectue sur la surface bombardée. Le courant EBIC instantané dépend de l'environnement immédiat du point d'impact et il contient des informations sur la façon dont les porteurs générés en ce point sont transportés à travers le dispositif.

En effet, une partie des porteurs générés dans la zone neutre peuvent, par diffusion, arriver jusqu'à la zone de charge d'espace où ils sont séparés sous l'effet du champ électrique qui y règne. Ils participent ainsi au courant induit. Quant aux porteurs créés dans la zone de charge d'espace, ils sont automatiquement séparés et collectés sans perte [18]. Dans cette configuration, il est possible de mesurer la largeur de la zone neutre [19,20]. De même, elle a été également utilisée pour faire des mesures de la longueur de diffusion des porteurs [21].

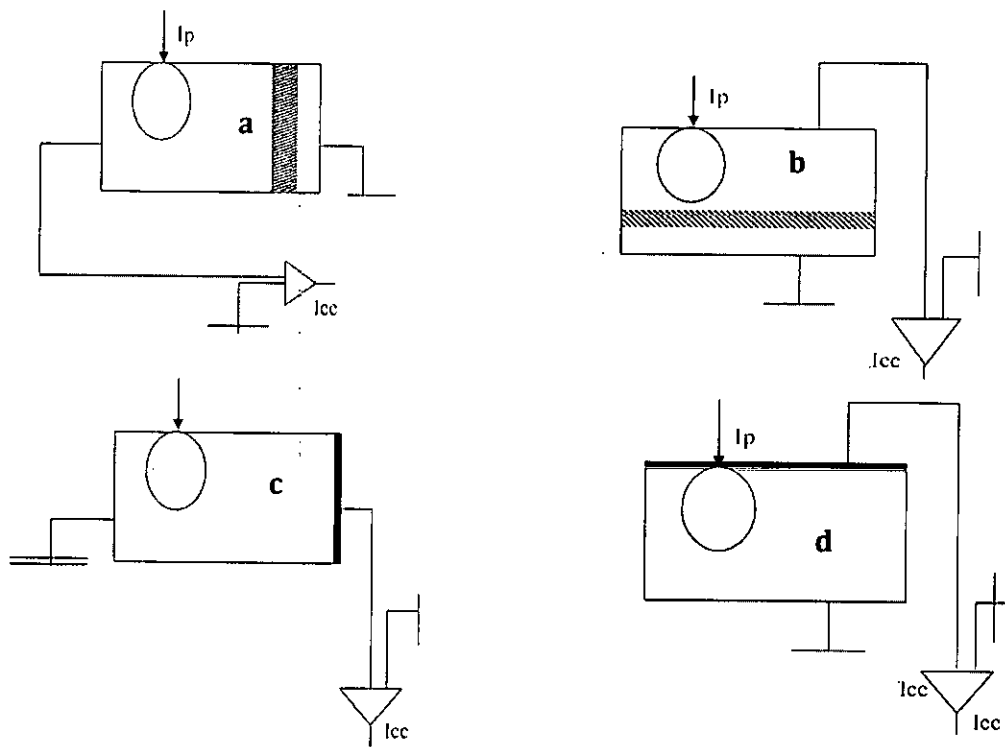


Figure 1.6 Jonction p-n parallèle au faisceau incident I_p (a), Jonction p-n perpendiculaire au faisceau incident (b), faisceau parallèle à une diode Schottky (c), faisceau perpendiculaire à une diode Schottky (d) [18].

1.3.2.2 Excitation perpendiculaire

Les figures 1.6b, d illustrent le cas de la jonction p-n et du contact Schottky qui sont perpendiculaire à la surface bombardée de l'échantillon, respectivement. Dans cette configuration, le faisceau arrive perpendiculairement à la surface du dispositif. Le courant EBIC instantané est indépendant du balayage. Cependant, en faisant varier l'énergie du faisceau incident, le parcours des électrons augmente et le volume de génération dans le dispositif s'élargit. L'évolution du courant en fonction de l'énergie renseigne ainsi sur la génération et l'évacuation des charges à travers le dispositif.

1.3.3 Applications de la technique EBIC

La technique EBIC peut être utilisée pour une caractérisation qualitative pour se renseigner sur l'activité électrique des défauts localisés (agrégats, dislocations et joint de grains).

L'intensité du courant EBIC se modifie en présence des défauts localisés dans le volume de génération entraînant sa diminution. L'image de ces défauts électriquement actifs apparaît noire sur un fond clair.

Cependant, elle peut être utilisée aussi pour une caractérisation quantitative pour la

détermination directe des paramètres physiques tels que, la vitesse de recombinaison en surface, la vitesse de recombinaison des joints de grains, la longueur de diffusion, etc. De telles mesures quantitatives requièrent des dispositifs expérimentaux avec des géométries spécifiques de l'échantillon (figure 1.6). Les avantages et les inconvénients de chaque dispositif ont été discutés par Kitller et Seiffert [22].

1.3.4 Détermination de la longueur de diffusion

1.3.4.1 Cas de la jonction parallèle au faisceau électronique

Cette configuration a été fréquemment utilisée pour la détermination de la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison surfacique des porteurs de charge. Ainsi, Higuchi et Tumura [23] ont été parmi les premiers qui ont utilisé cette configuration pour déterminer ce paramètre. Ceci est réalisé par estimation de la distance x qui est la distance entre le point d'impacte et la jonction de collecte, pour laquelle le profil EBIC diminue avec la valeur de $1/e$ ($e=2.7182\dots$). Czaja [24], a proposé une approche peu différente des auteurs cités ci-dessus. Il a considéré que le courant est le résultat du produit de la fonction de génération par une probabilité de collecte. Cette approche n'a pas connu trop de succès, car, elle est basée sur des expressions mathématiques complexes. Holt [25] a critiqué l'approche de Higuchi et Tumura, puisqu'il néglige l'effet de la taille du volume de génération. Ceci a été démontré plus tard par des travaux expérimentaux [26]. En revanche, il a préféré la détermination de ce paramètre à partir du fit de la partie linéaire du profil EBIC tracé sur une échelle semi-logarithmique.

Donolato [27] a donné une autre approche pour la détermination de la longueur de diffusion en proposant une expression mathématique qui tient compte de la taille du volume de génération. Cependant, cette approche exige que la distance x soit supérieur à $R/2$ (R état le parcours électronique). Cependant, Luke et al. [28] ont montré que l'utilisation de cette méthode exige la condition $x > 4R$ pour une meilleure estimation de L , ce qui rend difficile la détermination des petites valeurs de L . En conséquence, ils ont proposé une autre alternative pour la détermination de L [28- 30].

L'inconvénient majeur de cette structure est la modification des résultats pour les basses tensions. Cette influence correspond à la diminution de la valeur absolue du courant EBIC et, par suite de l'efficacité de collecte. Le problème aussi se pose pour les hautes tensions dans l'utilisation d'une distribution de génération exacte. L'avantage de ces deux structures est que les calculs seront insensibles aux pièges dans la région de charge d'espace ainsi qu'à l'épaisseur du métal dans le cas de la figure 1.6c.

1.3.4.2 Cas de la jonction perpendiculaire au faisceau électronique

Dans le cas des structures schématisées sur les figures 1.6b, d. Cette configuration a été largement utilisée par plusieurs auteurs. Le calcul du courant EBIC est donné sous forme d'une expression contenant le terme de longueur de diffusion L . La détermination de ce courant en fonction de l'énergie incidente E_0 conduit à la détermination de L en ajustant les courbes théoriques et expérimentales de l'efficacité de collecte [8, 18, 22]. Pour des raisons pratiques, la structure donnée par la figure 1.6d (jonction Schottky) est meilleure que la structure donnée par la figure 1.6b (jonction p-n), puisque pour la première, le problème de la vitesse de recombinaison en surface ne se pose pas [18]. Ce montage est d'un grand intérêt pratique puisqu'il permet la détermination locale des faibles valeurs de la longueur de diffusion. Cette particularité fait de la technique EBIC un outil de caractérisation locale et permet l'étude d'hétérogénéité de la recombinaison [18]. Cette structure à base d'une diode Schottky a été proposée pour la première fois par Kamm [31] et utilisée par Wu et Wittry [8]. Ces derniers ont pu montrer qu'elle peut être utilisée pour déterminer les grandes valeurs de la longueur de diffusion ainsi que pour les faibles longueurs de diffusion.

1.4 Description de la technique cathodoluminescence (CL)

La CL est le phénomène optique observé lorsqu'un faisceau d'électrons de quelques keV est focalisé sur la surface d'un échantillon, conduisant à une émission de lumière. L'application la plus répandue est l'écran de télévision (lorsque celui-ci est un tube à rayons cathodiques). Le signal CL est formé par la détection des photons dans le domaine de l'UV, le visible et l'IR. La figure 1.7 présente un schéma illustratif de la technique CL.

La technique CL est une technique non destructive et relativement facile à appliquer et par suite largement utilisée dans divers domaines essentiellement en géologie et en science des matériaux.

Dans les semiconducteurs, les photons émis sont les résultats des transitions électroniques entre la bande de conduction et la bande de valence et les niveaux situés dans le gap du matériau. Si la transition est bande à bande, on parle de la luminescence intrinsèque. Par contre, si la luminescence implique au moins un état localisé dans le gap on dit que la luminescence est extrinsèque.

La CL a connue plusieurs applications dans les semiconducteurs, telles que, la détermination de la densité de dopage, la variation du gap ainsi que la détermination du coefficient d'absorption, la longueur de diffusion.

La résolution des dispositifs classiques de CL est généralement limitée par le domaine d'interaction électron-matière et la portée du transfert d'énergie au sein du matériau [32]. Aller au-delà de cette limite est en principe possible en détectant les phonons très localisés par l'intermédiaire d'une pointe-sonde (champ proche optique) [33].

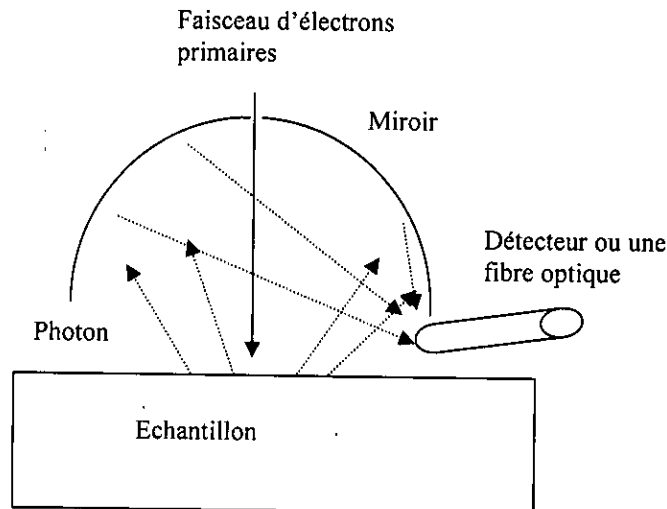


Figure.1.7 Présentation schématique d'appareillage CL.

1.4.1 Principe et applications

La CL est un puissant outil de caractérisation de la matière [34], elle permet l'accès à de nombreuses informations optiques relatives à la substance étudiée. En effet, la durée de vie et la longueur d'onde de la luminescence sont liées à la structure électronique qui dépend de la composition chimique, la structure du matériau et la présence d'impuretés.

Ces différentes informations sont donc accessibles par le biais d'études spectroscopiques ou d'études dynamiques de la durée de vie et permettent ainsi d'avoir des informations quantitatives reliées aux paramètres électroniques et optiques locaux du matériau comme la longueur de diffusion, le coefficient d'absorption [35] et la recombinaison vis-à-vis les défauts tels que les dislocations, surface libre [36] etc...

La résolution spatiale des images CL est limitée par la dispersion du faisceau électronique (quelques micromètres) [32]. Pour augmenter la résolution, plusieurs configurations ont été proposées : « Deep Resolved Cathodoluminescence Spectroscopy » [37] et cathodoluminescence en champ proche [33].

1.5 Modélisation du signal EBIC et CL

La modélisation du signal EBIC et CL a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche. Ces modèles adaptent des hypothèses simplificatrices pour la résolution de l'équation de continuité.

L'efficacité de collecte en configuration perpendiculaire a été modélisée pour la première fois par Wu et Wittry (WW) [8]. Malgré la simplicité de ce modèle, les auteurs ont pu fiter avec succès, le signal EBIC de plusieurs diodes pour déterminer la longueur de diffusion de plusieurs matériaux. Par contre, c'était l'échec total avec des diodes à base de semiconducteurs faiblement dopées.

Considérant cette limite, Tabet et Taronto (TT) [38] ont proposé un modèle qui tient compte des équations de continuité des deux types de porteurs de charge dans de la zone de charge d'espace, ce qui leur a permis le fit des courbes expérimentales d'efficacité de collecte de diodes Au-Ge de faible dopage, avec succès. D'autres travaux, en considérant le même modèle ce sont succédés. Mekki et al. [39], ont tenu compte de l'effet des vitesses de collecte des porteurs de charges, ceci leur a permis d'améliorer l'extraction de la valeur de la longueur de diffusion et de la vitesse de recombinaison des porteurs de charges. En considérant l'effet de la recombinaison des porteurs au niveau de la zone de déplétion, Beggah et al. [40], proposent une approche simple, en définissant une vitesse de collection à la limite de cette zone et, qui s'avère très sensible aux conditions de préparations des échantillons et à la température. En considérant, toujours, l'effet de la recombinaison des porteurs mais cette fois ci au niveau de l'interface métal-semiconducteur, les mêmes auteurs [41] ont démontré que les pertes de courant dues à une possible recombinaison traitée dans le cadre de la théorie de Schottky-Read-Hall, sont très faibles, même pour des grandes valeurs de vitesse de recombinaison ce qui laisse penser que la recombinaison au niveau de la zone de déplétion en serait la cause.

Dans le cas des efficacités de collecte où le faisceau primaire est parallèle à la jonction de collecte, la première modélisation datait de 1955 [42]. Après, Bresse et Lafeuille [43] ont considéré plutôt une source située à une certaine profondeur de la surface de l'échantillon en considérant le cas de la vitesse de recombinaison surfacique, s , nulle et infinie. Berez et Kuiken [44] ont généralisé ces résultats pour une vitesse s quelconque. Quelques années plus tard, Donolato [27] a calculé le signal EBIC pour une vitesse de recombinaison arbitraire et une forme de génération gaussienne. Ensuite le même auteur a développé une méthode pour la détermination de L en étudiant la décroissance du courant en fonction de x qui est la distance entre le point d'impact du faisceau et la jonction pour différentes tensions incidentes [45]. Luke a amélioré le modèle de Donolato en tenant compte du diamètre du faisceau électronique incident

[46]. Kurniawen et Ong [47] ont utilisé le modèle de Czaja[24] pour étudier l'effet de choix des fonctions de génération sur le signal EBIC calculé. Dans leur travail ils ont pris des fonctions de génération qui tiennent en compte de la distribution latérale des porteurs de charge. Ceci a leur permis de mettre en évidence l'effet de la distribution des porteurs de charge au voisinage de la jonction sur le signal EBIC et déduire quel est la fonction de génération qui donne des résultats proches de ceux obtenus par la méthode Monté Carlo [15].

Le signal CL aussi a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche. En 1967, Wu et Wittery ont proposé un modèle [48]. Malgré sa simplicité, les auteurs ont arrivé à fiter leurs résultats expérimentaux. En 1984 Hergert et Pasmann [49] ont proposé un autre modèle où ils ont considéré le volume de génération comme étant une sphère tangente à la surface avec une fonction génération constante. Avec ce modèle ils ont arrivé à estimer la profondeur où 95% du signal est généré. Après, en 1987, Hergert et Heldebrandt [50] ont proposé une autre approche de calcul du signal EBIC et CL où ils ont tenu compte de la présence de la zone morte (pas de radiation dans cette zone) et de la vitesse de recombinaison surfacique des porteurs charges. Les auteurs ont constaté que ce formalisme est valable pour n'importe quelle forme de génération. D'autre part, Djemel et al. [51,52] ont proposé un modèle pour calculer le signal CL où ils ont tenu compte de la présence de la zone de charge d'espace et des états de surface.

Dans le cas des dislocations, les différents modèles cités dans la littérature concernant la modélisation du signal EBIC de ces défauts ont connue quelques diversions. Ceci dû probablement aux hypothèses simplificatrices imposées par chaque auteur. Le premier modèle décrivant le signal EBIC d'un défaut ponctuelle a été proposé par Donolato [14]. Il a considéré le défaut comme une région caractérisée par une longueur de diffusion différente de celle du reste du semiconducteur. A l'aide de cette approche, il a pu calculer la variation du signal EBIC du défaut ponctuelle en fonction de l'énergie de bombardement. Ensuite, plusieurs approches pour quantifier les signaux EBIC et CL des défauts étendus (dislocation) ont été proposés [53–61]. Pasmann [57] a constaté que l'approximation du premier ordre utilisée par Donolato [55] pour le calcul du contraste d'une dislocation perpendiculaire à la surface ne reproduit pas le signal dans la gamme de faibles énergies d'excitation. Donolato [58], proposa une solution à ce problème en prenant en considération le rayon de dislocation. D'autre part, Donolato et Pasmann [59] ont constaté que le modèle proposé par Fervacque et Sieber [60] souffre d'une diverge lorsque r tend vers 0. Fervacque et Sieber [61] ont démontré que la divergence observée n'est qu'une mauvaise interprétation de leur modèle par ces auteurs.

Dans le cas du signal EBIC des joints de grain, la situation est moins contradictoire que celle des dislocations. Un premier modèle a été proposé par Marek [62], en se basant sur

l'approximation du premier ordre adopté par Donolato [14]. Avec ce modèle, Marek a tracé la variation de la largeur à mi-hauteur du contraste en fonction de l'énergie d'excitation pour plusieurs valeurs de la longueur de diffusion. Ensuite, Donolato a proposé un autre modèle où il a tenu compte de la vitesse de recombinaison des porteurs de charge sur le joint. Ce modèle est valable pour n'importe quelle forme de génération [63].

Dans ce qui se suit, on donne une description des modèles théoriques de calcul du signal EBIC (CL) les plus utilisés dans la littérature et dans ce travail.

1.5.1 Modèle de Wu et Wittry (WW)

Les auteurs ont considéré que la fonction de génération a la forme d'une gaussienne modifiée [8]. Cette fonction $\phi(u)$ est de forme

$$\phi(u) = A \exp\left[-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \exp\left(-\frac{bu}{u_0}\right) \quad (1.41)$$

avec, $u = \rho z / R$ (la distance réduite)

ρ , est la densité du semiconducteur en g/cm^3 ; z , est la profondeur de pénétration en cm et R est la portée en g/cm^2 . Pour le GaAs, $u_0 = 0,125, \Delta u = 0,350, b = 4$, et $B/A = 0,4$

Pour calculer le courant de court-circuit collecté, les auteurs ont partagé l'échantillon en trois régions comme il est montré sur figure 1.8, avec les hypothèses suivantes:

- La première région représente la couche métallique, où il est supposé que l'énergie du faisceau primaire est dissipée sans produire de porteurs en excès.
- La deuxième est la région de déplétion, où il est supposé que tous les porteurs de charge générés sont collectés, donc pas de piégeage ou de recombinaison qui peuvent modifier l'efficacité de collection.
- La troisième région représente le volume du semiconducteur, où il est supposé que les porteurs diffusent avec recombinaison.

Pour simplifier le calcul du courant collecté provenant des porteurs générés dans le volume, une variable sans dimension ayant son origine à la limite du volume et de la zone de déplétion et introduite.

L'équation de continuité à l'état statique peut s'exprimer par:

$$\frac{d^2 \Delta p}{du^2} - w^2 \Delta p + \left(\frac{wL}{D_p}\right) \phi(u + u_s) = 0 \quad (1.42)$$

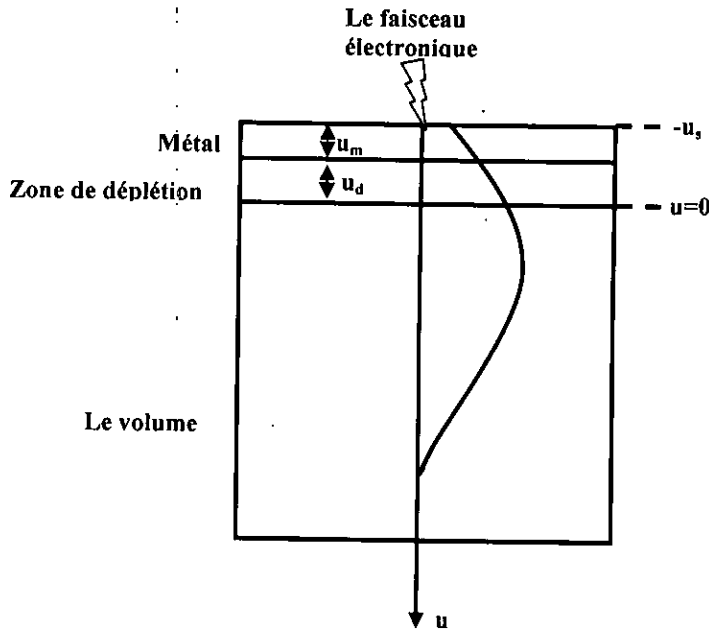


Figure 1.8 Le schéma du partage de l'échantillon selon le modèle de WW.

Elle est soumise aux conditions limites suivantes:

$$\Delta p(\infty) = 0 \quad \text{Et} \quad \Delta p(0) = 0 \tag{1.43}$$

où $\Delta p(u)$ est la densité des porteurs en excès, D_p est la constante de diffusion, L est la longueur de diffusion, et $w = R/\rho L$ est la portée réduite de l'électron; en outre $u_s = u_m + u_d$, avec $u_m = \rho_m z_m / R$ l'épaisseur réduite du métal (ρ_m est la densité du métal est z_m son épaisseur) et $u_d = \rho_d z_d / R$ l'épaisseur réduite de la couche de déplétion (z_d est l'épaisseur de la couche de déplétion).

La fonction de génération des porteurs de charge est exprimée par:

$$\phi(u + u_s) = A \exp \left[- \left(\frac{u + u_s - u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \exp \left[- \frac{b}{u_0} (u + u_s) \right] \tag{1.44}$$

Les auteurs ont résolu l'équation (1.37) par les fonctions de Green où la fonction de génération, $\phi(u + u_s)$ est remplacée par une fonction $\delta(u - u')$, correspondant à une source ponctuelle ayant une puissance unité à la position u' . En utilisant les transformés de Laplace, ils ont obtenu:

$$\Delta p(u) = \frac{L}{2D_p} \int_0^\alpha \left\{ \exp(-|u - u'|w) - \exp(-(u + u')w) \right\} \phi(u' + u_s) du' \quad (1.45)$$

Le résultat final est donné par:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta p(u)}{L/D_p} = & A \cdot \frac{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta u}{4} \exp \left[-(u + u_s - u_0)w + \left(\frac{w \Delta u}{2} \right)^2 \right] \times \left[\begin{array}{l} \operatorname{erf} \left(\frac{u + u_s - u_0 - \frac{1}{2}w \Delta u^2}{\Delta u} \right) \\ - \operatorname{erf} \left(\frac{u_s - u_0 - \frac{1}{2}w \Delta u^2}{\Delta u} \right) \end{array} \right] \\ & + A \cdot \left(\frac{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta u}{4} \right) \exp \left[(u + u_s - u_0)w + \left(\frac{w \Delta u}{2} \right)^2 \right] \times \operatorname{erfc} \left(\frac{u + u_s - u_0 + \frac{1}{2}w \Delta u^2}{\Delta u} \right) \\ & - A \cdot \frac{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta u}{4} \left[\exp(-u + u_s - u_0)w + \left(\frac{w \Delta u}{2} \right)^2 \right] \times \operatorname{erfc} \left(\frac{u - u_0 + \frac{1}{2}w \Delta u^2}{\Delta u} \right) \quad (1.46) \\ & - \frac{B}{2(b/u_0 + w)} \exp \left[-(uw + b \frac{u_s}{u_0}) \right] \times \left\{ 1 - \exp \left[-\left(\frac{b}{u_0} - w \right) u \right] \right\} - \frac{B}{2(b/u_0 + w)} \\ & \times \left\{ \exp \left[-\frac{b}{u_0} (u_s + u) \right] - \exp \left[-(uw + b \frac{u_s}{u_0}) \right] \right\} \end{aligned}$$

Les constantes arbitraires A' et B sont déterminées par la normalisation de la fonction de génération $\int_{-u_s}^\alpha \phi(u + u_s) du = G_0$ ce qui donne:

$$A \cdot \left(\frac{1}{2} \pi^{\frac{1}{2}} \Delta u \right) \left[1 + \operatorname{erf} \frac{u_0}{\Delta u} \right] - B \frac{u_0}{b} = G_0 \quad (1.47)$$

où G_0 est le taux total de la génération de porteurs. en $\text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$ et peut être relié à la puissance du faisceau électrique incident E_0 par:

$$G_0 = \frac{I_p (1-f)}{q E_{\text{eh}}} E_0 \quad (1.48)$$

f la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion, son expression est donné par eq. 1.17. E_0 l'énergie des électrons primaires en keV et E_{eh} est l'énergie moyenne pour générer une paire électron-trou en eV. I_p l'intensité de courant du faisceau primaire. q la charge élémentaires

La densité de courant, J_b , des porteurs générés dans le volume du semiconducteur est donnée par:

$$\begin{aligned} J_b &= -qD_p (wL)^{-1} \frac{d\Delta P}{du} \Big|_{u=0} \\ &= -qA \frac{\pi^2 \Delta u}{2} \exp \left[\alpha_1 w + \left(\frac{w \Delta u}{2} \right)^2 \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{\alpha_1}{\Delta u} + \frac{w \Delta u}{2} \right) + \frac{qB}{\frac{b}{u_0} + w} \exp \left(-b \frac{u_s}{u_0} \right) \end{aligned} \quad (1.49)$$

avec, $\alpha_1 = u_s - u_0$

En second lieu, la densité du courant collecté, J_d , due à la contribution des porteurs générés dans la zone de charge d'espace peut s'exprimer par:

$$J_d = -qA \frac{\pi^2 \Delta u}{2} \left[\operatorname{erf} \frac{\alpha_1}{\Delta u} - \operatorname{erf} \frac{u_m - u_0}{\Delta u} \right] + qB \left(\frac{u_0}{b} \right) \left[\exp \left(-b \frac{u_m}{u_0} \right) - \exp \left(-b \frac{u_s}{u_0} \right) \right] \quad (1.50)$$

La densité totale du courant collecté J est s'exprimer par:

$$J = J_b + J_d \quad (1.51)$$

L'efficacité de collection de L'EBIC est donné par:

$$\eta = |J| / qG_o \quad (1.52)$$

Pour prévoir la dépendance de L'EBIC par rapport à la tension de bombardement, WW ont pris le parcours électronique sous la forme:

$$R = 2,56 \times 10^{-3} (E_0 / 30)^{1,7} \text{ g/cm}^2 \quad (1.53)$$

1.5.2 Modèle Tabet et Toronto (TT)

La contrainte majeure du modèle WW c'est qu'il ne tient pas compte de la recombinaison à l'interface métal-semiconducteur et la présence du champ électrique dans la zone de charge d'espace. Alors, Tabet et Toronto ont proposé un modèle pour calculer les efficacités de collectes EBIC en tenant compte de ces paramètres [64].

Dans la zone déserte, ils ont pris en compte du courant des porteurs minoritaires ainsi que celui des porteurs majoritaires. Leur flux est donné respectivement par:

$$J_p = -D_p \frac{d\Delta p}{dz} + \mu_p \Delta p E \quad (1.54.a)$$

$$J_n = -D_n \frac{d\Delta n}{dz} + \mu_n \Delta n E \quad (1.54.b)$$

D_p, D_n sont des coefficients de diffusion, $\Delta p, \Delta n$ les densités des porteurs en excès. μ_p, μ_n sont les mobilités. $E(z)$, le champ électrique, les auteurs ont proposé de l'écrire sous la forme:

$$E(z) = \frac{N_d q}{\epsilon} (z - z_d) \quad (1.55)$$

Donc, les équations 1.54.a et b deviennent:

$$-D_p \frac{d^2 \Delta p}{dz^2} + \mu_p \frac{N_d q}{\epsilon} (z - z_d) \frac{d\Delta p}{dz} + \mu_p \frac{N_d q}{\epsilon} \Delta p = g(z) - r \quad (1.56.a)$$

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n}{dz^2} - \mu_n \frac{N_d q}{\epsilon} (z - z_d) \frac{d\Delta n}{dz} - \mu_n \frac{N_d q}{\epsilon} \Delta n = g(z) - r \quad (1.56.b)$$

$g(z), r$ sont le taux de génération et de recombinaison respectivement. Le taux de recombinaison peu être exprimé par la théorie de Shockley-Hall-Read.

Dans la zone neutre, seuls les porteurs minoritaires sont pris en considération et leur courant est purement diffusionnel. L'équation de continuité devienne:

$$-D_p \frac{d^2 \Delta p}{dz^2} = g(z) - \frac{\Delta p}{\tau} \quad (1.57)$$

Les conditions aux limites utilisées sont exprimées par:

Dans le volume $z \geq z_d$

$$\Delta p = \Delta n \quad (1.58.a)$$

à l'interface métal semiconducteur $z = z_d$

$$\Delta p(z_d^+) = \Delta p(z_d^-) \quad (1.58.b)$$

$$\frac{d\Delta p}{dz}(z = z_d^+) = \frac{d\Delta p}{dz}(z = z_d^-) \quad (1.58.c)$$

$$\Delta p(z_d) = \Delta n(z_d) \quad (1.58.d)$$

A l'interface métal-semiconducteur $z=0$

Les flux de porteurs de charge recombinaison sur les centres actifs à l'interface métal-semiconducteur sont égaux:

$$S_p \Delta p(0) = S_n \Delta n(0) \quad (1.59)$$

La conservation de charge à l'interface métal/semiconducteur se traduit par:

$$J_p^c = J_p(0) + S_p \Delta p(0) \quad (1.60.a)$$

$$J_n^c = J_n(0) + S_n \Delta n(0) \quad (1.60.b)$$

J_p^c, J_n^c sont les flux collectés, on peut les exprimer sous la forme:

$$J_p^c = -v_p \Delta p(0) \quad (1.61.a)$$

$$J_n^c = -v_n \Delta n(0) \quad (1.61.b)$$

v_p et v_n sont les vitesses de collecte, elles peuvent être exprimées selon le mécanisme d'émission thermoélectronique:

$$v_{p,n} = \frac{A_{p,n}^* T^2}{q N_{v,c}} \quad (1.62)$$

où, A_p^* et A_n^* sont les facteurs de Richardson effectifs des trous et des électrons. N_v et N_c sont les densités d'états effectives dans les bandes de valence et de conduction.

La solution des équations selon les auteurs doit être effectuée par la méthode de la variation de la constante.

Dans la zone de charge d'espace:

$$\Delta p(z) = \exp\left[\alpha_2 (z - z_d)^2\right] \left[\theta_p + \xi_p \operatorname{erf} \alpha_2^{\frac{1}{2}} (z - z_d) + \int_0^{z_d} \frac{g(z')}{2D_p} \left(\frac{\pi}{\alpha_2}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf} \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}} (z' - z_d) \right) dz' - \operatorname{erf} \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}} (z - z_d) \right) \right] \int_0^{z_d} \frac{g(z')}{2D_p} \left(\frac{\pi}{\alpha_2}\right)^{\frac{1}{2}} dz' \quad (1.63.a)$$

$$\Delta n(z) = \exp(-\alpha_2(z-z_d)^2) \cdot \left[\theta_n + F \left[\alpha_2^{\frac{1}{2}}(z-z_d) \right] \right] + \int_0^{z_d} \frac{g(z')}{D_n} \left(\frac{1}{\alpha_2} \right)^{\frac{1}{2}} F \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}}(z'-z_d) \right) dz' - F \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}}(z-z_d) \right) \int_0^{z_d} \frac{g(z')}{D_n} \left(\frac{1}{\alpha_2} \right)^{\frac{1}{2}} dz' \quad (1.63.b)$$

Dans la zone neutre:

$$\Delta p_1 = \Delta p_0 + B_p \exp \left[\frac{(z-z_d)}{L} \right]$$

$$\Delta p_0 = \frac{L}{2D_p} \int_{z_d}^{\infty} g(z') \left[\exp \left(-\frac{|z-z'|}{L} \right) - \exp \left(-\frac{z+z'-2z_d}{L} \right) \right] dz' \quad (1.64.c)$$

avec, $\alpha_2 = \frac{N_d q^2}{2\epsilon kT}$ (1.65)

Les constantes $\theta_p, \xi_p, B_p, \xi_n$ et θ_n sont déduites depuis des conditions aux limites.

$$F(x) = \int_0^x \exp(t^2) dt \quad (1.66)$$

$$J_b = -qA \frac{\pi^{\frac{1}{2}} \Delta u}{2} \exp \left[aw + \left(\frac{w \Delta u}{2} \right)^2 \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{a}{\Delta u} + \frac{w \Delta u}{2} \right) + \frac{qB}{\frac{b}{u_0} + w} \exp \left(-b \frac{u_s}{u_0} \right) \quad (1.67)$$

avec, $a = u_m + u_d - u_0$ et $u_d = z_d / R$

$$\xi_p = \frac{G_p - H_p + L_p J_b^0 / D_p}{\operatorname{erf} \left(-\alpha_2^{\frac{1}{2}} z_d \right) - 2L_p \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{2D_p}{S_p + v_p} \left[\exp(-\alpha_2 z_d^2) \right]} \quad (1.68)$$

$$G_p = \int_0^{z_d} \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf} \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}}(z'-z_d) \right) \frac{g(z')}{D_p} dz' \quad (1.69)$$

$$H_p = \frac{L}{D_p} \int_0^{z_d} g(z') dz' \quad (1.70)$$

$$\theta_p = -\xi_p \frac{D_p}{S_p + v_p} \exp(-\alpha_2 z_d^2) \cdot \left[\frac{v_p + S_p}{D_p} \operatorname{erf} \left(-\alpha_2^{\frac{1}{2}} z_d \right) \exp(\alpha_1 z_d^2) - 2 \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (1.71)$$

donc,
$$\theta_p = H_p - G_p - \frac{L_p}{D_p} J_b^0 - 2L_p \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \xi_p \quad (1.72)$$

$$B_p = \theta_p + G_p \quad (1.73)$$

$$\theta_n = B_p + G_n \quad (1.74)$$

avec,

$$G_n = \int_0^{z_d} \alpha_2^{-\frac{1}{2}} \frac{g(z')}{D_n} F \left(\alpha_2^{\frac{1}{2}} (z' - z_d) \right) dz' \quad (1.75)$$

$$\xi_n = \left[S_p \frac{\Delta p_0}{D_n} + \theta_n \frac{v_n}{D_n} \exp(-\alpha_2 z_d^2) \right] / \left[\alpha_2^{\frac{1}{2}} - \frac{v_n}{D_n} \exp(-\alpha_2 z_d^2) F \left(-\alpha_2^{\frac{1}{2}} z_d \right) \right] \quad (1.76)$$

avec,

$$\Delta p_0 = \left[\theta_p + \xi_p \operatorname{erf} \left(-\alpha_2^{\frac{1}{2}} z_d \right) \right] \exp(\alpha_2 z_d^2) \quad (1.77)$$

L'efficacité de collecte est donnée par:

$$|i_c| = qv_p p(0) - qv_n n(0) \quad (1.78)$$

$$\eta = \frac{|i_c|}{qG_0} \quad (1.79)$$

G_0 le taux de génération.

1.5.3 Modèle de Donolato

La configuration EBIC où le faisceau électronique est perpendiculaire à la jonction de collecte est très efficace pour la détermination des petites longueurs de diffusion. Cependant, la configuration où le faisceau électronique est parallèle à la jonction de collecte (figure 1.9) est efficace pour la détermination des grandes longueurs de diffusion. Pour cette configuration, plusieurs modèles ont été proposés pour donner l'expression du courant EBIC en fonction de la distance du scan [27,46, 65 – 68]. Vu son large utilisation, le modèle de Donolato est décrit en détail.

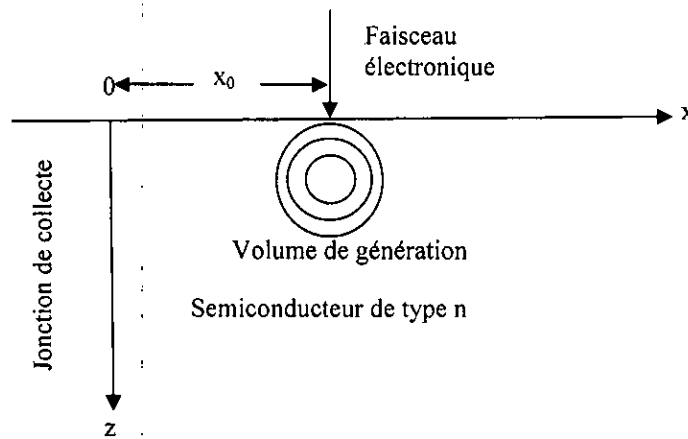


Figure 1.9 Schémas utilisé par Donolato.

La diffusion des porteurs minoritaires générés est exprimée par l'équation de diffusion. Pour le cas d'un semiconducteur de type n, elle est donnée par:

$$D_p \nabla^2 (\Delta p(r)) - \frac{1}{\tau} \Delta p(r) = -g(r) \tag{1.80}$$

$\Delta p(r)$ est l'excès de trous, D_p et τ présentent leur coefficient de diffusion et durée de vie respectivement. $g(r)$ est la fonction de génération.

Pour le cas de cette configuration il y a une invariance sur l'axe y donc le problème se réduira à 2D l'équation 1.79 devient:

$$D_p \nabla^2 (\Delta p(x, z)) - \frac{1}{\tau} \Delta p(x, z) = -g(x, z) \tag{1.81}$$

avec, les conditions aux limites:

$$\frac{\partial \Delta p(x, z)}{\partial z} = \frac{v_T}{D_p} \Delta p(x, z) \text{ à } z = 0 \tag{1.82.a}$$

$$\Delta p(x, z) = 0 \text{ à } x = 0 \tag{1.82.b}$$

En utilisant les fonctions de Green la solution peut être exprimée par:

$$\Delta p(x, z) = \int_0^\infty dx' \int_0^\infty dz' g(x', z') G(x, x', z, z') \tag{1.83}$$

avec, $G(x, x', z, z')$ la fonction de green qui satisfait l'équation 1.80, avec le remplacement de $g(x,z)$ par la fonction $\delta(z - z')$, avec les conditions aux limites données par les équations 1.81.a et b. Le courant de collecte est donné par:

$$I = D_p \int_0^{\infty} \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=0} dz = \int_0^{\infty} dx' \int_0^{\infty} g(x', z') Q(x', z') dz' \quad (1.84)$$

avec,

$$Q(x', z') = D_p \int_0^{\infty} \frac{\partial G}{\partial x} \Big|_{x=0} dz \quad (1.85)$$

La fonction de Green est:

$$G(x, z) = \int_0^{\infty} a(k, z) \sin(kx) dk \quad (1.86)$$

$$a(k, z) = \frac{1}{\pi D_p} \frac{\sin(kx')}{\mu} \left\{ \exp(-\mu|z - z'|) + \frac{\mu - s}{\mu + s} \exp(-\mu(z + z')) \right\} \quad (1.87)$$

avec,

$$\mu = \sqrt{\lambda^2 + 1/L^2} \quad \text{et} \quad s = \frac{v_T}{D_p} \quad (1.88)$$

La fonction de génération gaussienne proposée par Fitting [7] est donnée:

$$g(x - x_0, z) = \frac{1.14}{2\pi\sigma_1} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2}{2\pi\sigma_1}\right) \quad (1.89)$$

avec, x_0 distance entre le faisceau électronique et la jonction de collecte, $z_0 = 0.3R_K$ (R_K étant le parcours électronique de Kyzer) et $\sigma_1^2 = \frac{R^2}{7.5}$

Le courant de collecte est donné par

$$I(x_0) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{\mu^2} \left\{ \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) - 0.57 \exp\left(\frac{k^2\sigma^2}{2} - \mu z_0\right) \frac{s}{\mu + s} \operatorname{erf}\left(\frac{\sigma}{\sqrt{2}}\left(\mu - \frac{z_0}{\sigma}\right)\right) \right\} \quad (1.90)$$

avec, x_0 la distance entre la jonction et le point d'impact du faisceau électronique.
 A l'aide de ce modèle, Donolato a pu tracer la courbe du signal EBIC en fonction de la distance de scan x_0 . Ce modèle a été utilisé par plusieurs auteurs pour la détermination de la longueur de diffusion et/ou la vitesse de recombinaison.

1.5.4 Modèle de Cathodoluminescence (CL)

La connaissance de la distribution spatiale des porteurs de charges est indispensable (la résolution de l'équation de diffusion des porteurs de charges en excès) pour calculer les signaux EBIC et CL. De plus, pour le cas de la CL, la connaissance des pertes optiques et de l'absorption interne de la lumière est indispensable pour pouvoir calculer le signal CL.

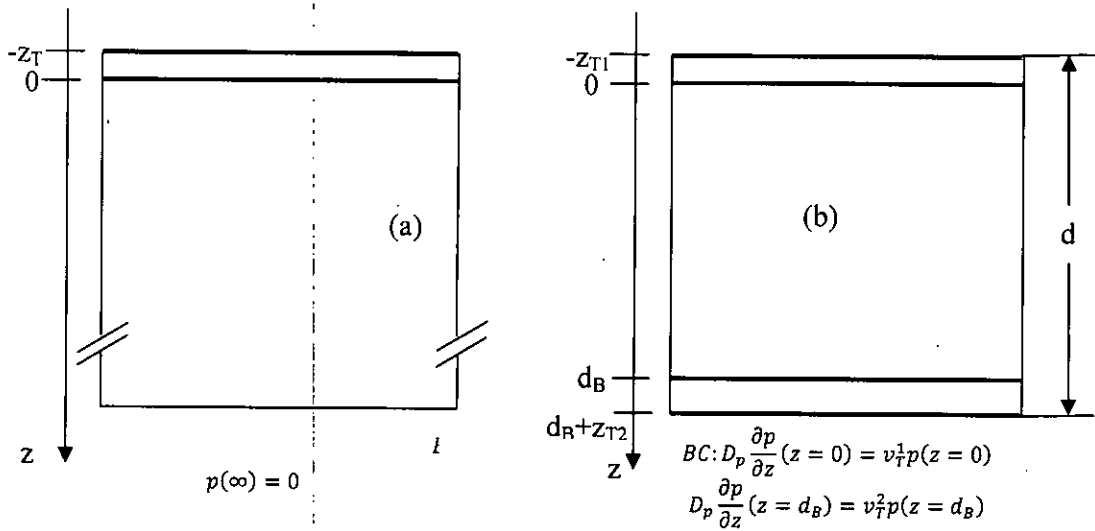


Figure 1.10 Schéma utilisé pour le calcul CL, (a) cas d'un semiconducteur semi-infini (b) cas de couche mince.

Hergert et Hildebrandt [50] ont proposé un modèle pour calculer le signal CL valable pour n'importe quelle fonction de génération en tenant compte de la vitesse de recombinaison surfacique et la présence d'une zone morte (dans cette zone il y a pas de luminescence). Ils ont considéré le cas du semiconducteur semi-infini et ainsi que de couches minces. Les figures 1.10 a et b représentent le schéma utilisé ces auteurs pour calculer le signal CL d'un semiconducteur semi-infini et un semiconducteur en couche mince avec les conditions aux limites appropriées respectivement.

Si le semiconducteur est semi-infini, le signal CL est donné par:

$$I_{CL} = \frac{2\pi}{\tau_r} \int_0^{\theta_0} \sin(\theta) d\theta F(\hat{\alpha}) \tag{1.91}$$

avec,

$$\hat{\alpha} = \frac{\alpha}{\cos(\theta)} \quad (1.92)$$

α le coefficient d'absorption et θ_0 l'angle de réflexion totale.

$$F(x) = \frac{\tau G_0 \exp(-xz_T)}{1 - x^2 L^2} \left[\Phi(x, z_T) - \frac{Lx + S}{1 + S} \Phi\left(\frac{1}{L}, z_T\right) \right] \quad (1.93)$$

$S = v_T / (L/\tau)$, la vitesse de recombinaison réduite.

Si la couche est mince:

$$F(\hat{\alpha}) = \frac{\tau G_0 \exp(-\hat{\alpha} z_{T1})}{1 - \hat{\alpha}^2 L^2} \left[\frac{(\hat{\alpha}L - S_2) \exp(-\hat{\alpha} d_B) A(-S_1, 0, z_{T1}) - (\hat{\alpha}L + S_1) A(S_2, d_B, z_{T1})}{B(S_1, S_2, d_B)} + \Phi(\hat{\alpha}, z_{T1}) \right] \quad (1.94)$$

avec,

$$A(S, d, z_{T1}) = (1 + S) \exp\left(\frac{d}{L}\right) \Phi\left(\frac{1}{L}, z_{T1}\right) + (1 - S) \exp\left(-\frac{d}{L}\right) \Phi\left(\frac{1}{L}, z_{T1}\right) \quad (1.95.a)$$

$$B(S_1, S_2, d_B) = (1 + S_1)(1 + S_2) \exp\left(\frac{d_B}{L}\right) - (1 - S_1)(1 - S_2) \exp\left(-\frac{d_B}{L}\right) \quad (1.95.b)$$

Pour le cas d'un semiconducteur semi-infini:

$$\Phi(x, z_1) = \int_0^{\infty} \exp(-xz) g_z(z + z_1) \quad (1.96.a)$$

Pour le cas d'une couche mince:

$$\Phi(x, z_1) = \int_0^{d_B} \exp(-xz) g_z(z + z_1) \quad (1.96.b)$$

1.5.5 Contraste EBIC d'un défaut quelconque

Le travail de Donolato sur le contraste EBIC d'un défaut ponctuel [14] représente le point de départ de tous les travaux concernant les calculs du contrat des défauts par la technique EBIC. Donolato a considéré que la présence du défaut dans le volume du semiconducteur peut être regardée comme une perturbation dans la durée de vie des porteurs minoritaires et le défaut

est caractérisé par un paramètre appelé "la force du défaut". Son modèle est très simple mais il a apporté une nouvelle vision sur la modélisation des contrastes des défauts dans les semiconducteurs. La configuration du modèle est représentée sur la figure 1.11.

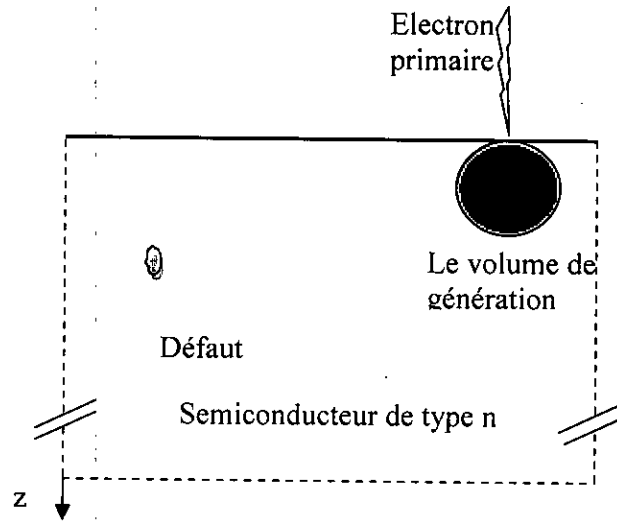


Figure 1.11 Schéma utilisé pour le calcul du contraste d'un défaut quelconque.

Il est à noter que la présence d'un défaut détruit la symétrie du problème qui sera désormais traité en 3D. Le problème dans le cas général est très complexe voir impossible analytiquement.

Donolato a considéré les hypothèses suivantes:

- La zone déserte du contact Schottky est négligeable.
- Le volume de défaut est caractérisé par une durée de vie de porteurs τ' .
- Le taux d'injection est faible.
- La vitesse de recombinaison en surface est infinie ce qui donne $\Delta p(z = 0) = 0$.

Le courant collecté est égal au flux de charge en surface:

$$I_{ebic} = q \iint D_p \frac{d\Delta p}{dz} \Big|_{z=0} dx dy \tag{1.97}$$

Donolato donne la densité $\Delta p(\vec{r})$ sous la forme:

$$\Delta p(\vec{r}) = \frac{1}{D_p} \int_{\Omega} g(\vec{r}', R) G(\vec{r}, \vec{r}') d^3 r' - \int_{\Omega} \gamma(\vec{r}') \Delta p(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3 r' \tag{1.98}$$

avec,

$$\gamma(\vec{r}') = \frac{1}{D_p} \left(\frac{1}{r'} - \frac{1}{r} \right) = \frac{1}{L^2} - \frac{1}{L'^2} \tag{1.99}$$

γ est appelée « force de défaut ». L et L' sont les longueurs de diffusion à l'extérieur et à l'intérieur du défaut respectivement. La fonction de Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ s'écrit sous la forme:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\exp(-|\vec{r} - \vec{r}'|/L)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{\exp(-|\vec{r} - \vec{r}''|/L)}{|\vec{r} - \vec{r}''|} \right] \quad (1.100)$$

\vec{r}' et \vec{r}'' étant les vecteurs repérant respectivement le point de source et son image par rapport au plan de la surface.

La distribution $\Delta p(\vec{r})$ peut être calculée par une procédure interactive (méthode de perturbation) en prenant comme valeur initiale de la densité $\Delta p_0(\vec{r})$ en absence de défaut.

$$\Delta p_0(\vec{r}) = \frac{1}{D_p} \int_{\Omega} g(\vec{r}, R) G(\vec{r}, \vec{r}') d^3 \vec{r}' \quad (1.101)$$

Donolato a donné en première approximation $\Delta p(\vec{r})$:

$$\Delta p(\vec{r}) = \Delta p_0(\vec{r}) - \int_{\Omega} \Delta p_0(\vec{r}') \gamma(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3 \vec{r}' \quad (1.102)$$

Le courant collecté est exprimé par:

$$I_{ebic} = q \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial z} \Big|_{z=0} dx dy = I_0 - I^* \quad (1.103)$$

Où, I_0 est le courant collecté en absence de défaut, il est donné par:

$$I_0 = q \int_{\Omega} d\vec{r}' g(\vec{r}', R) \exp(-z'/L) \quad (1.104)$$

I^* est le courant perdu par recombinaison à l'intérieur des défauts est s'exprime:

$$I^* = q D_p \int_{\Omega} d^3 \vec{r}' \gamma(\vec{r}') \Delta p_0(\vec{r}') \exp(-z'/L) \quad (1.105)$$

L'approximation de Born a permis d'aboutir à une solution analytique du problème. Cette solution en principe n'est valide que pour les défauts à faible activité électrique (le défaut introduit une faible perturbation dans la distribution des porteurs). Le contraste EBIC est défini par la relation:

$$C = I^* / I_0 \quad (1.106)$$

1.5.6 Contraste EBIC d'un défaut ponctuel

Donolato a considéré un défaut ponctuel situé à une profondeur, a , de la surface de coordonnées $r_0(o, o, a)$ [14]. La force du défaut sous la forme $\gamma(\vec{r}) = \gamma\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$, où, γ , a la force d'une longueur. Le volume de génération est pris comme une sphère tangente à la surface de rayon R_{Sph} ($R_{Sph} = R/2$). R étant la pénétration maximum des électrons comme il est présenté sur la figure 1.12.

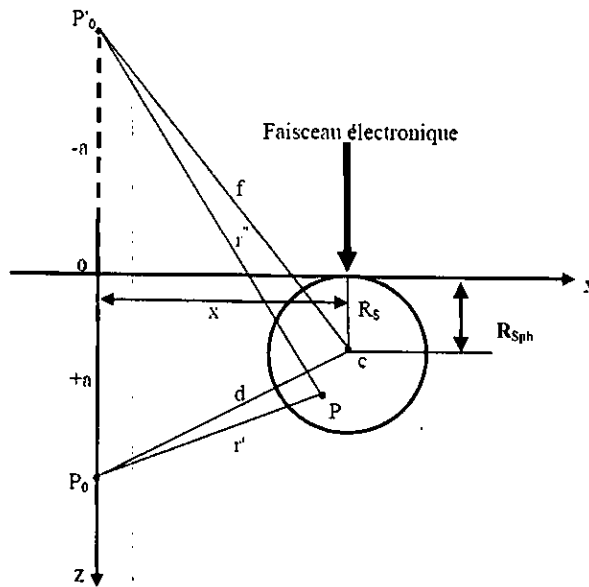


Figure 1.12 Schéma utilisé pour le calcul du contraste d'un défaut ponctuel.

Donolato a montré que le contraste du défaut ponctuelle peut être exprimé par:

$$C(x, R) = \frac{\gamma}{4\pi} \exp(k(R_{Sph} - a)) F \tag{1.107}$$

avec,

$$F = \frac{1}{d_1} \exp(-kd_1) - \frac{1}{f_1} \exp(kf_1) \quad \text{si } d_1 \geq R \tag{1.108.a}$$

et

$$F = \frac{k - (1 + kR_{Sph}) [\exp(-kR_{Sph})] \left(\frac{1}{d_1} \right) \sinh(kd_1)}{kR_{Sph} \cosh(kR_{Sph}) - \sinh(kR_{Sph})} - \frac{\exp(-kl)}{l} \quad \text{si } d_1 \leq R \tag{1.108.b}$$

avec,

$$k = \frac{1}{L}, \quad d_1 = \left(x^2 + (R_{Sph} - a)^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad f_1 = \left(x^2 + (R_{Sph} + a)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

R_{Sph} , étant le rayon de la sphère de génération, c'est-à-dire la moitié du parcours électronique.

1.5.7 Contraste EBIC de dislocation perpendiculaire à la surface

En partant du modèle de défaut ponctuel, Donolato a proposé en premier lieu un modèle pour une dislocation sans rayon, perpendiculaire à la surface [55]. Il représenté cette dislocation comme étant une superposition infinie de défauts ponctuels.

Ces suppositions ont amené l'auteur à l'expression:

$$c_{\max} = \int_0^{\infty} c^*(z) dz \quad (1.109)$$

$c^*(z)$, est le maximum du contraste EBIC du défaut ponctuelle donné par l'équation (1.107) en prenant x égale à zéro et en remplaçant la profondeur a , par z .

Donolato a donné l'expression du maximum de contraste sous la forme:

$$c_{\max}(\alpha_3) = \frac{\gamma_d}{4\pi} \left(\frac{2 \sinh(\alpha_3) - (1 + \alpha_3) \exp(-\alpha_3) Shi(2\alpha_3)}{\alpha_3 \cosh(\alpha_3) - \sinh(\alpha_3)} + E_1(2\alpha_3) [1 - \exp(2\alpha_3)] \right) \quad (1.110)$$

$Shi(x)$, la fonction l'intégrale du sinus hyperbolique, $E_1(x)$ la fonction intégrale de l'exponentiel,

$\alpha_3 = \frac{R}{2L}$ et R le parcours électronique.

Vu les réserves soulevées par Pasmann sur ce modèle [57], Donolato a proposé un autre modèle pour calculer le contraste de dislocation perpendiculaire à la surface en tenant compte de son rayon [58]. Il finira par donner l'expression du contraste suivante:

$$c(b_1, \varepsilon) = \frac{\gamma}{\pi} \int_0^{\infty} \varepsilon^{-1} J_1(k \varepsilon) \exp\left(\frac{b_1^2 k^2}{4}\right) \left(1 - \frac{F(b_1 \mu)}{F(b \lambda)}\right) k^{-2} dk \quad (1.111)$$

$$\mu^2 = k^2 + \lambda^2, \quad \lambda = 1/L$$

$$F(t) = \exp\left(\left(t/2 - p_1\right)^2\right) \operatorname{erfc}\left(t/2 - p_1\right) \quad (1.112)$$

avec, $p_1 = 0.3\sqrt{7.5}$, $b_1^2 = \frac{R^2}{7.5}$ (R le parcours électronique) et ε le rayon de la dislocation.

Avec ce modèle Donolato a montré que les réserves soulevées par Pasmann sont dues uniquement à la négligence du rayon de la dislocation.

1.5.8 Contraste EBIC de Joints de grain

Pour le contraste des joints de grains, la littérature montre l'existence de plusieurs modèles pour décrire le contraste d'un joint de grain. Cependant, deux modèles ont été extensivement utilisés : le modèle de Marek [62] qui découle directement de l'approche que nous venons d'exposer dans le paragraphe précédent et le modèle de Donolato [63], où il a considéré une vitesse de recombinaison arbitraire sur le joint de grain.

1.5.8.1 Modèle de Marek

Le schéma utilisé par Marek pour modéliser le contraste d'un joint de grain dans un semiconducteur semi-infini est présenté sur la figure 1.12. Pour pouvoir calculer le signal EBIC du joint de grain (le contraste), l'auteur a posé les hypothèses suivantes:

- La zone déserte du contact Schottky est négligée.
- La génération de paires est supposée uniforme dans une sphère de rayon R_s , tangente à la surface.
- Le joint de grain est considéré comme une distribution bidimensionnelle homogène de défauts ponctuels caractérisés par une force constante $\gamma(\vec{r}_0) = \gamma_0$

Les conditions aux limites sont :

$$\Delta p(z=0) = 0 ; \Delta p(\infty) = 0 \quad (1.113)$$

Le courant EBIC collecté est calculé à l'aide de l'expression 1.102:

$$I = -qD_p \int \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Delta p}{\partial z} \Big|_{z=0} dx dy = I_0 - I^* \quad (1.114)$$

Le contraste du joint de grain est définie par: $c = \frac{I^*}{I_0}$ (1.115)

Ce contraste est obtenu en intégrant les contributions de tous les défauts ponctuelles du joint. Cela est effectué en utilisant l'expression (1.107) obtenue dans le cadre des mêmes approximations (génération uniforme, zone déserte négligée) et pour les mêmes conditions aux limites.

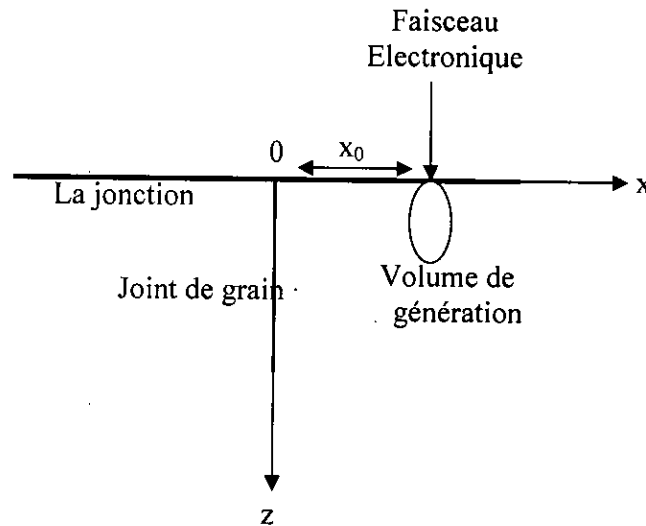


Figure 1.13 Schéma illustratif utilisé par Marek.

$$c(x) = \int_0^{\infty} dz_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_0 i^*(y_0, z_0) \quad (1.116)$$

où, $i^*(y_0, z_0)$ est la fraction de courant perdue par la recombinaison sur le défaut ponctuel situé en $(x_0 = 0, y_0, z_0)$.

Le maximum de contraste est obtenu quand le faisceau électronique est à l'aplomb du joint de grain.

$$c_{\max} = c(x = 0, R) \quad (1.117)$$

La largeur à mi-hauteur correspondant à l'abscisse $x = w_{0,5}$ pour la quelle $i_{GB \max}^*$ diminue de moitié:

$$c(x = w_{0,5}, R) = 0.5c_{\max} \quad (1.118)$$

En traçant la variation du maximum de contraste et la variation de la largeur à mi-hauteur en fonction de l'énergie du faisceau pour différentes valeurs de L , Marek a pu dégager les remarques suivantes :

- 1- c_{\max} augmente avec l'énergie du faisceau incident E_0 augmente. Cela s'explique par le fait que les porteurs générés à des distances de plus en plus grandes quand E_0 croit, la probabilité de leur recombinaison au joint de grain avant collecte à l'interface métal semiconducteur augmente. De plus, pour les longueurs de diffusion L supérieures au rayon de la sphère de génération R_{Sph} , le maximum de contraste varie rapidement avec l'énergie E_0 .
- 2- La largeur à mi hauteur augmente avec l'augmentation de L . Ce résultat semble en contradiction avec celui obtenu pour un défaut ponctuel. Dans ce dernier cas, la résolution est quasi-indépendante de la longueur de diffusion et elle est exclusivement déterminée par la valeur du parcours R [14].
- 3- Les courbes peuvent être utilisées comme abaques pour la détermination de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

1.5.8.2 Modèle de Donolato

Donolato [63] a proposé un autre modèle pour le calcul du contraste d'un joint de grain plus élargi à celui lui de Marek. La géométrie considérée est la même que celle décrite par la figure 1.13.

Les porteurs de charge sont déterminés par la résolution de l'équation de continuité

$$\nabla^2 (D_p \Delta p(r)) - \frac{1}{\tau} \Delta p(r) = -g(r) \quad (1.119)$$

$\Delta p(r)$ est l'excès de trous, D_p et τ présentent leur coefficient de diffusion et durée de vie respectivement. $g(r)$ est la fonction de génération.

La zone diserte du contact redresseur est négligée. Le Joint de grain est considéré sans épaisseur. La vitesse de recombinaison au joint v_s est définie par la condition aux limites :

$$D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=0^+} - D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=0^-} = v_s \Delta p(x=0) \quad (1.120)$$

Les autres conditions aux limites sont:

$$\Delta p(\vec{r})|_{x=0^+} = \Delta p(\vec{r})|_{x=0^-} \tag{1.121}$$

$$\Delta p(\vec{r})|_{z=0} = 0$$

Le courant peut être exprimé selon Donolato:

$$I = qD_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Delta p}{\partial z} |_{z=0} dx dy \tag{1.122}$$

Supposant que $G(\vec{r}, \vec{r}')$ est la fonction de Green de l'équation (1). Le courant peut être exprimé alors:

$$I = \int_{\nu'} g(\vec{r}') Q(\vec{r}') d\nu' \tag{1.123}$$

avec,

$$Q(\vec{r}') = D_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial G}{\partial z} |_{z=0} dx dy \tag{1.124}$$

La fonction $Q(\vec{r}')$ représente la probabilité de collecte du courant pour une unité de source ponctuelle au point r' .

En terme général, le courant sera donné par:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} Q(x', z') h(x', z') dz' \tag{1.125}$$

où, $h(x', z') = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x', y', z') dy'$

Pour calculer le courant, il suffit de connaître la forme de la fonction de génération. La fonction $Q(\vec{r}')$ obtenue par Donolato s'écrit sous la forme:

$$Q(x', z') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{\mu^2} \left[1 - \frac{s}{2\mu + s} \exp\left(\frac{\mu}{x'}\right) \right] \sin(xz') dk \tag{1.126}$$

La solution de l'équation de continuité se fait en utilisant la méthode des fonctions de Green.

L'expression finale du contraste est exprimé par:

$$c(x_0) = \frac{1}{I_0} \frac{2s}{\pi} \int_0^{\infty} dk \frac{k}{\mu^2 (2\mu + s)} \int_0^{\infty} dz \sin kz \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mu|x|) h(x - x_0, z) dx \quad (1.127)$$

où,

$$s = \frac{v_s}{D} \quad \text{et} \quad \mu = \sqrt{k^2 + \frac{1}{L^2}}$$

I_0 est l'intensité électrique collectée en absence du joint de grain, x_0 repère l'abscisse du point d'impact du faisceau incident. Sont expression est donnée par:

$$I_0 = \int_0^{\infty} \left\{ \exp(-z/L) \int_{-\infty}^{+\infty} h(x - x_0, z) dx \right\} dz \quad (1.128)$$

La fonction $h(x-x_0, y)$ est la projection de la fonction $g(x, y, z)$ (fonction de génération) sur le plan xz :

$$h(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x, y, z) dy \quad (1.129)$$

Vu la difficulté d'obtention de la fonction $h(x, z)$, Donolato propose d'utiliser deux propriétés intégrales du profil de contraste pour déduire la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison de porteurs minoritaire au joint. Les deux propriétés sont: l'aire A_s et la variance σ^2 du profil définies par les relations suivantes:

$$A_s = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x_0) dx_0 \quad (1.130)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{+\infty} c(x_0) x_0^2 dx_0 \quad (1.131)$$

Selon Donolato:

$$A_s = \frac{1}{I_0} \int_0^{\infty} g(z) a_1(z) dz \quad (1.132)$$

avec,

$$a_1(z) = \frac{4s}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{\mu^3(2\mu+s)} \sin(kz) dk \quad (1.133)$$

et

$$\sigma^2 = \frac{1}{A_s J_0} \int_0^{+\infty} g(z) a(z) [\sigma_0^2(z) - \sigma_h^2(z)] dz \quad (1.134)$$

$$\sigma_0^2(z) = \frac{1}{a_1(z)} \cdot \frac{8s}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k}{\mu^5(2\mu+s)} \sin(kz) dk \quad (1.135)$$

$$\sigma_h^2(z) = \frac{1}{g(z)} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 h(x, z) dx \quad (1.136)$$

On peut noter que l'aire A_s ne dépend que de la distribution en profondeur $g(z)$.

La variance σ^2 est constituée de deux contributions:

σ_0^2 : ce terme correspond à un faisceau de section nulle pas d'élargissement latérale: ($\sigma_h^2 = 0$),

σ_0^2 est de l'ordre de L^2 .

σ_h^2 traduit l'élargissement latérale, il est de l'ordre de quelque microns. Pour des matériaux à grand longueur de diffusion σ_h^2 peut être négligé devant σ_0^2 . La variance σ^2 du profil se réduit donc a:

$$\sigma^2 = \frac{1}{A I_0} \int_0^{+\infty} g(z) a(z) \sigma_0^2 dz \quad (1.137)$$

Il en résulte que les deux paramètres A et σ^2 sont indépendants de distribution latérale des porteurs en excès. Donolato a utilisé la fonction de génération donnée par Everhart et Hoff [6] pour tracer des abaques qui lui ont permis de déduire en même temps la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison au joint et ce, à partir de la mesure expérimental de A et σ^2 .

1.6 Conclusion

L'interaction d'un faisceau électronique avec un semiconducteur donne naissance à plusieurs processus physiques. Ces processus nous ont permis de déterminer les caractéristiques physico-chimiques de la matière.

Le microscope électronique à balayage en mode EBIC ou CL est un utile très puissant pour la détermination de la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison surfacique des semiconducteurs. De plus, il permet l'analyse qualitative et quantitative de l'activité électrique des défauts dans les semiconducteurs.

Chapitre 2

Modélisation du signal EBIC
et CL, effet des fonctions de génération
et des parcours électroniques

2.1 Introduction

La modélisation du signal EBIC (CL) dépend de plusieurs paramètres physiques tels que la longueur de diffusion, la densité volumique du semiconducteur, la distribution des porteurs de charge générés par le bombardement électronique, la forme du volume de génération et le parcours électronique.

L'effet du choix du volume de génération sur la modélisation du signal EBIC (CL) a fait l'objet de plusieurs études [28, 35, 69, 70]. Cependant, il y a peu d'études consacrées à l'effet du choix des parcours électroniques sur la modélisation de ce signal [28, 71].

La modélisation du signal EBIC (CL) nécessite la connaissance de la distribution spatiale des porteurs de charge dans le volume de génération. Cette distribution est calculée à partir de l'équation de continuité, dont la résolution mathématique est difficile, surtout, si les défauts (dislocations, joints de grain) sont pris en considération. Les solutions analytiques sont obtenues si la fonction de génération est ponctuelle ou constante [54,55]. Par ailleurs, l'utilisation de ces deux fonctions a été alliée aux parcours électroniques existants sans tenir compte de spécificité de ces deux formes de générations.

Dans un travail antérieur [71], il a été démontré que le choix du parcours électronique influe considérablement sur les courbes d'efficacité de collecte EBIC calculées pour une diode Schottky à base de germanium où une méthode d'extraction de parcours électroniques phénoménologiques pour ces deux fonctions de génération a été proposée. En plus, le calcul de l'efficacité de collecte EBIC avec les mêmes modèles, pour ces fonctions de génération accordées à leurs parcours électroniques générés, donne exactement le même résultat trouvé en utilisant les fonctions de génération réalistes (gaussienne et polynomiale) accordées à leurs parcours. Dans ce chapitre, nous avons adopté la même approche pour l'extraction du parcours électronique de la fonction de génération ponctuelle et constante en utilisant les différents montages de la technique EBIC et de la cathodoluminescence. La validité des parcours extraits a été testée pour différentes valeurs de la longueur de diffusion et des vitesses de recombinaison surfacique. Enfin, l'effet de ces parcours sur le calcul des contrastes EBIC des défauts est examiné.

2.2 Effet des fonctions de génération et des parcours électroniques sur les courbes de l'efficacité de collecte

Pour pouvoir mettre en évidence l'effet du choix de la fonction de génération et du parcours électronique adopté pour le calcul théorique de l'efficacité de collecte en mode EBIC

en utilisant la configuration perpendiculaire (figure 1.6d), nous avons utilisé quatre fonctions de génération (chapitre 1.2.4). Ces fonctions sont : la fonction de génération gaussienne (g_G), polynomiale (g_{Py}), constante (g_{con}) et ponctuelle (g_p). Pour les parcours électroniques, nous avons considéré celui de Kyzer [4] noté R_K et celui de Everhart et Hoff [6] noté R_{EH} . Ensuite, nous avons calculé le signal de l'efficacité de collecte en utilisant les modèles WW et TT tout en testant les différentes combinaisons entre les fonctions de génération et les parcours électroniques.

Le dispositif étudié est une diode à base de GaAs avec un dopage de l'ordre de 10^{16} cm^{-3} . La largeur de la zone de charge d'espace (z_d) est alors de l'ordre de $0.23 \mu\text{m}$ [8]. L'épaisseur de la couche métallique (z_m) est de l'ordre de 250 \AA [8]. Les valeurs de ces grandeurs seront utilisées dans nos calculs. L'effet de z_m et de z_d sur le calcul des courbes de l'efficacité de collecte EBIC a été examiné en détail dans des études antérieures [8, 22, 64, 71].

Pour alléger la lecture, on a noté par exemple la courbe de l'efficacité de collecte calculée avec la fonction g_G et le parcours R_K par g_G-R_K , la même notation est utilisée avec les autres courbes.

2.2.1 Modèle Wu et Wittry

Les expressions mathématiques de l'efficacité de collecte pour la fonction g_G sont données par les équations (1.49) à (1.52). Cependant, les expressions mathématiques de l'efficacité de collecte pour les fonctions g_p , g_{con} et g_{Py} sont donnée par Beggah [71] et elles sont rappelées dans l'annexe 1.

En premier lieu, nous nous intéressons aux courbes de l'efficacité de collecte calculées en utilisant la fonction de génération gaussienne et polynomiale. Chacune des fonctions est accordée à son propre parcours électronique. Ensuite, on permute ce parcours pour voir son effet sur le calcul de l'efficacité de collecte. Le résultat de cette procédure est présenté sur la figure 2.1. Une concordance est constatée entre les courbes calculées par g_G-R_K et $g_{Py}-R_{EH}$ sur toute la gamme d'énergie étudiée. Cependant, celles calculées par g_G-R_{EH} et $g_{Py}-R_K$ s'écartent largement des deux premières qui seront considérées désormais comme courbes de référence. Pour le reste de cette étude nous avons choisi g_G-R_K comme courbe de référence. Cet exemple, montre clairement que le choix du parcours électronique influe considérablement sur le calcul de l'efficacité de collecte.

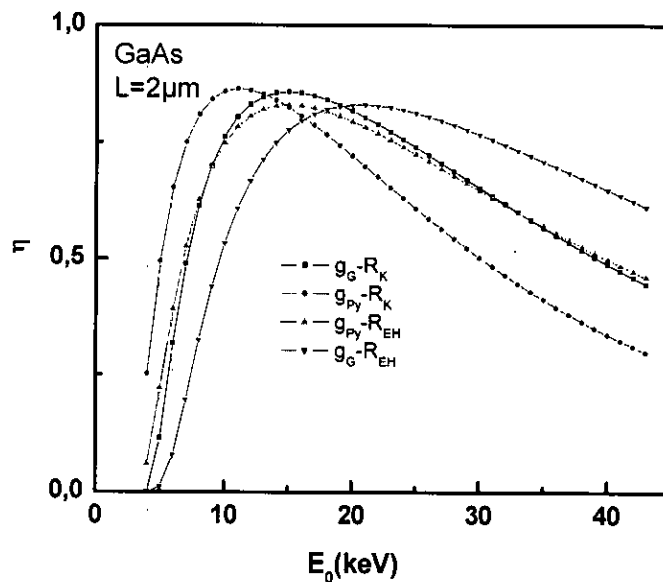


Figure 2.1: Efficacité de collecte calculée par g_G-R_K , $g_{py}-R_{EH}$, g_G-R_{EH} et $g_{py}-R_K$ pour une diode de GaAs avec $z_m = 250 \text{ \AA}$ et $z_d = 0.23 \text{ \mu m}$.

En deuxième lieu, nous nous intéressons aux courbes de l'efficacité de collecte calculées avec g_{con} et g_p connectées avec R_K et R_{EH} et nous les comparons à la courbe de référence. Les figures 2.2a, b, présentent la variation des courbes de l'efficacité de collecte calculées par ces deux fonctions de génération connectées à ces deux parcours électroniques et celle de la référence en fonction de E_0 pour une diode de GaAs. Pour les deux fonctions, quelque soit le parcours électronique utilisé, leurs courbes s'écartent de celle de la référence.

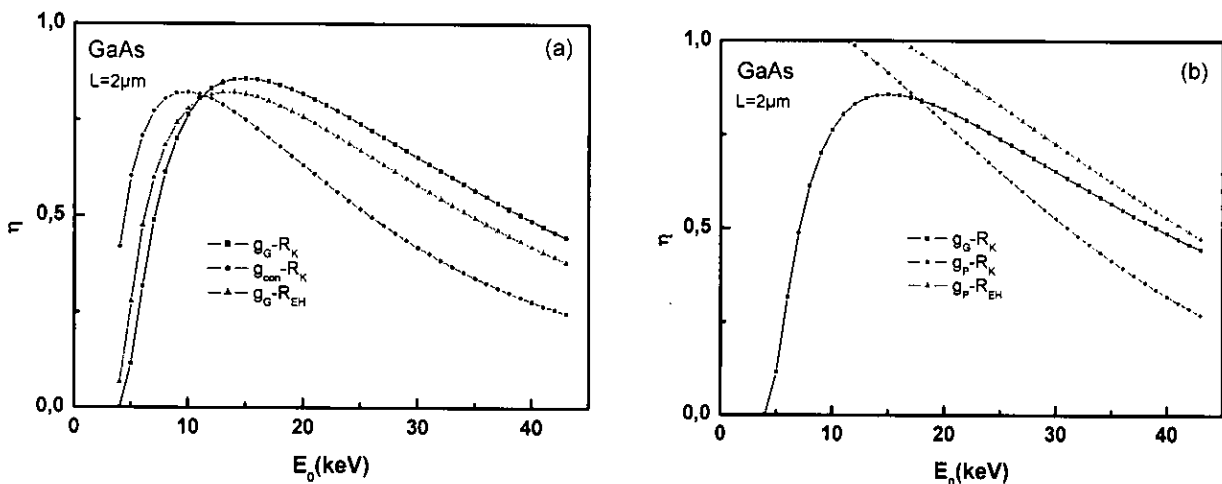


Figure 2.2: Effet des fonctions de génération sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250 \text{ \AA}$ et $z_d = 0.23 \text{ \mu m}$. (a) fonction de génération constante et (b) fonction de génération ponctuelle.

Pour pouvoir réduire l'écart existant entre les courbes calculées par g_{con} ou g_p et celle de la référence, une modification des paramètres de fit (par exemple la longueur de diffusion) s'avère inévitable. Un exemple de cette modification est présenté sur les figures 2.3a, b pour le

cas de g_{con} et g_p respectivement. L'obtention d'un fit similaire à celui obtenu par g_G-R_K à partir d'un modèle basé sur la fonction de génération constante ou ponctuelle connectée avec R_K ou R_{EH} , nécessite l'utilisation des valeurs de la longueur de diffusion différentes de celles utilisées dans le modèle g_G-R_K . Or, cette quantité est une identité du matériau étudié ; elle ne devrait en aucun cas dépendre du modèle utilisé. En conséquence, il faudrait penser à varier un autre paramètre tel que le parcours électronique par exemple.

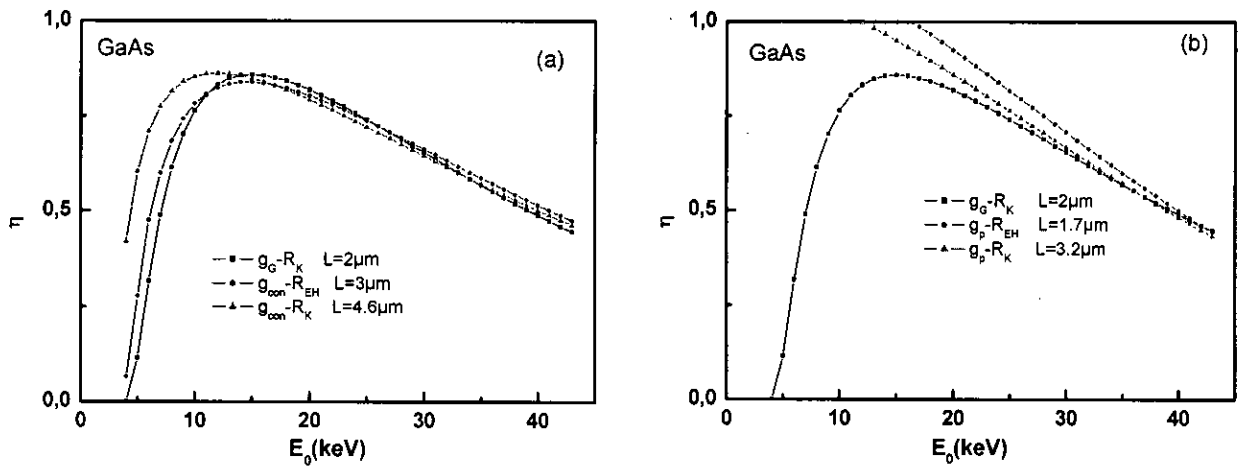


Figure 2.3: Effet des fonctions de génération sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250 \text{ \AA}$ et $z_d = 0.23 \text{ \mu m}$. (a) fonction de génération constante et (b) fonction de génération ponctuelle.

2.2.2 Modèle Tabet et Toronto

Les expressions mathématiques de l'efficacité de collecte pour g_G sont données par les équations (1.63) à (1.79). Les mêmes démarches mathématiques sont utilisées pour obtenir les expressions de l'efficacité de collecte pour le cas de g_{con} et g_p . Les détails de calcul pour ces deux fonctions de générations ont été donnés par Beggah [71]. L'essentiel de ces calculs sont présentés dans l'annexe 2.

Deux vitesses de recombinaison de porteurs de charge à l'interface métal semiconducteur sont considérées, $S_p = 0 \text{ cm/s}$ et $S_p = 10^6 \text{ cm/s}$ (les porteurs de charges dans notre cas sont les trous, car, on a considéré un semiconducteur de type n).

Les courbes de l'efficacité de collecte calculées avec différentes fonction de génération et parcours électronique, $g_{con}-R_K$, $g_{con}-R_{EH}$, g_p-R_K et g_p-R_{EH} sont écartées de la courbe de référence (g_G-R_K) comme il est montré sur les figures 2.4a-d pour une diode de GaAs. Pour ramener les courbes de l'efficacité de collecte calculées par ces deux fonctions de génération à la courbe de référence, il faut modifier la valeur de la longueur de diffusion.

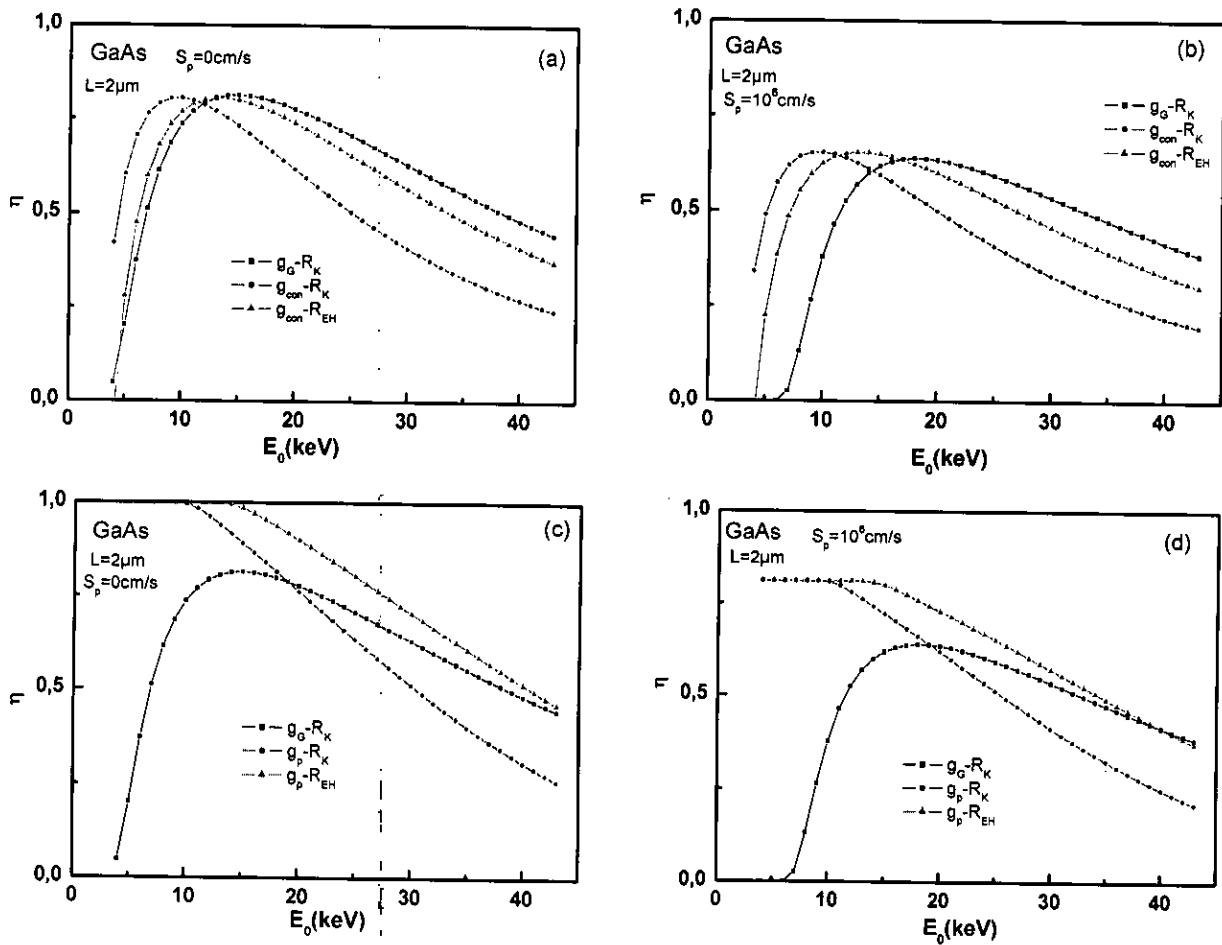


Figure 2.4: Effet des fonctions de génération et des parcours électroniques sur le profil de l'efficacité de collecte pour une diode de GaAs avec $z_m = 250 \text{ \AA}$ et $z_d = 0.23 \text{ \mu m}$. (a), (b) fonction de génération constante et (c), (d) fonction de génération ponctuelle.

Les valeurs de la longueur de diffusion qu'il faut utiliser avec g_c et g_p pour ramener leurs courbes de l'efficacité de collecte à la courbe de référence sont présentées sur le tableau 2.1. Les résultats montrent que les valeurs de L nécessaires pour cette procédure ne dépendent pas beaucoup de la valeur de la vitesse de recombinaison des porteurs de charge à l'interface métal-semiconducteur.

Tableau 2.1: Longueur de diffusion nécessaire pour que les courbes EBIC calculées avec différentes fonctions de génération et parcours électroniques se coïncident.

		g_G-R_K	$g_{con}-R_K$	$g_{con}-R_{EH}$	g_p-R_K	g_p-R_{EH}
$S=0 \text{ cm/s}$	$L(\mu\text{m})$	2	5	3	3.5	2
$S=10^6 \text{ cm/s}$	$L(\mu\text{m})$	2	4.7	2.8	3.3	1.8

2.3 Détermination des parcours phénoménologique

Les courbes de l'efficacité de collecte montrent qu'il y a un désaccord entre celles calculées avec g_G-R_G et celles calculées avec $g_P-R_K(R_{EH})$ ou $g_{con}-R_K(R_{EH})$ quelque soit le modèle de calcul utilisé. Pour enlever ce désaccord, il est nécessaire de déterminer un parcours électronique approprié à ces deux fonctions de génération, on l'appelle "parcours phénoménologique R_{ph} ". Afin de le déterminer, nous avons appliqué la même procédure adoptée dans [71]:

Nous avons calculé, pour des valeurs de l'énergie entre 4keV et 40keV (pas 1KeV), l'efficacité de collecte en utilisant le modèle WW avec g_G et R_K . Pour la même valeur de l'énergie, nous calculons l'efficacité de collecte en utilisant le même modèle avec g_{con} (g_P) et R_K et l'erreur relative entre les deux valeurs $\frac{|\eta_{ph}-\eta_g|}{\eta_g}$. Si elle est supérieure à 2%, nous varions la valeur du parcours électronique et nous recalculons la valeur de l'efficacité de collecte. Cette procédure est répétée jusqu'à ce que cette condition est satisfaite. Après avoir déterminé pour chaque valeur de l'énergie la bonne valeur de R_{ph} avec g_{con} (g_P), nous avons tenté de chercher une relation reliant le parcours électronique et l'énergie des électrons incident E_0 en utilisant la formule universelle du parcours électronique $R = \alpha_1 E_0^\beta$. Les constantes α_1 et β sont déterminées par une régression linéaire.

L'application de cette procédure nous a donné les expressions suivantes:

$$R_{phc}(\mu m) = \frac{5.6 \times 10^{-2}}{\rho(g/cm^3)} E_0^{1.67} (keV) \quad (2.1)$$

pour le cas de la fonction de génération constante.

$$R_{php}(\mu m) = \frac{0.329 \times 10^{-2}}{\rho(g/cm^3)} E_0^{1.19} (keV) \quad (2.2)$$

pour le cas de la fonction de génération ponctuelle.

Les figures 2.5a, b présentent un exemple de calcul de l'efficacité de collecte en utilisant les parcours extraits pour g_{con} et g_P pour une diode de GaAs et de Ge, pour une longueur de diffusion $L=2\mu m$. Les courbes montrent la disparition de l'écart existant entre les différentes courbes pour les deux diodes. Si les deux fonctions de génération sont connectées à un parcours électronique adéquat, on obtient des résultats similaires à ceux obtenues avec les fonctions de génération réalistes comme la gaussienne.

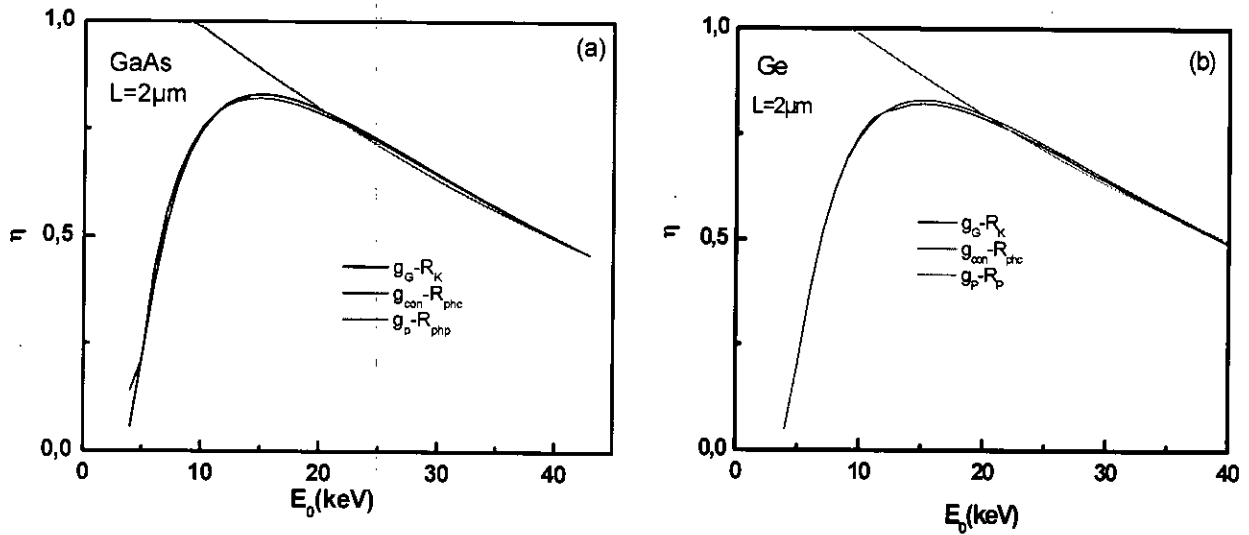


Figure 2.5: Effet du parcours phénoménologique sur les courbes de l'efficacité de collecte pour une diode de (a) GaAs et (b) Ge, avec $z_m = 250 \text{ \AA}$ et $z_d = 0.23 \text{ μm}$.

Le parcours électronique extrait pour g_{con} est indépendant de la longueur de diffusion du matériau. Par contre, ce n'est pas le cas de celui extrait pour g_p comme il est montré sur la figure 2.6. Cette dépendance est attribuée à la non satisfaction de la condition $L \gg R$ qui est nécessaire pour utiliser l'approximation de la génération ponctuelle.

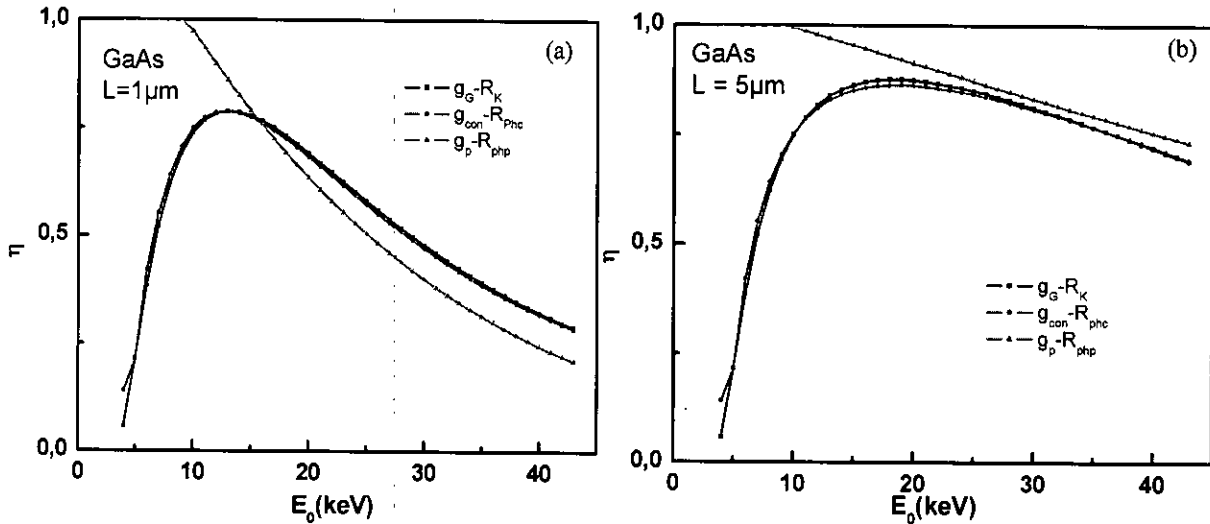


Figure 2.6: Effet des parcours phénoménologiques sur les courbes de l'efficacité de collecte.

Pour satisfaire cette condition, il est recommandé d'utiliser des grandes valeurs de la longueur de diffusion, mais, il est montré que ce montage EBIC n'est pas adéquat pour la détermination des grandes longueurs de diffusion et il est remplacé par autre montage.

La configuration perpendiculaire doit être utilisée avec précaution car son parcours phénoménologique, dans le cas du modèle de la fonction de génération ponctuelle, dépend de la longueur de diffusion.

Afin de trancher sur la dépendance de R_{phc} avec la longueur de diffusion et la nature du semiconducteur (composite ou élémentaire), on a tracé sur les figures 2.7a-c la variation des courbes de l'efficacité de collecte en fonction de E_0 , calculées avec g_G-R_K et $g_{con}-R_{phc}$ pour différents semiconducteurs et différentes longueurs de diffusion.

Les résultats montrent un bon accord entre les courbes de l'efficacité de collecte calculées par g_G-R_K et celles calculées par $g_{con}-R_{phc}$ pour les trois semiconducteurs étudiés. Donc, le parcours électronique extrait pour la fonction de génération constante est indépendant de la longueur de diffusion et du matériau étudié.

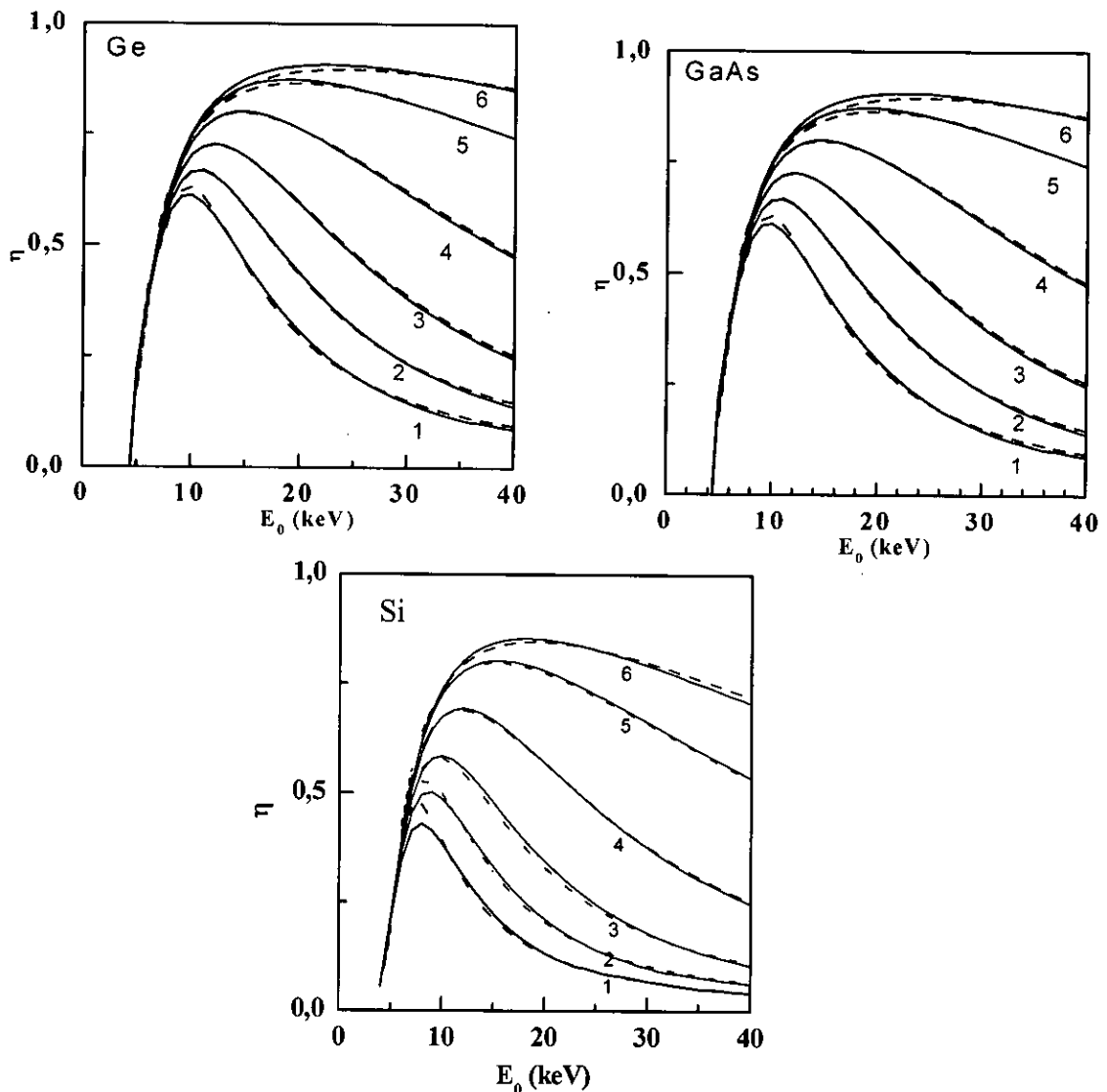


Figure 2. 7: L'effet de la longueur diffusion sur les efficacités de collectes pour le cas des diodes Ge, GaAs et Si.

(1) $L=0.2\mu\text{m}$, (2) $L=0.4\mu\text{m}$, (3) $L=0.8\mu\text{m}$, (4) $L=2\mu\text{m}$, (5) $L=6\mu\text{m}$, (6) $L=12\mu\text{m}$. Lignes continues présentent l'efficacité calculée par g_G-R_K et lignes discontinues présentent efficacité de collecte calculée par $g_{con}-R_{phc}$

Les figures 2.8a-c montrent un exemple de fit des points expérimentaux pour différents semiconducteurs obtenus par le modèle de WW et TT avec g_G-R_K et $g_{con}-R_{phc}$ avec les mêmes paramètres de fit. Une bonne concordance est obtenue pour toutes les courbes de l'efficacité de collecte. Ceci montre que le bon choix du parcours électronique peut conduire à des résultats similaires à ceux obtenus avec des formes de génération plus réaliste telle que la génération gaussienne.

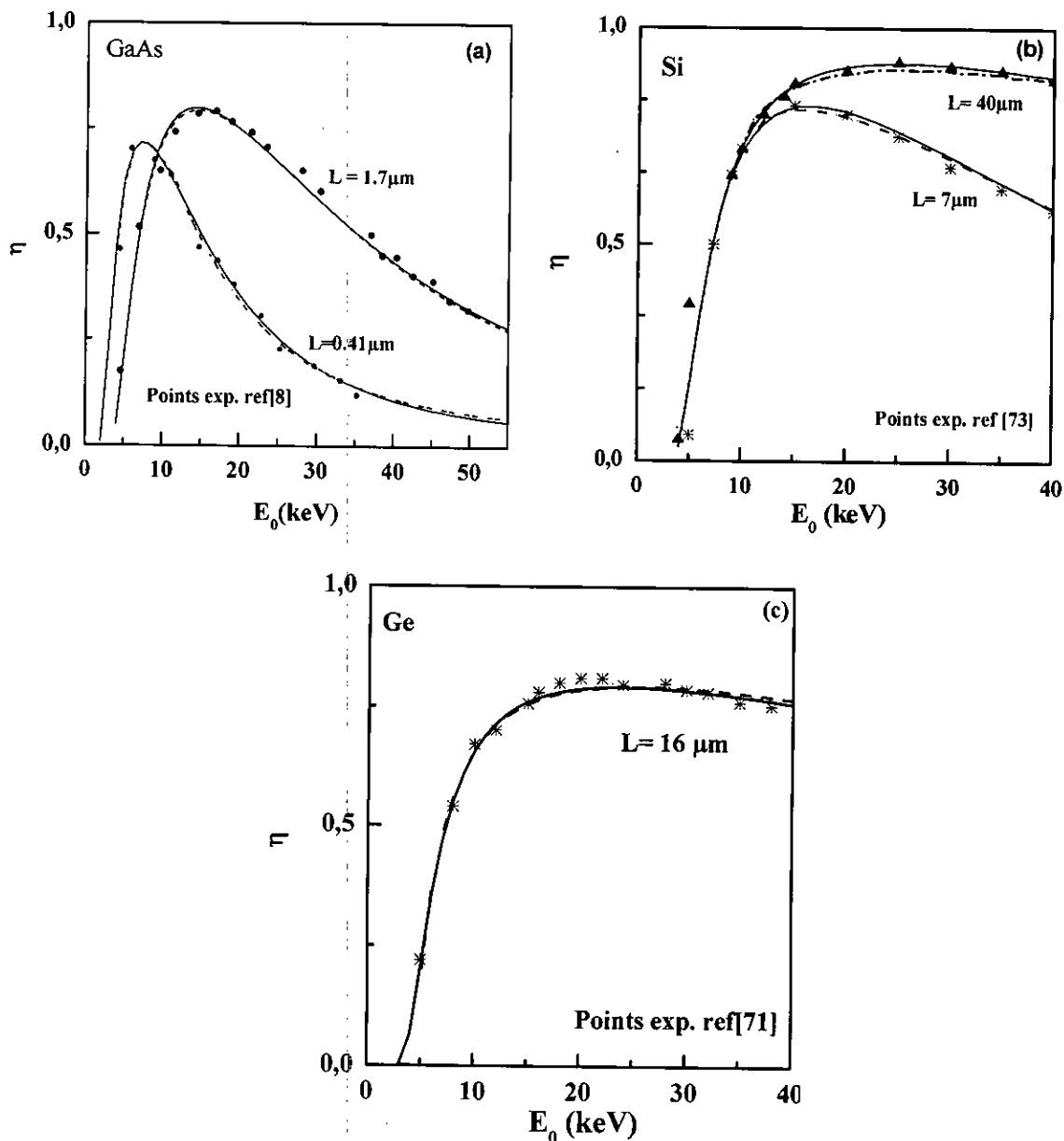


Figure 2. 8: Fit des point expérimentaux pour différents semiconducteurs (a) Modèle WW, (b) et (c) Modèle TT.

Ligne continue présente l'efficacité de collecte calculée par g_G-R_K et ligne discontinu présente l'efficacité de collecte calculée par $g_{con}-R_{phc}$

2.4 Configuration parallèle

La configuration EBIC où le faisceau électronique est parallèle à la jonction de collecte a été utilisé pour la détermination de la longueur de diffusion du semiconducteur et/ou la vitesse de recombinaison des porteurs de charge à sa surface [18]. Les études antérieures sur le signal EBIC obtenu avec cette configuration ont aboutie à des conditions à respecter pour minimiser l'erreur commise lors de l'extraction de la longueur de diffusion [65–68]. Dans cette partie, on va essayer de montrer l'effet du choix des parcours électroniques sur le signal EBIC calculé et de déterminer les bons parcours électroniques qu'il faut utiliser avec la fonction de génération constante et ponctuelle.

2.4.1 Modèle étudié

Dans cette configuration le faisceau électronique est parallèle au plan de collecte (jonction *p-n* ou diode Schottky) comme il est schématisé sur la figure 2.9

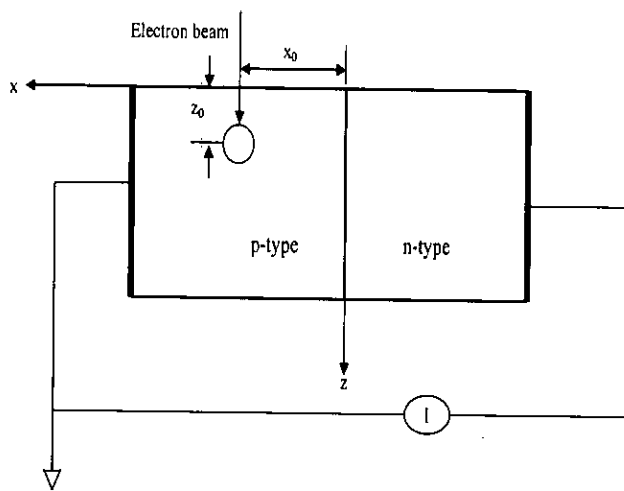


Figure 2.9: Le schéma utilisé.

Le courant collecté peut être obtenu de la résolution de l'équation de continuité des porteurs minoritaires avec des conditions aux limites appropriées. Si le semiconducteur est de type *p*, l'équation de continuité est donnée par:

$$D_n \nabla^2 \Delta n(x, z) - \frac{1}{\tau} \Delta n(x, z) = -g(x, z) \quad (2.3)$$

avec, Δn l'excès des électrons, $g(x, z)$ la fonction de génération, τ la durée de vie des porteurs minoritaires et D_n leur coefficient de diffusion. Les conditions aux limites sont:

$$\Delta n(x, z) = 0 \text{ à } x = 0 \quad (2.4.a)$$

$$\frac{\partial \Delta n(x, z)}{\partial z} = \frac{v_T}{D} \cdot \Delta n(x, z) \text{ à } z = 0 \quad (2.4.b)$$

Le courant EBIC peut être exprimé comme suit:

a. Génération ponctuelle, g_p [28]

$$\begin{aligned} \frac{I(x)}{I_0} = I_N^p(x) &= \exp\left(-\frac{x}{L}\right) + \frac{2 \cdot S}{\pi} \\ &\times \int_0^{\infty} \frac{u du \exp\left(-\sqrt{u^2+1} \cdot z_1 / L\right)}{(u^2+1)(S+\sqrt{u^2+1})} \sin\left(\frac{u \cdot x}{L}\right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$z_1 = 0.3R \text{ (R étant le parcours électronique), } S = v_T \cdot L/D \quad (2.6)$$

avec,

$$I_0 = qG_0 \quad (2.7)$$

b. Génération uniforme dans un volume sphérique de Rayon R_{Sph} , g_s

$$\begin{aligned} I_N^s(x) &= \frac{3L^2}{R_{Sph}^3} \left[R_{Sph}^3 \cosh\left(\frac{R_{Sph}}{L}\right) - L \sinh\left(\frac{R_{Sph}}{L}\right) \right] * \\ &\left[\exp\left(-\frac{x}{L}\right) - \left(\frac{2 \cdot S}{\pi \cdot L} \times \int_0^{\infty} \frac{u du \exp\left(-\sqrt{u^2+1} \cdot z_2 / L\right)}{(u^2+1)(S+\sqrt{u^2+1})} \sin\left(\frac{u \cdot x}{L}\right) \right) \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$z_2 = R_{Sph} \text{ et } R_{Sph} = 0.5R \text{ (R étant le parcours électronique)} \quad (2.9)$$

c. Génération uniforme dans un volume cubique de côté l , g_c [28]

$$\begin{aligned} I_N^c(x) &= \frac{2L}{l} \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \exp\left(-\frac{x}{L}\right) - \frac{8 L^2}{\pi l^2} S \times \\ &\int_0^{\infty} \frac{du \exp\left(-\sqrt{u^2+1} \cdot z_2 / L\right)}{(u^2+1)^{3/2} (S+\sqrt{u^2+1})} \sin\left(\frac{ux}{L}\right) \sinh\left(\sqrt{u^2+1} \frac{l}{2L}\right) \sin\left(\frac{ul}{2L}\right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$z_2 = l/2 \text{ et } l = R \text{ (R étant le parcours électronique)} \quad (2.11)$$

d. Génération gaussienne dans un volume sphérique [28]

$$I_N^G(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{uchu}{(u^2+1)} \left\{ \frac{\exp\left(-\frac{u^2\sigma^2}{2L^2}\right) - 0.57 \exp\left(\frac{\sigma^2}{2L^2} - \sqrt{u^2+1} \frac{z_4}{L}\right) \times \left[\frac{S}{S+\sqrt{u^2+1}} \operatorname{erfc}\left[\frac{\sigma}{\sqrt{2}L} \left(\sqrt{u^2+1} - \frac{z_4}{L} \frac{L^2}{\sigma^2}\right)\right] \right]}{\sin\left(u \frac{x}{L}\right)} \right\} \quad (2.12)$$

$$\sigma = R/\sqrt{15} \quad z_4 = 0.3R \text{ (R étant le parcours électronique).}$$

2.4.2 Effet des fonctions de générations

Les figures 2.10a, b présentent la variation du signal EBIC calculé par différentes formes de générations en fonction de la distance de scan, x, en utilisant le parcours de Kyzer et de Everhart et Hoff pour deux valeurs d'énergie des électrons primaires.

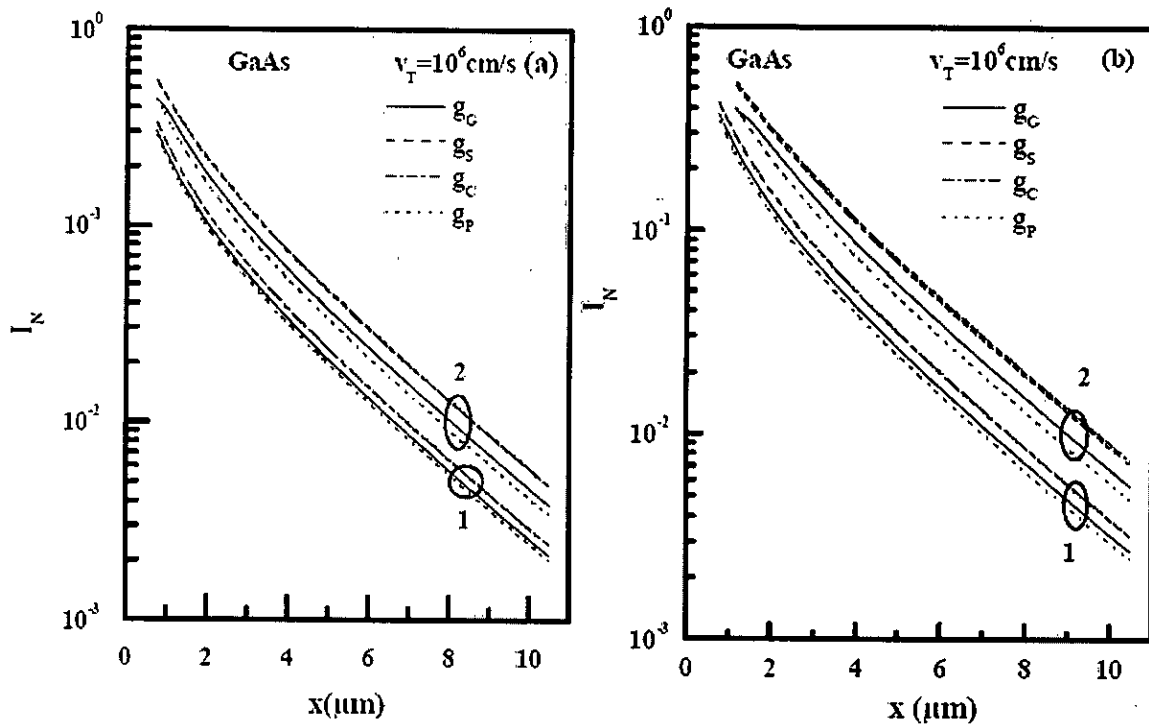


Figure 2.10: Variation du signal EBIC en fonction de la distance calculé par différentes formes de générations en utilisant le parcours électronique (a) Everhart et Hoff électron, (b) Kyzer pour un échantillon de GaAs avec $L = 3 \mu\text{m}$. Séries (1) pour $E_0 = 10 \text{ keV}$ and (2) pour $E_0 = 20 \text{ keV}$.

Les résultats obtenus montrent que les courbes calculées sont sensibles au choix du parcours électronique et à la forme de génération.

L'écart entre les courbes augmente avec l'énergie de bombardement. Cependant, si la génération est constante leurs courbes sont en bon accord quel que soit le parcours électronique et l'énergie utilisée.

Le désaccord entre les courbes calculées par g_P et g_G en utilisant R_{EH} varie de 5.5% à 11% et il varie de 8% à 14 % pour le cas de R_K . En outre, le désaccord entre les courbes calculées par g_S ou g_C et celles calculées avec g_G varie de 13% à 23% pour R_{EH} et de 18% à 23% pour R_K . Il est à noter que l'écart entre les courbes calculées par g_C et g_S ne dépassent pas 3% quelque soit l'énergie des électrons primaires et le parcours électroniques utilisé.

2.4.3 Effet de l'énergie d'excitation

Les courbes présentées sur la figure 2.10 montrent que l'écart entre les courbes est indépendant de la distance du scan. Par contre, il dépend de l'énergie d'excitation. Alors, pour mieux extraire l'effet de l'énergie d'excitation nous avons fixé la distance et varié l'énergie d'excitation.

La figure 2.11 montre la variation du signal EBIC calculé par différentes fonction de génération en fonction de l'énergie d'excitation pour le GaAs avec $L=3\mu\text{m}$, $v_T=10^6\text{cm/s}$ et $x=8\mu\text{m}$. Le choix de cette distance est fait pour satisfaire la condition $x>2L$ (pour être dans la région linéaire du profil).

Aux faibles valeurs d'énergie ($E_0<7\text{keV}$), les courbes sont en bon accord quelque soit la forme de génération et quelque soit le parcours électronique utilisé.

Si $E_0>7\text{keV}$, l'écart entre les courbes commence à devenir visible et il augmente avec l'augmentation de E_0 .

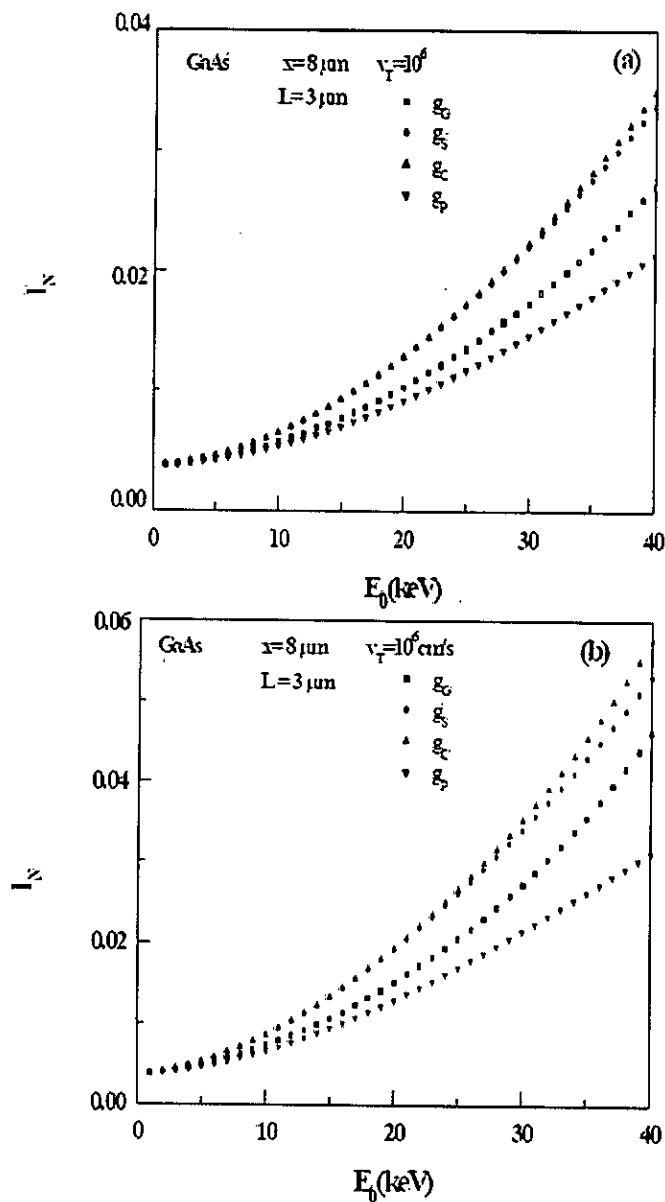


Figure 2.11: Variation du signal EBIC en fonction de l'énergie d'excitation calculé par différentes fonctions de génération (a) R_{EH} , and (b) R_K .

Les courbes calculées avec g_C et g_S sont en bon accord quelque soit la valeur de E_0 et le parcours utilisé. Par conséquent, la forme du volume de génération pour la génération constante n'affecte pas la valeur du signal EBIC calculé.

La valeur du signal EBIC dépend du modèle de la fonction de génération et du parcours électronique choisi. Donc, le choix de la fonction de génération et du parcours électronique est important pour avoir une bonne estimation (fit) de la valeur longueur de diffusion du matériau ainsi que celui de la vitesse de recombinaison.

Pour mieux voir l'effet du choix de la fonction de génération et du parcours électronique sur l'extraction de la vitesse de recombinaison surfacique par exemple, nous avons considéré la

courbe EBIC calculée avec g_G-R_K comme référence et nous avons essayé d'ajuster la valeur de v_T pour les autres courbes calculées avec g_S-R_K et g_P-R_K jusqu'à ce qu'elles soient superposées. Les résultats sont présentés sur le tableau 2.2.

Tableau 2.2: Vitesse de combinaison nécessaire pour les courbes EBIC calculées avec différentes fonctions de génération connectées avec parcours électronique de Kyzer se coïncident.

$E_0(\text{keV})$	$v_T(\text{cm.s}^{-1})$ (Gaussian)	$v_T(\text{cm.s}^{-1})$ (ponctuelle)	$v_T(\text{cm.s}^{-1})$ (Spherique)
10	$3.5 \cdot 10^5$	$3.3 \cdot 10^5$	$3.9 \cdot 10^5$
15		$3.2 \cdot 10^5$	$4.7 \cdot 10^5$
20		$3 \cdot 10^5$	$6.4 \cdot 10^5$
25		$2.7 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^6$
30		$2.5 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^6$
10	$3.5 \cdot 10^4$	$3.5 \cdot 10^4$	$3.5 \cdot 10^4$
15		$3.5 \cdot 10^4$	$3.5 \cdot 10^4$
20		$3.4 \cdot 10^4$	$3.7 \cdot 10^4$
25		$3.3 \cdot 10^4$	$3.9 \cdot 10^4$
30		$3 \cdot 10^4$	$4.1 \cdot 10^4$
10	$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$
15		$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$
20		$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$
25		$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$
30		$3.5 \cdot 10^3$	$3.5 \cdot 10^3$

Pour les faibles valeurs de v_T , les profils EBIC calculés ne dépendent pas de la forme de génération quelque soit la valeur de l'énergie d'excitation. Cependant, pour le cas des grandes valeurs de v_T , les profils EBIC calculés deviennent sensibles à la forme de génération utilisée, en particulier, pour les grandes valeurs de l'énergie d'excitation.

Les résultats de cette étude s'accordent avec ceux de Luke et al. [28]. Dans leur étude, les auteurs ont constaté qu'il faut changer soit la valeur de v_T ou de L pour que les courbes se superposent.

2.4.4 Extraction des parcours

Après avoir montré l'effet du choix des fonctions de génération et des parcours électroniques sur le signal EBIC calculé, il est nécessaire de chercher des parcours électroniques appropriés aux formes simples de génération (ponctuelle et constante).

La figure 2.12 présente l'organigramme de la procédure utilisée pour extraire le parcours électronique. Elle est appliquée pour le cas de la fonction de génération g_s . La procédure reste la même pour le cas de g_c et g_p .

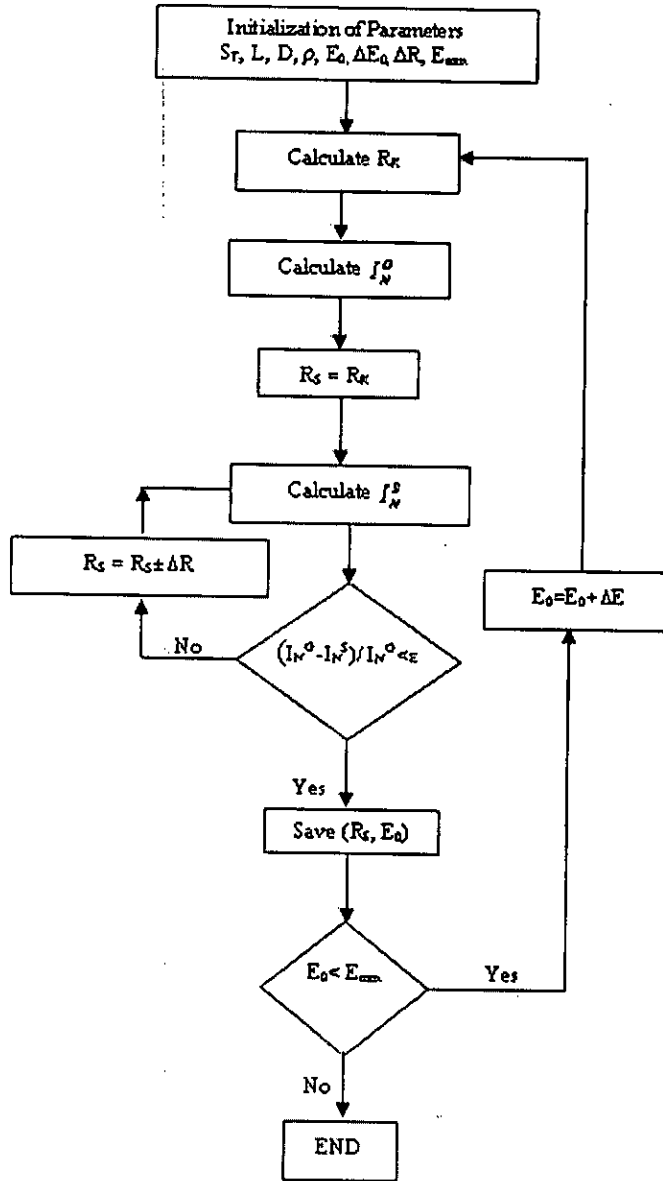


Figure 2.12: Organigramme d'extraction des parcours électroniques. I_N^G et I_N^S le courant EBIC calculé par g_G et g_s respectivement; R_K parcours de Kyser and R_S parcours extrait; E_0 l'énergie des électrons primaires et E_{max} la valeur maximale de E_0 .

L'application de la procédure décrite ci-dessus donne les parcours électroniques suivants:
 Cas de la fonction de génération uniforme avec un volume sphérique, g_s :

$$R_s(\mu\text{m}) = \frac{6.6 \times 10^{-2}}{\rho(\text{g/cm}^3)} E_0^{1.67} (\text{keV}) \quad (2.13)$$

Cas de la fonction de génération uniforme avec un volume cubique, g_c :

$$R_c(\mu\text{m}) = \frac{6.6 \times 10^{-2}}{\rho(\text{g/cm}^3)} E_0^{1.67} (\text{keV}) \quad (2.14)$$

Cas de la fonction de génération ponctuelle, g_p :

$$R_p(\mu\text{m}) = \frac{5.6 \times 10^{-2}}{\rho(\text{g/cm}^3)} E_0^{1.90} (\text{keV}) \quad (2.15)$$

Les parcours extraits sont indépendants de la vitesse de recombinaison et de la longueur de diffusion, comme il est indiqué sur les figures 2.13a, b et les figures 2.14a, b.

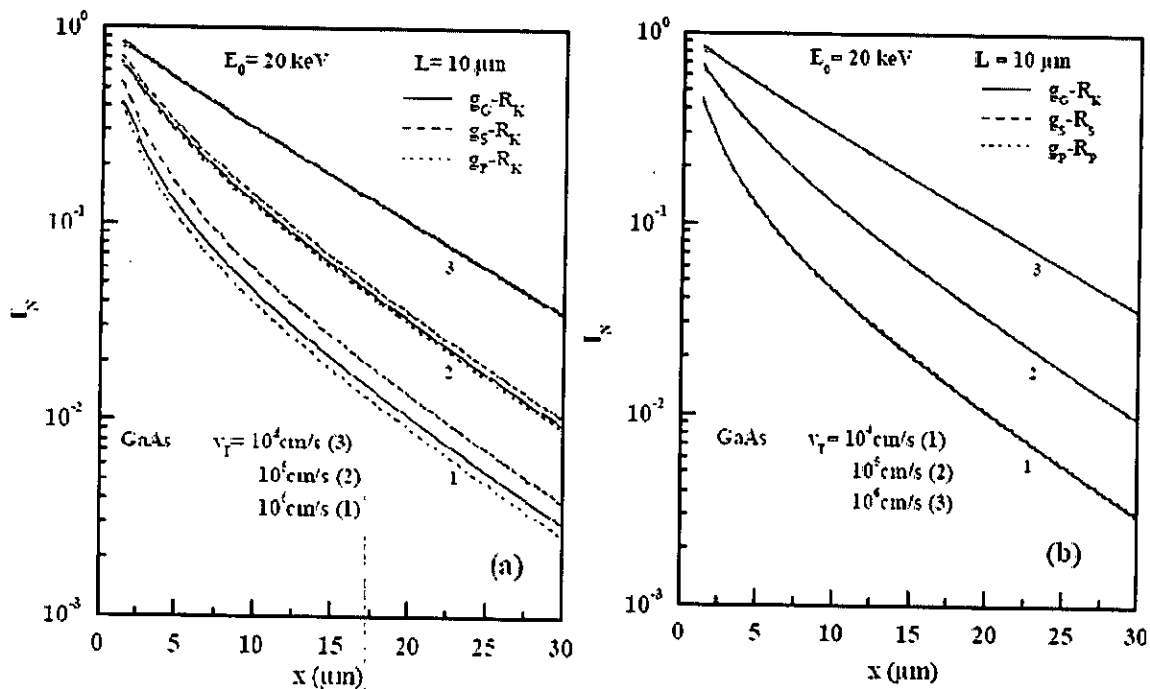


Figure 2.13: Variation du signal EBIC calculé avec différentes fonctions de génération et différentes valeurs de la vitesse de recombinaison (a) parcours Kyzer (b) chaque fonction de génération avec son propre parcours.

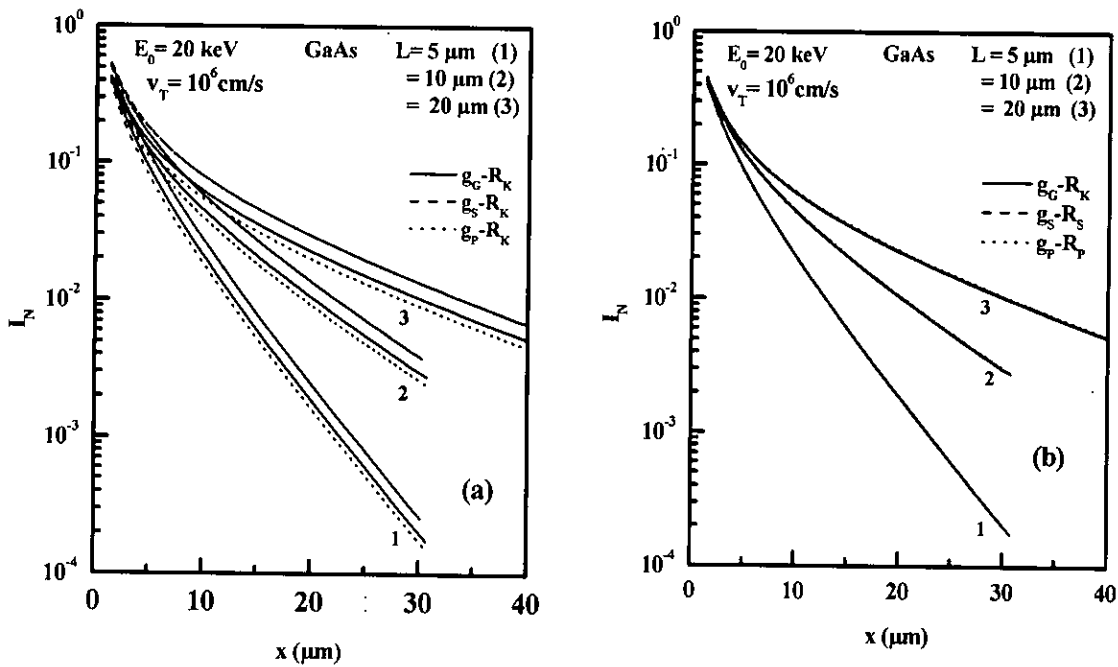


Figure 2.14: Variation du signal EBIC calculé avec différentes fonctions de génération et différentes valeurs de longueur de diffusion (a) parcours Kyzer (b) chaque fonction de génération avec son propre parcours.

Afin de pouvoir confirmer que les parcours extraits sont valables sur toute la gamme d'énergie étudiée, on a fixé la distance de scan et on a varié l'énergie d'excitation.

La figure 2.15 présente la variation du courant EBIC calculé pour différentes fonctions de génération en fonction de l'énergie d'excitation pour différents matériaux, avec $x = 8 \mu\text{m}$ pour GaAs et GaN, $x = 10 \mu\text{m}$ pour Si

Dans le cas du GaAs et GaN, les signaux calculés avec g_G-R_K , g_G-R_C , g_S-R_S et g_P-R_P sont en bon accord sur toute la gamme d'énergie. Cependant, pour le silicium, une déviation du profil calculé avec la fonction de génération ponctuelle est constatée lorsque $E_0 > 27 \text{ keV}$. Cette déviation a eu lieu aussi pour le GaAs à $E_0 > 38 \text{ keV}$ et pour le GaN à $E_0 > 42 \text{ keV}$ toujours pour la même fonction de génération. Ces valeurs de E_0 correspondent exactement à une valeur de R_p de l'ordre de $3L$. En conséquence, on peut dire que le modèle de calcul du signal EBIC en utilisant la fonction de génération ponctuelle connectée à son parcours extrait commence à donner des résultats différents de ceux obtenus avec un modèle EBIC à base de la fonction de génération gaussienne, lorsque la valeur du parcours électronique dépasse trois fois la valeur de la longueur de diffusion du matériau.

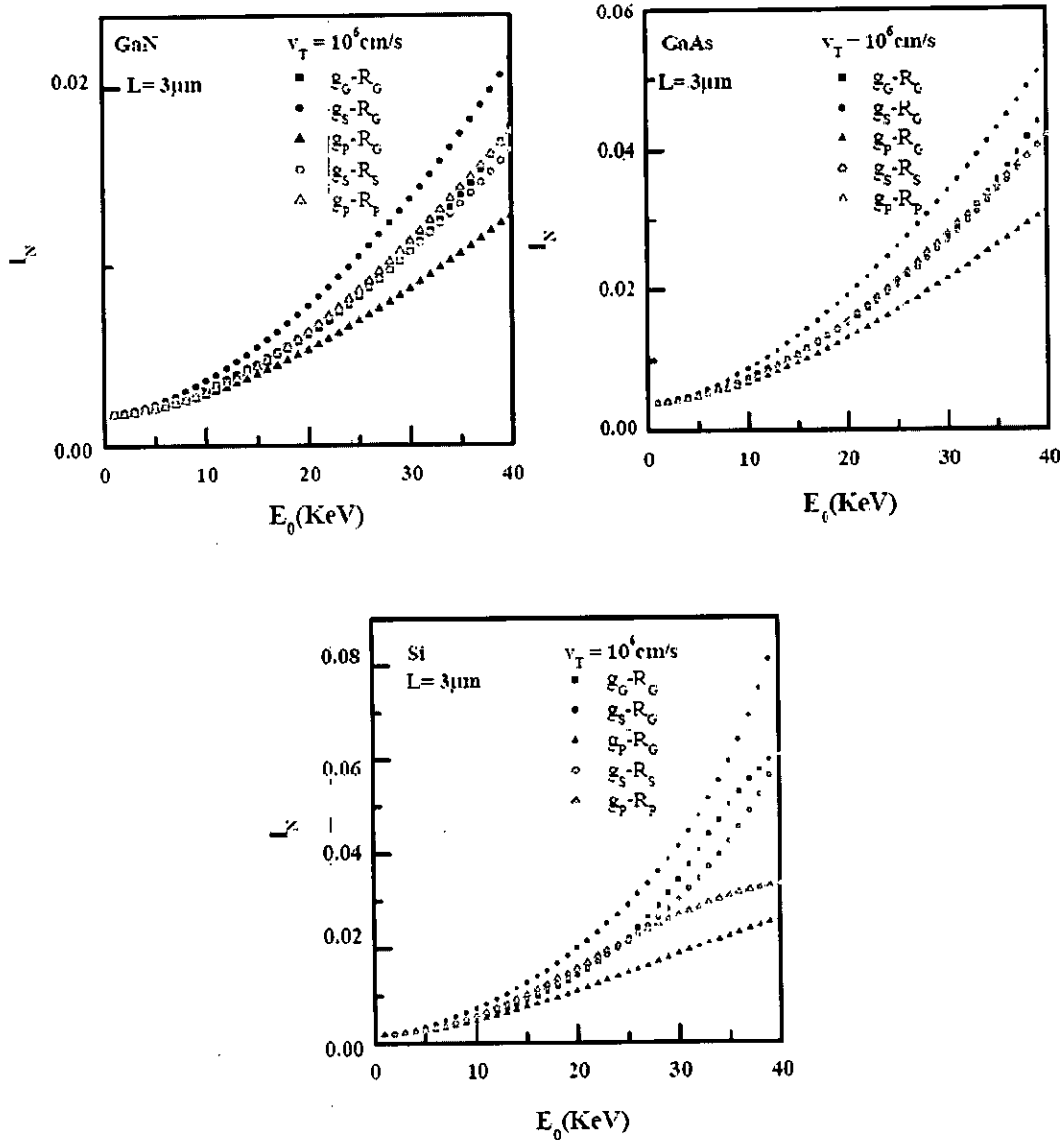


Figure 2.15: Variation du courant EBIC calculé par différentes fonctions de génération en fonction de l'énergie d'excitation avec $\chi = 8 \mu\text{m}$ pour GaAs et GaN, $\chi = 10 \mu\text{m}$ pour Si.

La Figure 2.16 présente un exemple de fit des point expérimentaux pour deux semiconducteur (Si et GaP). L'utilisation des parcours électroniques appropriés avec les fonctions de génération ponctuelle et uniforme donne le même fit que celui obtenu par la génération gaussienne.

En conclusion, l'utilisation des parcours électroniques appropriés avec les formes simples de génération ont permis l'extraction des paramètres physiques similaires à ceux obtenus en utilisant la génération gaussienne. De plus, l'utilisation des ces parcours a permet de quantifier le domaine de validité de l'utilisation de l'approximation d'une génération ponctuelle.

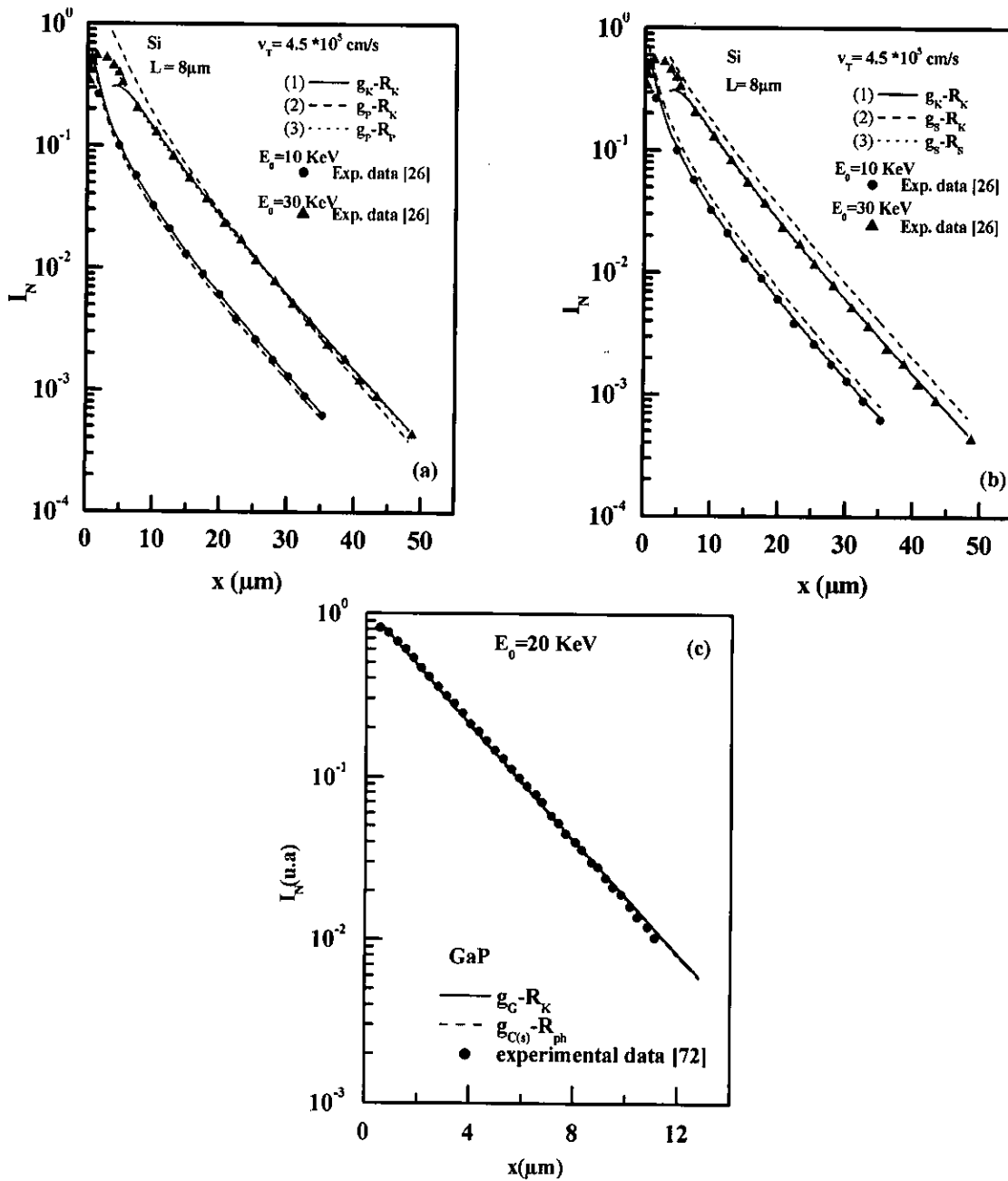


Figure 2.16: Exemple de fit des points expérimentaux pour le silicium [26] et GaP [72].

2.5 Cathodoluminescence

2.5.1 Introduction

La modélisation du signal cathodoluminescence (CL) dans les semiconducteurs avec ou sans la présence des défauts a été extensivement étudiée pendant plus de cinq décennies [35,36, 48–52]. Plusieurs modèles et approches ont été proposés pour expliquer le signal formé. L'effet des paramètres du matériau notamment, la longueur de diffusion, la vitesse de recombinaison, la couche morte et le coefficient d'absorption sur le signal généré ont été bien étudié [35]. Quant à l'effet de la forme de la fonction de génération et du parcours électronique

sur le signal Cathodoluminescence (CL), il existe peu de travaux. Dans cette partie, nous avons proposé un modèle très simple pour modéliser le signal CL. L'effet des différents paramètres est illustré tout en s'accroissant sur l'effet de la forme de génération et du choix du parcours électronique sur le signal collecté.

2.5.2 Modèle étudié

Nous considérons un semiconducteur semi-infini de type n dopé d'une manière homogène, de longueur de diffusion L et d'un coefficient d'absorption α . La surface bombardée est caractérisée par une vitesse de recombinaison v_T . Le faisceau électronique est perpendiculaire à la surface. La couche inactive dite «couche morte» est négligée.

Le transport des porteurs générés est obtenu par l'équation de continuité avec les conditions aux limites décrites ci-dessous.

$$\nabla^2 \Delta p - L^{-2} \Delta p = -D_p^{-1} g(x, y, z) \quad (2.16)$$

avec, D_p le coefficient de diffusion des trous, L la longueur de diffusion des trous et $g(x, y, z)$ la fonction de génération.

Les conditions aux limites du problème sont:

$$\Delta p = 0 \text{ lorsque } z = \infty \quad (2.17.a)$$

$$D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial z} = -v_T \cdot \Delta p (z = 0) \text{ à } z=0 \quad (2.17.b)$$

La solution du problème peut être exprimée en utilisant les fonctions de Green [74].

La solution générale du problème est:

$$\Delta p(z) = \frac{\tau_p}{2L} \int_0^\infty \left\{ \exp\left(-\frac{|z-z'|}{L}\right) + \frac{1-S}{1+S} \exp\left(-\frac{z+z'}{L}\right) g(z') \right\} dz' \quad (2.18)$$

avec, τ_p la durée de vie des porteurs de charge et $S = \frac{v_T \tau_p}{L}$ la vitesse de recombinaison est réduite.

a. Cas de génération ponctuelle, g_p

$$g(z) = G_0 \delta(z - z_1) \quad (2.19)$$

$$\Delta p(z) = \frac{\tau_p G_0}{2L} \left\{ \exp\left(-\frac{|z - z_1|}{L}\right) + \frac{1-S}{1+S} \exp\left(-\frac{z + z_1}{L}\right) \right\} \quad (2.20)$$

b. Cas de la génération constante, g_{con}

$$g(z) = \begin{cases} G_0 & \text{si } z \leq R \\ 0 & \text{si } z \geq R \end{cases} \quad (2.21)$$

$$\Delta p(z) = G_0 \left(L \left\{ 2 - \exp\left(-\frac{z}{L}\right) - \exp\left(\frac{z-R}{L}\right) + \frac{1-S}{1+S} \left(\exp\left(-\frac{z}{L}\right) - 1 \right) \right\} \right) \quad (2.22)$$

c. Cas de la génération gaussienne, g_G

$$g(z) = A \exp\left[-\left(\frac{z/R_K - u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \exp\left(\frac{-bz/R_K}{u_0}\right) \quad (2.23)$$

avec,

$$\rho R_K (g/cm^2) = 2.56 * 10^{-3} \left(\frac{E_0}{30}\right)^{1.68} \quad (2.24)$$

$$\Delta p(z) = \frac{\tau_p}{2L} \int_0^\infty \left\{ \exp\left(-\frac{|z - z'|}{L}\right) + \frac{1-S}{1+S} \exp\left(-\frac{z + z'}{L}\right) \right\} g(z') dz' \quad (2.25)$$

Les constantes A, B, b, u_0 , Δu se référer au chapitre 1 paragraphe 2.2.

Le signal cathodoluminescence est donné par:

$$I_{CL} \propto \eta \int_0^\infty \Delta p(z) \exp(-az) dz \quad (2.26)$$

avec, η le rendement quantique et α le coefficient d'absorption.

2.5.3 Effet de la longueur de diffusion

La figure 2.17 présente la variation du signal CL calculé en fonction de l'énergie des électrons incidents pour le GaAs. Le signal CL est obtenu en utilisant la fonction de génération Gaussienne avec le parcours électronique de Kyzer.

La forme et l'intensité du signal CL dépendent fortement de la valeur de la longueur de diffusion. Le signal CL augmente avec la longueur de diffusion, il atteint un maximum ensuite il décroît. La position du maximum varie avec L . Lorsque la longueur de diffusion atteint la valeur de $5 \mu\text{m}$, le signal CL devient presque insensible à la variation de la longueur de diffusion.

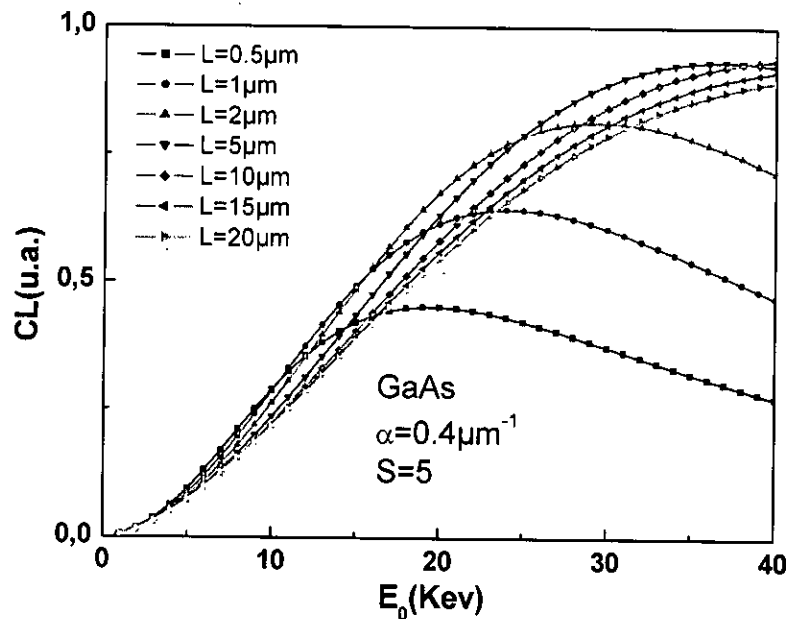


Figure: 2.17 Effet de la longueur de diffusion sur le signal CL.

2.5.4 Effet de la vitesse de recombinaison

Le signal CL calculé dépend de la vitesse de recombinaison S . L'intensité du signal diminue avec l'augmentation de S , comme il est montré sur la figure 2.18. Si, $S > 10$, le signal CL est indépendant de la vitesse de recombinaison. Par conséquent, une raisonnable précision de S est obtenue uniquement dans la gamme des vitesses $0 < S < 10$, puisque pour les grandes valeurs de S les courbes CL ne changent pas beaucoup. Ce résultat est en accord avec ceux trouvés par Hergert et al. [35] et Phang et al. [75].

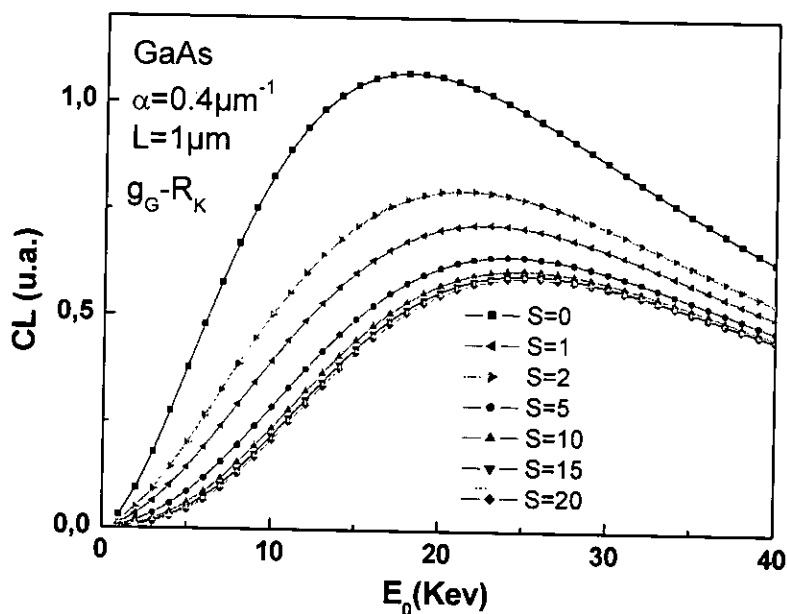


Figure: 2.18 Effet de la vitesse de recombinaison sur le signal CL.

2.5.5 Effet du coefficient d'absorption

Les résultats présentés sur la figure 2.19 montrent que la valeur du coefficient d'absorption influe sur l'intensité du signal CL. Cette dernière est inversement proportionnelle au coefficient d'absorption.

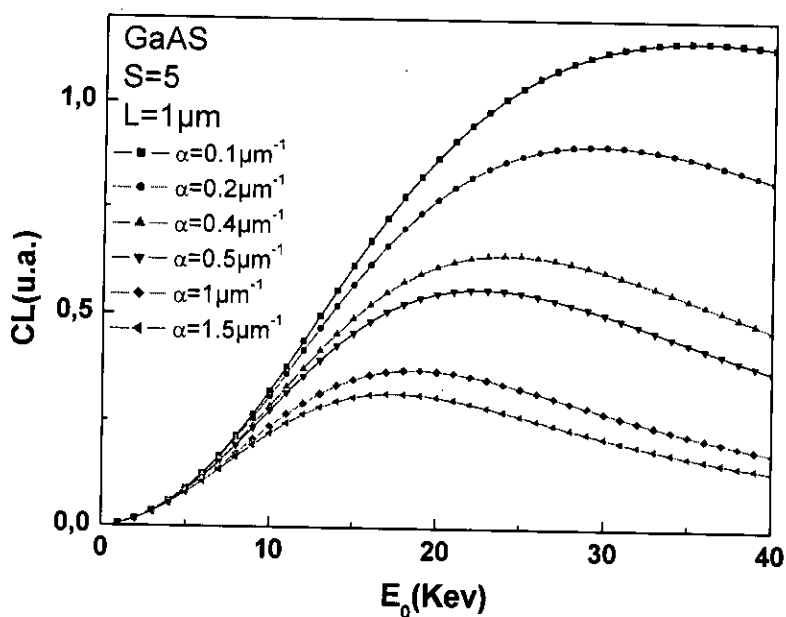


Figure: 2. 19 Effet du coefficient d'absorption sur le signal CL.

2.5.6 Effet des fonctions de générations

La figure 2.20 montre la variation du signal CL en fonction de l'énergie incidente calculée par g_{G-R_K} , g_{con-R_K} et g_p-R_K pour différentes valeur de α . Les courbes montrent l'existence d'un écart entre les courbes calculées par les différents modèles de fonction de génération. Cet écart augmente avec l'énergie des électrons primaires. En conséquence, le signal CL calculé est sensible au choix de la fonction de génération quelque soit la valeur du coefficient d'absorption.

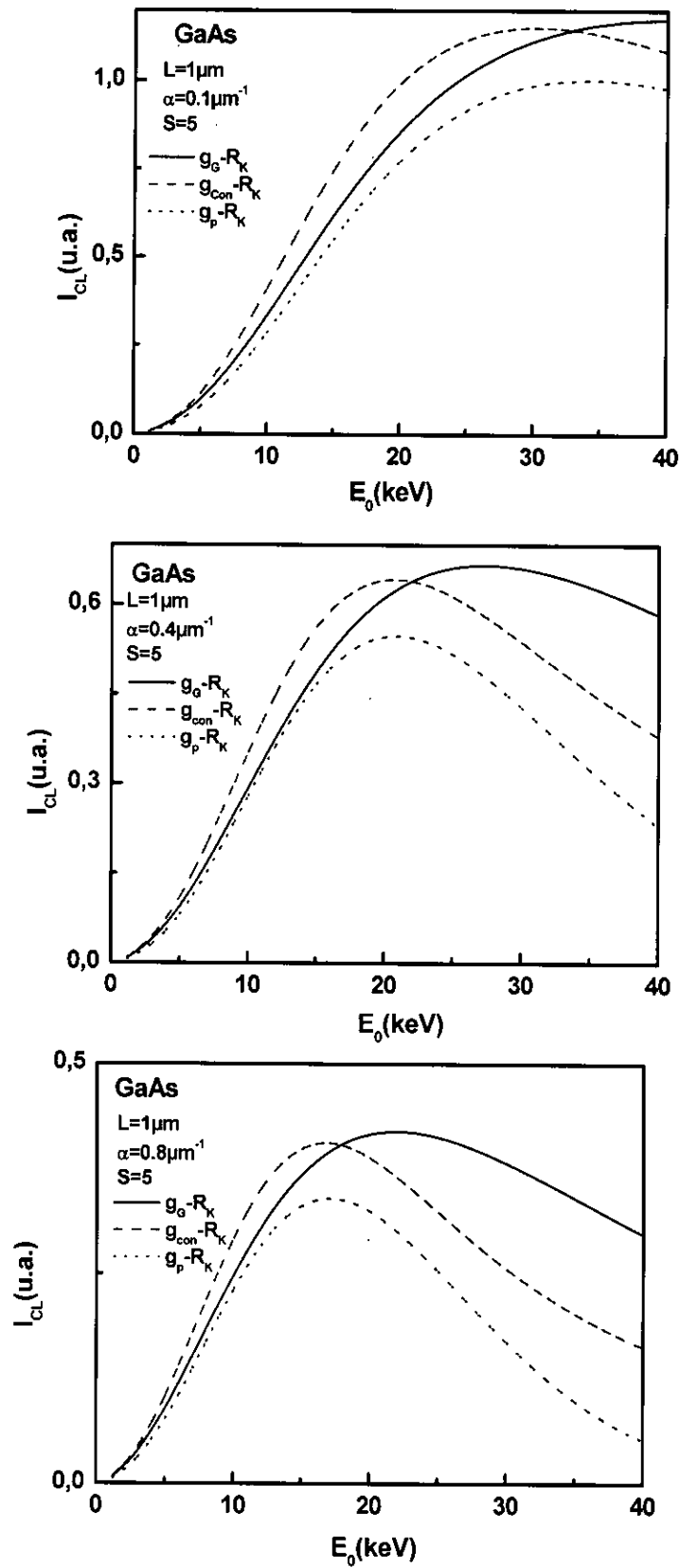


Figure 2. 20: Effet des fonctions de génération sur le signal CL pour différentes valeurs de α .

2.5.7 Effet des parcours électronique

La figure 2.20 montre que les courbes CL calculées par g_G-R_K , $g_{con}-R_K$ et g_p-R_K présentent des écarts. Donc, il est indispensable de faire un bon choix du parcours électronique pour l'utiliser avec la fonction de génération ponctuelle ou constante.

Nous avons utilisé la méthode développée dans le cadre du signal EBIC (paragraphe 2.3 et 2.4.4) pour construire les parcours électroniques de la fonction de génération ponctuelle, R_p et constante, R_{con} . L'application de cette méthode nous a conduit aux expressions mathématiques suivantes:

Cas de la fonction de génération uniforme:

$$R_{con}(\mu m) = \frac{6.65 \times 10^{-2}}{\rho(g/cm^3)} E_0^{1.67} (keV) \quad (2.27)$$

Cas de la fonction de génération ponctuelle :

$$R_p(\mu m) = \frac{5.68 \times 10^{-2}}{\rho(g/cm^3)} E_0^{1.90} (keV) \quad (2.28)$$

Les résultats obtenus sont très proches de ceux obtenus pour le signal EBIC dans le cas de la configuration parallèle (le faisceau électronique parallèle au plan de la jonction de collecte).

2.5.7.1 Effet du coefficient d'absorption

La figure 2.21 montre que l'utilisation du parcours phénoménologique avec la fonction de génération ponctuelle et la fonction de génération constante enlève le désaccord entre les courbes dans la gamme d'énergie $E_0 < 20\text{keV}$. Si $E_0 > 20\text{keV}$, le signal CL calculé en utilisant g_p est écarté de celui calculé avec g_G et g_{con} . Cet écart augmente avec α .

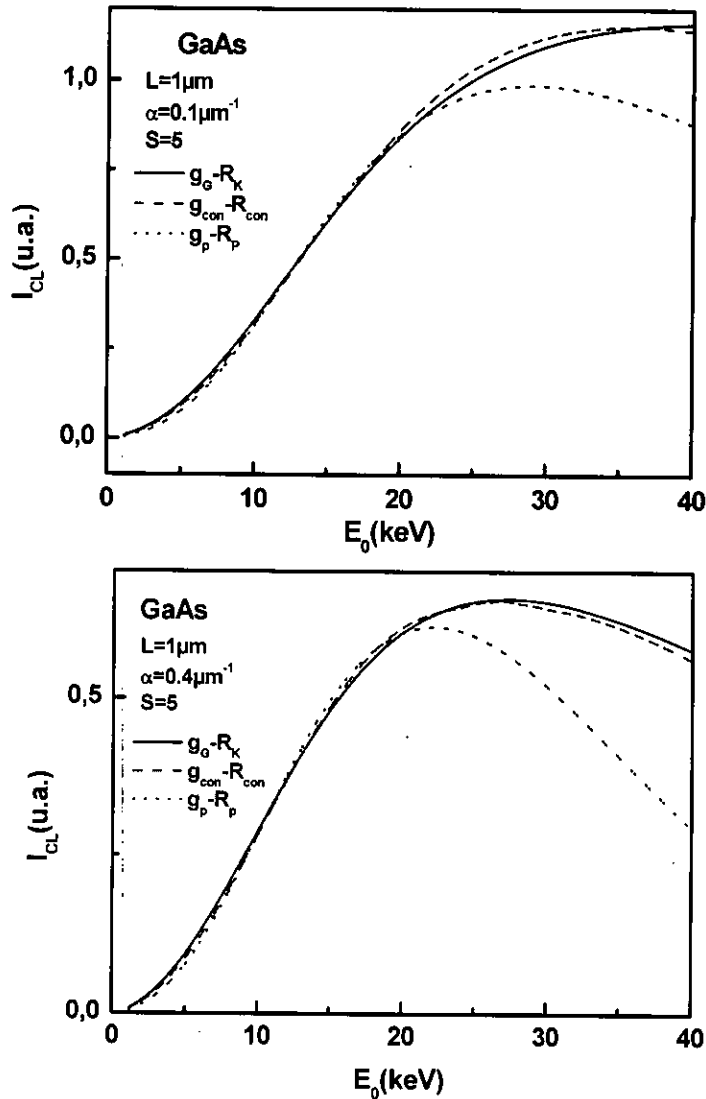


Figure 2.21: Effet du coefficient d'absorption sur le signal CL après l'utilisation des parcours électroniques extraits.

2.5.7.2 Effet de la longueur de diffusion

La figure 2.22 montre l'effet de la valeur de L sur les courbes CL calculées par g_G-R_K , $g_{con}-R_{con}$ et g_p-R_p . Les résultats montrent une bonne concordance entre les courbes calculées. Cette concordance s'améliore avec l'augmentation de L .

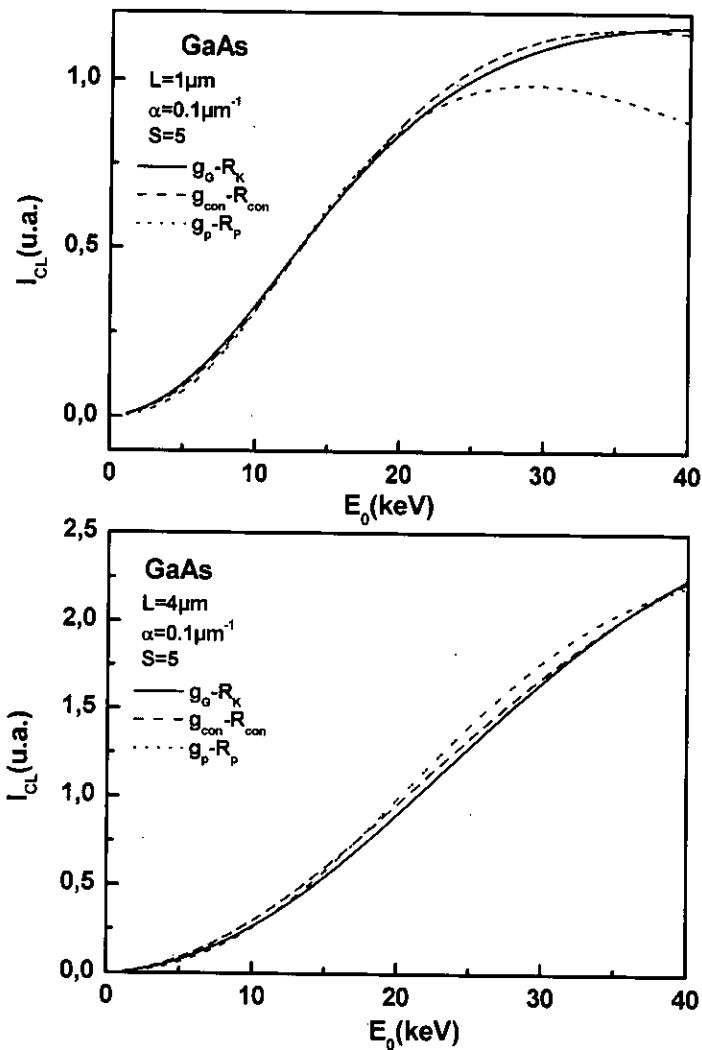


Figure 2. 22: Effet de la longueur de diffusion sur le signal CL après l'utilisation des parcours électroniques extraits.

2.6 Contraste de défaut ponctuel

Le modèle de Donolato du contraste du défaut ponctuel décrit dans le chapitre 1 est repris avec différents parcours électroniques.

Figure 2.23 montre la variation du maximum de contraste en fonction de l'énergie d'excitation pour le cas du silicium.

Les contrastes EBIC calculés ont des formes similaires. Cependant, la valeur du maximum du contraste dépend du parcours utilisé. Cela est expliqué par le fait que pour la même valeur de l'énergie, la valeur du parcours électronique dépend de la formule utilisée.

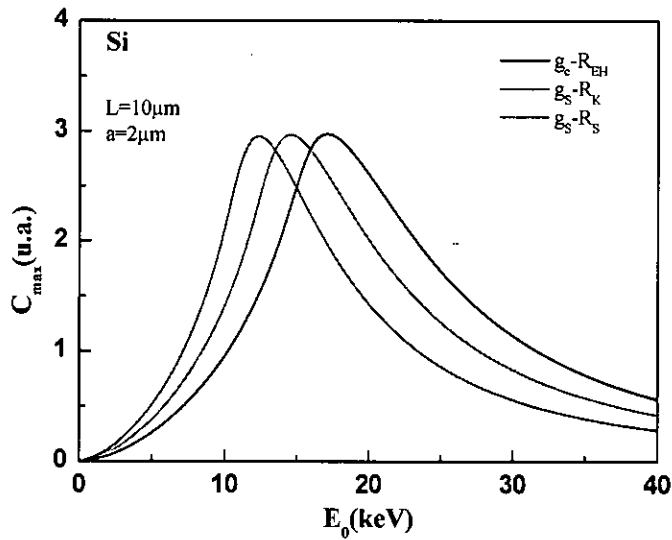


Figure 2.23: Variation du maximum de contraste en fonction de l'énergie d'excitation calculé par la même fonction de génération et différents parcours électronique

Selon Donoloto, la profondeur du défaut $a \sim 1.2 R$ (R le parcours électronique). Donc, le choix du parcours influe sur la détermination de la profondeur de défaut. Si on impose la position du maximum de contraste comme étant fixe, l'intensité du signal dépend du choix du parcours électronique utilisé comme il est montré sur la figure 2.24.

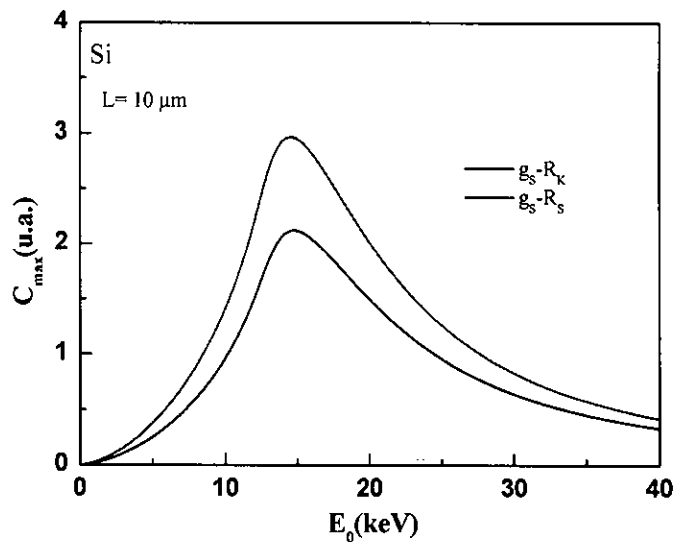


Figure 2.24: Variation du maximum de contraste en fonction de l'énergie d'excitation calculé pour avoir le même maximum, la profondeur $a = 2 \mu\text{m}$ pour le cas de (g_s-R_S) , $a = 2.7 \mu\text{m}$ pour le cas de (g_s-R_K) .

Maximunco et Sudrshran [76] ont mesuré le contraste EBIC d'un défaut ponctuel pour le cas des échantillons de SiC. En suivant leur raisonnement, on a essayé de faire le fit de leurs points expérimentaux en utilisant le model Donoloto [14] avec g_s-R_K et g_s-R_S . Le bon fit est obtenu avec le parcours phénoménologique extrait pour de la fonction génération constante

comme il est montré sur figure 2.25. L'utilisation des parcours phénoménologiques peut conduire à un bon fit des résultats expérimentaux du contraste des défauts.

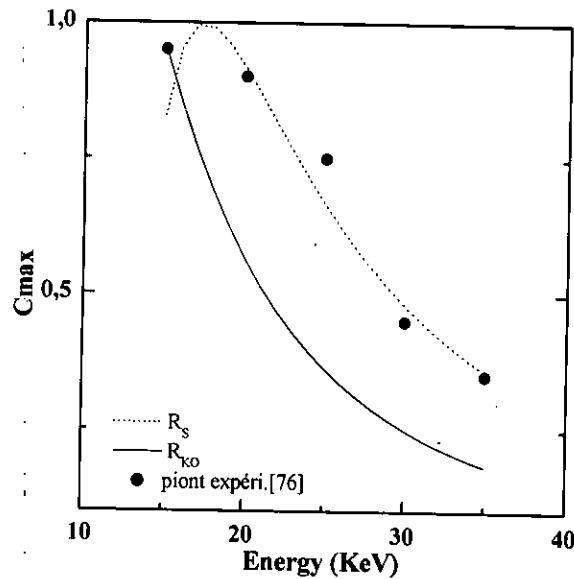


Figure 2.25: Exemple d'un fit des points expérimentaux.

2.7 Contraste EBIC de la dislocation

Nous avons calculé le contraste EBIC d'une dislocation en utilisant le modèle de Donolato pour le cas d'une dislocation avec un rayon nul, en utilisant g_G et g_c (voir le chapitre 1)

La figure 2.26, présente un exemple de calcul du contraste pour un échantillon de silicium avec différentes valeurs de L .

Si $L < 1\mu m$, le contraste calculé est indépendant du parcours choisi. Par contre, si $L > 1\mu m$, le contraste dépend du parcours utilisé. De plus, l'écart entre les courbes augmente avec l'augmentation de L . Cependant, le contraste EBIC calculé avec g_G-R_K et g_S-R_S reste en bon accord pour le cas des grandes valeurs de E_0 ($R > L$).

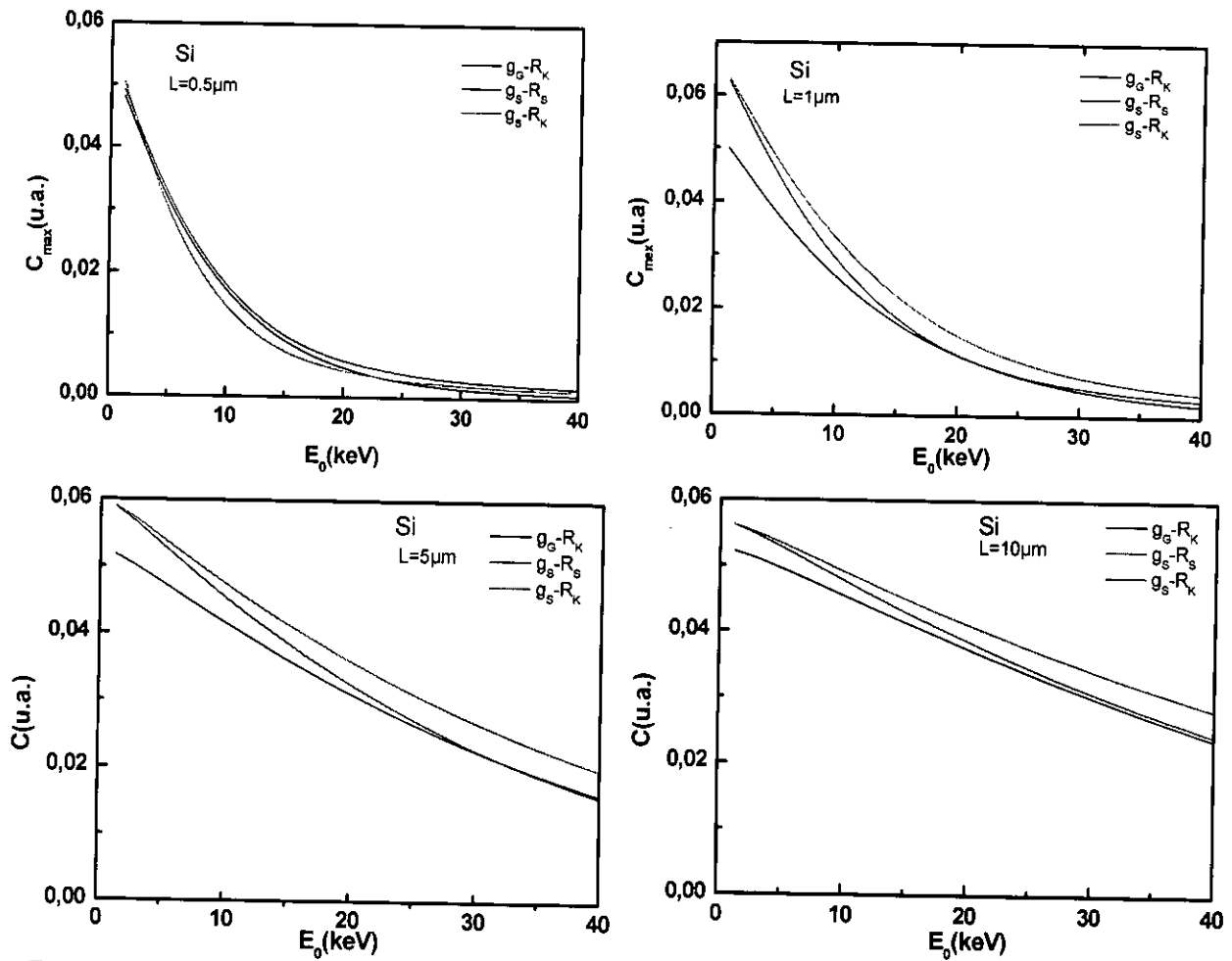


Figure 2.26: Variation du contraste EBIC d'une dislocation en fonction de l'énergie d'excitation pour différentes valeurs de L.

2.8 Contraste joint de grain

Pour étudier l'effet du choix des parcours électronique sur le contraste du joint de grain, nous avons considéré le modèle de Donolato (équation 1.127). Les fonctions de génération utilisées sont : ponctuelle, constante et Gaussienne. Les parcours utilisés sont celui de Kyzer et phénoménologique.

a. Fonction de génération ponctuelle

Le contraste est donné par:

$$c(x) = \frac{Q}{\exp(-\frac{z}{L})} \quad (2.31)$$

$$\text{avec, } Q = \frac{2s}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k \exp(-\mu|x_0|) \sin(kz)}{\mu^2(2\mu+s)} \quad (2.32)$$

$\mu^2 = k^2 + L^{-2}$, $= \frac{v_T}{D_p}$, v_T la vitesse de recombinaison, D_p coefficient de diffusion et x_0 est la distance entre le point d'impact du faisceau électronique et le joint de grain.

b. Fonction de génération constante de rayon R_{Sph}

$$c(x) = \frac{2s}{\pi I_0} \exp\left(\frac{R_{Sph}}{L}\right) \int_1^\infty \frac{\sin\left(R_{Sph} \sqrt{k^2 - 1}/L\right)}{k(k+s)} \exp\left(\frac{-kx_0}{L}\right) dk \quad (2.33)$$

$$I_0 = 4qG_0L^3 \left((R_{Sph}/L) \cosh(R_{Sph}/L) - \sinh(R_{Sph}/L) \right) \exp(-R_{Sph}/L) \quad (2.34)$$

avec, $R_{Sph} = 0.5 R_S$, R_S est le parcours phénoménologique.

c. Fonction de génération gaussienne

$$c(x) = \frac{2s}{\pi I_0} \int_0^\infty \frac{k}{\mu^2(2\mu+s)} \left\{ \begin{array}{l} \int_0^\infty \sin(kz) \exp(-\beta^2(z-z_0)^2) dz \times \\ \int_0^\infty \exp(-\mu|x|) \exp(\beta^2(x-x_0)) dx \end{array} \right\} dk \quad (2.35)$$

avec, $\beta^2 = 7.5 R_K^2$, R_K , le parcours de Kyzer et $z_0 = 0.3R_K$.

La figure 2.27 présente la variation du contraste EBIC d'un joint de grain en fonction de la distance du scan, calculé par différentes fonctions de génération et différents parcours électroniques, (a) cas du silicium et (b) cas du GaAs.

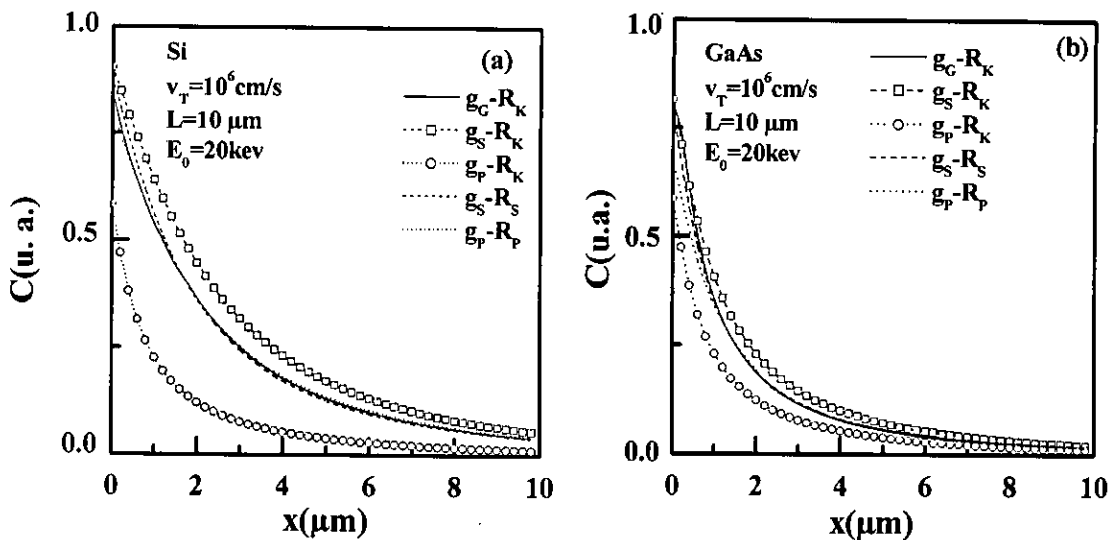


Figure 2.27: Variation du contraste de joint de grain calculé par différentes g et différents R en fonction de la distance de scanne. (a) cas du Si, (b) cas du GaAs.

Le contraste EBIC du joint de grain dépend du choix de la fonction de génération utilisée dans le modèle de calcul. Le contraste calculé par g_p-R_K présente un grand écart par rapport à ceux calculés par g_G-R_K et g_S-R_K . Cet écart est dû à la fois au choix du parcours électronique et à l'effet de l'extension spatiale du volume de génération. Cependant, celui calculé par g_G-R_K et g_c-R_K présente un désaccord moins accentué. En conséquence, le contraste EBIC des joints de grain n'est pas très affecté par le volume de génération choisi. L'utilisation des parcours phénoménologiques avec les formes simples de génération a permis la réduction de l'écart existant entre les différentes courbes. Dans la zone proche du joint, on constate un petit écart entre les différentes courbes. Cet écart peut être attribué à la distribution spatiale des porteurs générés.

2.9 Conclusion

La modélisation du signal EBIC (CL) dépend de plusieurs paramètres tels que la forme de la fonction de génération, le parcours électronique, la vitesse de recombinaison....etc.

L'utilisation des formes simples de génération dans la modélisation du signal EBIC (CL) a nécessité l'extraction des parcours phénoménologiques pour pouvoir obtenir les mêmes résultats que ceux obtenus par la génération gaussienne.

Pour la configuration parallèle, le signal EBIC calculé en utilisant la fonction de génération ponctuelle donne des résultats similaires à ceux obtenus par la fonction de génération gaussienne, dans la gamme d'énergie d'excitation qui donne un parcours électronique R qui satisfait la condition $R > L/3$. Cependant, il est préférable d'éviter l'utilisation de cette fonction dans le cas de la configuration perpendiculaire. Par contre, La fonction de génération constante peut être utilisée sans restriction avec son propre parcours phénoménologique pour les deux configurations EBIC.

Pour le signal cathodoluminescence, la fonction de génération constante peut être utilisée sans restriction avec son propre parcours phénoménologique. En revanche, pour la fonction de génération ponctuelle, il est préférable de l'utiliser avec des énergies d'excitation $E_0 < 25\text{keV}$ pour assurer des résultats similaires ceux obtenus par la génération gaussienne.

Pour le cas du contraste des dislocations, les parcours extraits sont valides dans la zone où $R > L$. Cependant, pour le contraste EBIC du joint de grain, les parcours extraits donnent de bons résultats.

Chapitre 3

Modélisation du signal CL
d'un semiconducteur de
forme cylindrique

3.1 Introduction

La compréhension du transport des porteurs de charges dans les semiconducteurs est une étape fondamentale pour comprendre le fonctionnement de plusieurs composantes électroniques et optoélectroniques.

Récemment la miniaturisation des circuits électroniques a conduit à une émergence dans l'échelle nanométrique, d'où les structures confinées à cette échelle génèrent des propriétés physiques uniques, supérieures à ceux du massif [77].

L'intérêt des recherches des matériaux nanostructurés pour les utiliser dans des cas pratiques augmentent au fur et à mesure avec la compréhension de la physique de leurs propriétés.

Jusqu'à présent, une grande variété de matériaux a été synthétisée et plus au moins incorporé dans des composants électroniques.

Les structures sous formes de fil (cylindre) ont connu des applications multiples dans les différents domaines de la technologie à savoir les cellules solaires, les batteries et les LEDs [78-80].

Malgré les efforts déployés pour contrôler les mécanismes de croissance des fils et comprendre leurs physiques, la littérature montre une diversité dans les valeurs données pour certaines de leurs propriétés physiques intrinsèques (modules élastiques) [81-84]. Ceci peut être attribué au manque d'instrumentations adéquates pour faire des mesures à petite échelle, ou aux modèles mathématiques utilisés pour extraire ces propriétés physiques.

A notre connaissance, il n'y a pas de modèle mathématique qui décrit le signal CL d'un fil semiconducteur. Dans ce qui se suit nous allons proposer un modèle mathématique qui décrit le signal CL d'un semiconducteur sous la forme d'un fil. L'effet de la longueur et du rayon du fil ainsi que la vitesse de recombinaison de sa surface libre et de sa surface latérale sur le signal CL sont illustrées.

3.2 Modèle proposé

La figure 3.1 montre le schéma du modèle proposé. On considère un fil de forme cylindrique vertical de longueur h et de rayon r_a , déposé sur un substrat. On considère que le fil est un semiconducteur de type n homogène de longueur de diffusion constante L et de coefficient d'absorption α constant.

Le contact entre le fil et le substrat est considéré parfait (pas de vitesse de recombinaison entre le substrat et le fil). La surface supérieure du fil est caractérisée par une vitesse de

recombinaison v_s . La surface latérale du fil est caractérisée par une vitesse de recombinaison v_r . Le faisceau électronique est perpendiculaire sur la surface libre. Le transport des porteurs générés est contrôlé par l'équation de continuité avec les conditions aux limites décrites ci-dessus.

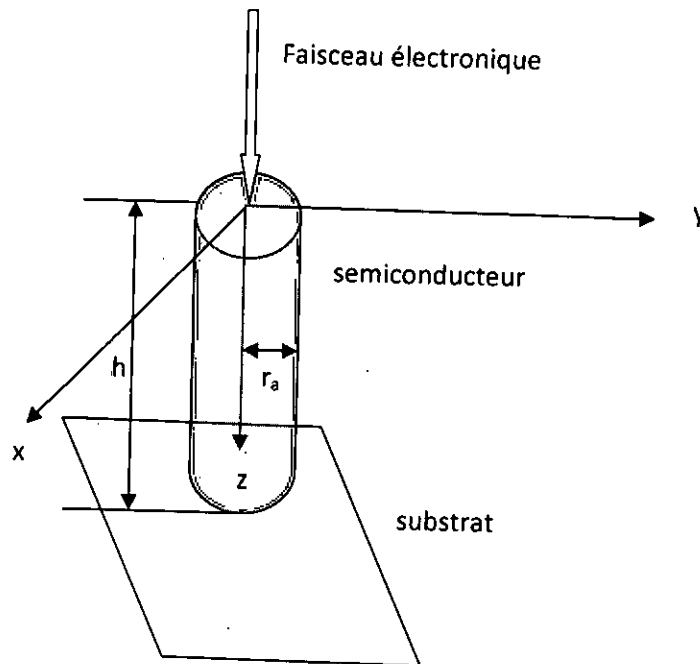


Figure 3.1: Schémas du modèle proposé pour un semiconducteur en forme cylindrique

3.2.1 Choix du volume de génération

La modélisation du signal CL ou EBIC issu d'un semiconducteur nano-cristallisé est face à plusieurs contraintes mathématiques et physiques dont le volume de génération fait partie de ces contraintes. Les fonctions de génération et les formes du volume de génération (poires de génération) existants dans la littérature ont été extraites pour le cas des matériaux massifs où le problème des surfaces libres ne se pose pas. Dans les semiconducteurs à petite taille, quelque soit leurs formes, fil ou autre, ce problème est inévitable. Pour le surmonter il faudra par exemple utiliser des faibles tensions d'accélération des électrons primaires pour avoir un volume de génération qui sera totalement inclus dans le volume du semiconducteur. Dans cette situation, le signal collecté sera très faible et peut être inexploitable puisque le rapport du bruit de fond sur le signal collecté sera très grand. En revanche, si on utilise de fortes tensions d'accélération des électrons primaires, le volume de génération obtenu sera plus grand que le volume du semiconducteur lui même. Par exemple, pour le cas d'un fil, si des fortes tensions d'accélération

des électrons primaires sont utilisées, le volume de génération généré va déborder sur la surface latérale du fil, donc, des approximations sur la forme du volume de génération sont inévitables.

A notre connaissance, jusqu'à présent il n'existe pas de travaux qui décrivent la distribution spatiale des porteurs générés due à un bombardement électronique d'un semiconducteur de forme en fil. Ce manque d'information sur la forme de génération ainsi que sur la forme du volume de génération nous a obligé à faire des approximations sur ces deux paramètres pour simplifier les calculs du modèle.

Dans le chapitre 2, on a montré qu'il est possible d'utiliser la fonction de génération constante pour modéliser le signal EBIC et CL, à condition qu'elles soient prises avec des parcours électroniques adéquats. De plus, on a montré que le signal calculé ne dépend pas de la forme du volume de génération (on a pris le volume sphérique et le volume cubique). A partir de ces résultats on va choisir une fonction de génération constante. Pour la forme du volume de génération, on a évité d'utiliser la fonction de génération sphérique puisqu'elle pose des problèmes de calcul lorsque son rayon dépasse celui du cylindre. Dans cette situation le volume de génération aura la forme plus au moins cylindrique. Ceci nous a conduit à choisir une forme cylindrique. Donc, dans cette étude on propose de prendre une génération constante avec un volume sous la forme d'un cylindre de rayon $r_a=R/2$ et de hauteur $h=R$ avec R représentant le parcours électronique. Le choix de cette forme du volume de génération est pris dans le but de simplifier les calculs d'une part et, d'autre part de bien modéliser le volume de génération lorsque son extension latérale déborde sur la paroi latérale du cylindre. Les figures 3.2a-c présentent un schéma illustratif du volume de génération utilisé dans cette étude pour les trois cas possibles.

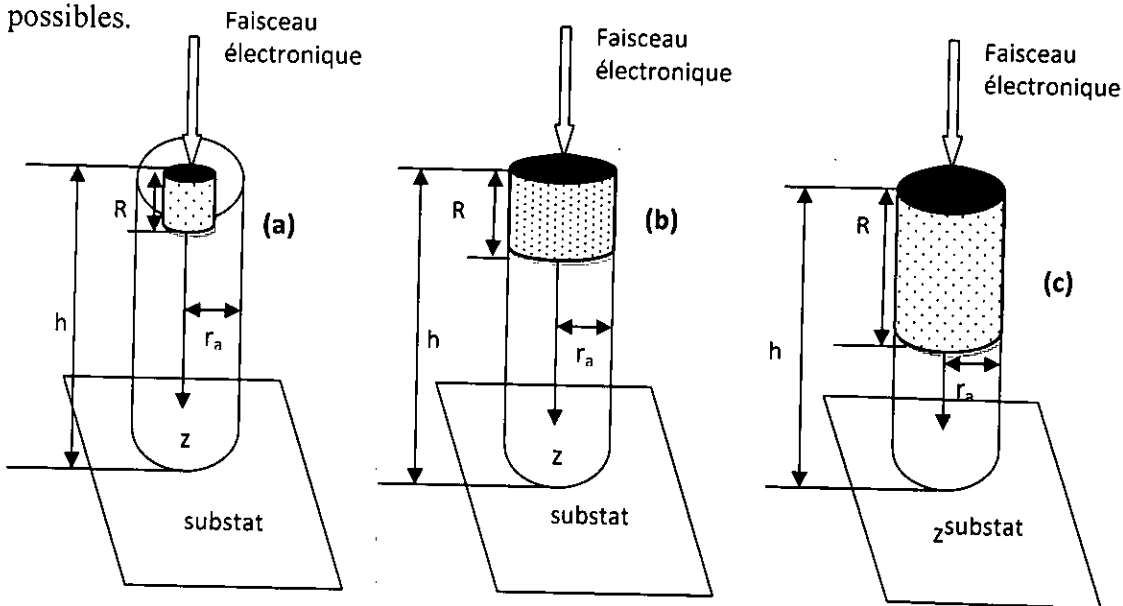


Figure 3.2: Schémas du volume de génération pour le cas (a) $R < r_a$, (b) $R = r_a$ et (c) $R > r_a$.

Donc, dans notre cas la fonction de génération est donnée par :

Si $R < r_a$

$$g(r, z) = \begin{cases} \frac{G_0}{\pi(R/2)^2 R} & \text{dans le volume de génération} \\ 0 & \text{à l'extérieur} \end{cases} \quad (3.1)$$

Si $R \geq r_a$

$$g(r, z) = \begin{cases} \frac{G_0}{\pi r_a^2 R} & \text{dans le volume de génération} \\ 0 & \text{à l'extérieur} \end{cases} \quad (3.2)$$

3.2.2 Vitesse de recombinaison surfacique infinie

L'équation de continuité s'écrira:

$$D_p \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p(r, \theta, z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 p(r, \theta, z)}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\tau} p = -g(r, z) \quad (3.3)$$

avec, $g(r, z)$ la fonction de génération, τ le temps de vie des trous, D_p le coefficient de diffusion des trous.

Les conditions aux limites:

$$p = 0 \text{ à } z = 0 \quad (3.4.a)$$

$$p = 0 \text{ à } z = h \quad (3.4.b)$$

$$p < \infty \text{ à } r < r_a \quad (3.4.c)$$

$$p = 0 \text{ à } r = r_a \quad (3.4.d)$$

v_s est la vitesse de recombinaison des trous sur la surface libre.

La solution de l'équation (3.3) peut être traitée par les fonctions de Green. La fonction de Green, $G(r, r', z, z')$ satisfait l'équation [74]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial G(r, r', \theta, \theta', z, z')}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 G(r, r', \theta, \theta', z, z')}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 G(r, r', \theta, \theta', z, z')}{\partial z^2} - \frac{1}{L^2} G(r, r', \theta, \theta', z, z') = -\frac{1}{r D_p} \delta(r - r') \delta(\theta, \theta') \delta(z - z') \quad (3.5)$$

$G(r, r', \theta, \theta', z, z')$ est la fonction de Green qui satisfait eq 3.5 avec les conditions aux limites (3.4 a-d). $L = \sqrt{D_p \tau}$

La densité des trous est exprimée par:

$$p(r, \theta, z) = \int_0^a \int_0^{2\pi} \int_0^L G(r, r', \theta, \theta', z, z') g(r', z') d\theta' r' dr' dz' \quad (3.6)$$

sachant que,

$$\delta(\theta, \theta') = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \cos(n(\theta - \theta')) \quad (3.7)$$

La solution de l'équation (3.3) peut être exprimée sous la forme,

$$G(r, r', \theta, \theta', z, z') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} G_n(r, r', z, z') \cos(n(\theta - \theta')) \quad (3.8)$$

En remplaçant (3.5) et (3.6) dans (3.3) on trouve après simplification:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial G_n(r, r', z, z')}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 G_n(r, r', z, z')}{\partial z^2} - \left(\frac{n^2}{r^2} + \frac{1}{L^2} \right) G_n(r, r', z, z') \\ & = -\frac{1}{2\pi r D_p} \delta(r - r') \delta(z - z') \end{aligned} \quad (3.9)$$

La solution de l'équation (3.7) peut être exprimée en fonction des séries de Fourier-Bessel

$$G_n(r, r', z, z') = \sum_{m=1}^{\infty} J_m(k_{nm} r) A_{nm}(z, z') \quad (3.10)$$

avec, $J_m(k_{nm} r)$ la fonction de Bessel de la première espèce d'ordre m , k_{nm} doit satisfaire la condition $J_m(k_{nm} r_a) = 0$

La fonction Delta peut être exprimée sur la forme [85]:

$$\frac{\delta(r - r')}{2\pi} = \frac{1}{\pi r_a^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_m(k_{nm} r') J_m(k_{nm} r)}{J_m^2(k_{nm} r_a)} \quad (3.11)$$

avec, J'_m la dérivée de la fonction de Bessel J_m .

Remplaçant (3.8) et (3.9) dans (3.7) on trouve après simplifications:

$$\frac{\partial^2 A_{nm}(z, z')}{\partial z^2} - \left(k_{nm}^2 + \frac{1}{L^2}\right) A_{nm}(z, z') = -\frac{1}{\pi D_p r_a^2} \frac{J_n(k_{nm} r')}{J_n^2(k_{nm} r_a)} \delta(z - z') \quad (3.12)$$

Pasant $k_{nm}^2 + \frac{1}{L^2} = \mu^2$

$$\frac{\partial^2 A_{nm}(z, z')}{\partial z^2} - \mu^2 A_{nm}(z, z') = -\frac{1}{\pi r_a^2 D_p} \frac{J_n(k_{nm} r')}{J_n^2(k_{nm} a)} \delta(z - z') \quad (3.13)$$

Cette équation est de type:

$$\frac{\partial^2 A_1(z, z')}{\partial z^2} - \mu^2 A_1(z, z') = -\delta(z - z') \quad (3.14)$$

avec,

$$A_{nm}(z, z') = \frac{1}{\pi r_a^2 D_p} \frac{J_m(k_{nm} r')}{J_m^2(k_{nm} r_a)} A_1(z, z') \quad (3.15)$$

La solution de cette équation sera de la forme:

$$A_1(z, z') = c_1 \exp(-\mu z) + c_2 \exp(\mu z) - \frac{1}{\mu} \theta(z - z') \sinh(\mu(z - z')) \quad (3.16)$$

$$\theta(z - z') = \begin{cases} 1, & z > z' \\ 0, & z < z' \end{cases} \quad (3.17)$$

On appliquant les conditions aux limites on trouve:

$$c_1 = -\frac{\sinh(\mu(h - z'))}{2\mu \sinh(\mu h)} \quad (3.18)$$

$$c_2 = \frac{\sinh(\mu(h - z'))}{2\mu \sinh(\mu h)} \quad (3.19)$$

$$A_1(z, z') = -\frac{\sinh(\mu(h-z'))}{2\mu \sinh(\mu h)} \exp(-\mu z) + \frac{\sinh(\mu(h-z'))}{\mu \sinh(\mu h)} \exp(\mu z) - \frac{1}{\mu} \theta(z-z') \sinh(\mu(z-z')) \quad (3.20)$$

Après simplification,

$$A_1(z, z') = \frac{\sinh(\mu(h-z')) \sinh(\mu z)}{\mu \sinh(\mu h)} - \frac{1}{\mu} \theta(z-z') \sinh(\mu(z-z')) \quad (3.21)$$

donc,

$$A_{mn}(z, z') = \frac{1}{\pi r_a^2 D_p} \frac{J_m(k_{nm} r')}{J_m^2(k_{nm} r_a)} \left(\frac{\sinh(\mu(h-z')) \sinh(\mu z)}{\mu \sinh(\mu h)} - \frac{1}{\mu} \theta(z-z') \sinh(\mu(z-z')) \right) \quad (3.22)$$

La fonction de Green du problème est:

$$G(r, r', z, z') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{r_a^2 \pi D_p} \frac{J_m(k_{nm} r') J_m(k_{nm} r)}{J_m^2(k_{nm} r_a)} \left(\frac{\sinh(\mu(h-z')) \sinh(\mu z)}{\mu \sinh(\mu h)} - \frac{1}{\mu} \theta(z-z') \sinh(\mu(z-z')) \right) \right) \cos(n(\theta - \theta')) \quad (3.23)$$

La densité des porteurs est:

$$p(r, \theta, z) = \iiint G(r, r', \theta, \theta', z, z') g(r', z') d\theta' dr' dz' \quad (3.24)$$

Le signal cathodoluminescence peut être écrit comme:

$$I_c \propto \int_0^{\infty} \frac{p(z)}{\tau} \exp(-\alpha_p z) dz \quad (3.25)$$

Cas particulier

Si le faisceau électronique est d'aplomb avec l'axe du cylindre (voir la figure 3.1), cette configuration qui est généralement utilisée pour étudier la variation du signal en fonction de l'énergie de bombardement (pas de balayage spatial du faisceau). Le problème se simplifie d'avantage par la symétrie, puisque la dépendance angulaire disparaît.

La fonction de Green sera donnée par :

$$G(r, r', z, z') = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} \frac{J_0(k_n r) \frac{1}{\pi r_a^2 D_p} \frac{J_0(k_n r')}{J_1^2(k_n r_a)}}{\frac{\sinh(\mu(h-z')) \sinh(\mu z)}{\mu \sinh(\mu h)}} \\ -\frac{1}{\mu} \theta(z-z') \sinh(\mu(z-z')) \end{array} \right\} \quad (3.26)$$

Si $R < h$ et $R/2 < r_a$

$$p(r, z) = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4G_0}{\pi R^3} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2\pi r_a^2 D_p} \frac{r_a J_0(k_n r) J_1(k_n r_a)}{k_n J_1^2(k_n r_a)} \\ \frac{(\cosh(\mu h) - \cosh(\mu(h-R))) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \\ -\frac{1}{\mu^2} (\cosh(\mu(z-R)) - 1) \end{array} \right\} \quad (3.27)$$

$$p(z) = \int_0^{R/2} r p(r, z) dr = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4G_0}{\pi R^3} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{4\pi r_a^2 D_p} \frac{r_a R J_1(k_n r_a) J_1(k_n R/2)}{k_n^2 J_1^2(k_n r_a)} \\ \frac{(\cosh(\mu h) - \cosh(\mu(h-R))) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \\ -\frac{1}{\mu^2} (\cosh(\mu(z-R)) - 1) \end{array} \right\} \quad (3.28)$$

$$I = \frac{2\pi}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4G_0}{\pi R^3} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{4\pi r_a^2 D_p} \frac{r_a R^2 J_1(k_n) J_1(k_n R/2)}{k_n^2 J_1^2(k_n r_a)} \\ \frac{((- \mu^2 - (\mu + \alpha) \cosh(\mu R) \exp(-\alpha R))}{(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \\ \frac{(\cosh(\mu h) - \cosh(\mu(h - R)))}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \\ - \frac{1}{\mu^2} \left(\frac{(\mu^2 - \alpha^2) \cosh(\mu R) + (\alpha\mu - \mu^2) \sinh(\mu R) + \alpha^2 - \mu^2}{\alpha(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \right) \end{array} \right\} \quad (3.29)$$

Si $R < h$ et $R/2 > r_a$

$$p(r, z) = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{G_0}{\pi r_a^2 R} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\pi D_p} \frac{r_a J_0(k_n r) J_1(k_n r_a)}{k_n J_1^2(k_n r_a)} \\ \frac{(\cosh(\mu h) - \cosh(\mu(h - R))) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \\ - \frac{1}{\mu^2} (\cosh(\mu(z - R)) - 1) \end{array} \right\} \quad (3.30)$$

$$I = \frac{2\pi}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{G_0}{\pi r_a^2 R} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\pi D_p} \frac{r_a^3 J_1(k_n r_a) J_1(k_n r_a)}{k_n^2 J_1^2(k_n r_a)} \\ \frac{((- \mu^2 - (\mu + \alpha) \cosh(\mu R) \exp(-\alpha R))}{(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \\ \frac{(\cosh(\mu h) - \cosh(\mu(h - R)))}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \\ - \frac{1}{\mu^2} \left(\frac{(\mu^2 - \alpha^2) \cosh(\mu R) + (\alpha\mu - \mu^2) \sinh(\mu R) + \alpha^2 - \mu^2}{\alpha(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \right) \end{array} \right\} \quad (3.31)$$

Si $R > h$ et $R/2 > r_a$

$$p(r, z) = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{G_0}{\pi r_a^2 h} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{1}{\pi D_p} \frac{r_a J_0(k_n r) J_1(k_n r_a)}{k_n J_1^2(k_n r_a)} \right] \\ & \left[\frac{(\cosh(\mu h) - 1) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \right] \\ & \left[-\frac{1}{\mu^2} (\cosh(\mu(z - h)) - 1) \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.32)$$

$$p(z) = 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{G_0}{\pi r_a^2 h} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{1}{\pi D_p} \frac{r_a^3 J_1(k_n r_a) J_1(k_n r_a)}{k_n J_1^2(k_n r_a)} \right] \\ & \left[\frac{(\cosh(\mu h) - 1) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \right] \\ & \left[-\frac{1}{\mu^2} (\cosh(\mu(z - h)) - 1) \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.33)$$

$$I = \frac{2\pi}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{G_0}{\pi r_a^2 h} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{1}{\pi D_p} \frac{r_a^3 J_1(k_n r_a) J_1(k_n r_a)}{k_n^2 J_1^2(k_n r_a)} \right] \\ & \left[\frac{(\cosh(\mu h) - 1) \sinh(\mu z)}{\mu^2 \sinh(\mu h)} \right] \\ & \left[\frac{((-\mu^2 - (\mu + \alpha) \cosh(\mu h) \exp(-\alpha h)))}{(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \right] \\ & \left[-\frac{1}{\mu^2} \left(\frac{\mu^2}{\alpha(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} + \frac{\alpha^2 - \mu^2 + (\mu\alpha - \mu^2) \sinh(\mu h) + (\alpha^2 - \mu^2) \cosh(\mu h)}{(-\mu + \alpha)(\mu + \alpha)} \right) \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.34)$$

3.2.3 Vitesse de recombinaison surfacique finie

On maintient les mêmes équations (3.3) à (3.4) mais, avec une nouvelle condition sur la paroi latérale et libre; alors les équations (3.4.a) et (3.4.d) deviennent à $z=0$,

$$D_p \frac{\partial p(r, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = v_r p(r, 0) \quad (3.35)$$

à $r=r_a$

$$D_p \frac{\partial p(r,z)}{\partial r} \Big|_{r=r_a} = v_r p(r_a, z) \quad (3.36)$$

La fonction de Green du problème est donnée par¹:

$$G(x, x') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{im(\phi-\phi')}}{2\pi} \sum_{\lambda_n > 0} \left(\frac{2s}{(s h + \cos^2(\lambda_n h)) \sin[\lambda_n(z-h)] \sin[\lambda_n(z'-h)] g_m(\lambda_n', r, r')} \right) \quad (3.37)$$

avec, $x = (r, \phi, z), x' = (r', \phi', z')$

$$g_m(\lambda_n', r, r') = I_m(\lambda_n' r_<) [A_m K_m(\lambda_n' r_>) + B_m I_m(\lambda_n' r_>)] \quad (3.38)$$

 $r_> = \sup(r, r')$ et $r_< = \inf(r, r')$

$$A_m = \frac{1}{4\pi} \quad \text{et} \quad B_m = \frac{[\lambda_n' K_m(\lambda_n' r_a) - s_r K_m(\lambda_n' r_a)]}{[s_r I_m(\lambda_n' r_a) - \lambda_n' I_m(\lambda_n' r_a)]} \quad (3.39)$$

 $\lambda_n =$ nieme racine strictement positive de l'equation $\lambda = -s \operatorname{tg}(\lambda h)$

$$\lambda_n' \text{ est defini comme } (\lambda_n')^2 = (\lambda_n)^2 + \frac{1}{L^2} \quad (3.40)$$

$$s = v_s / D_p \text{ et } s_r = v_r / D_p \quad (3.41)$$

Si le faisceau électronique est d'aplomb avec l'axe du cylindre (voir la figure 3.1), la fonction de Green sera donnée par:

$$G(r, r, z, z') = \frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda_n > 0} \left(\frac{2s}{(sh + \cos^2(\lambda_n h)) \sin[\lambda_n(z-h)] \sin[\lambda_n(z'-h)] g(\lambda_n', r, r')} \right) \quad (3.42)$$

$$g(\lambda_n', r, r') = I_0(\lambda_n' r_<) [A_m K_0(\lambda_n' r_>) + B_m I_0(\lambda_n' r_>)] \quad (4.43)$$

 $r_> = \sup(r, r')$ et $r_< = \inf(r, r')$

¹ Les calculs ont été effectués par Dr R.J. Taronto, Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, CNRS, UMR 8502, Bâtiment 510, F-91405 Orsay Cedex, France.

$$A_m = \frac{1}{4\pi} \text{ et } B_m = \frac{[\lambda'_n K'_m(\lambda'_n r_a) - s_r K_m(\lambda'_n r_a)]}{[s_r I'_m(\lambda'_n r_a) - \lambda'_n I_m(\lambda'_n r_a)]} \quad (4.44)$$

$\lambda_n =$ nième racine strictement positive de l'équation $\lambda = -s \operatorname{tg}(\lambda h)$

λ'_n est défini comme $(\lambda'_n)^2 = (\lambda_n)^2 + \frac{1}{L^2}$

Pour le calcul de la distribution des porteurs de charges, son signal CL est retrouvé de la même manière que celui du cas précédent, mais l'intégral sur la variable se fait numériquement.

3.3 Effet de la longueur de diffusion

Le signal CL augmente avec l'augmentation de l'énergie d'excitation pour toutes les valeurs de L . Cependant, l'écart entre les courbes diminue avec l'augmentation de L et elle devient invisible lorsque L atteint $5\mu\text{m}$ comme il est montré sur la figure 3.3. Cette valeur semble indépendante du rayon du fil. Donc, il semble difficile d'extraire les grandes longueurs de diffusion.

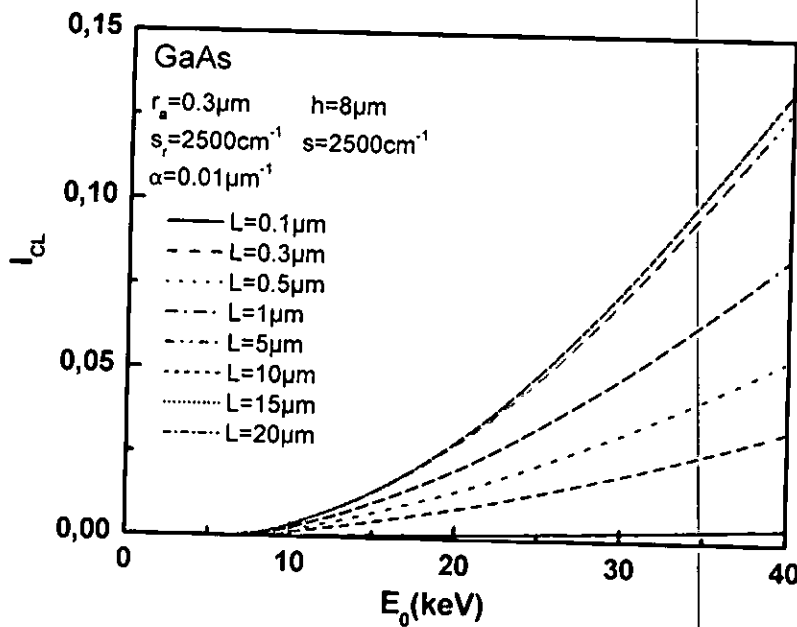


Figure 3.3: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion.

3.4 Effet de la vitesse de recombinaison de la surface libre

La figure 3.4 montre la variation du signal CL en fonction de l'énergie des électrons primaires pour différentes valeurs de v_s . Les résultats montrent que le signal CL calculé est quasi-indépendant de v_s . Ceci peut être dû soit à l'effet des bords latéraux, soit aux limites physiques du modèle.

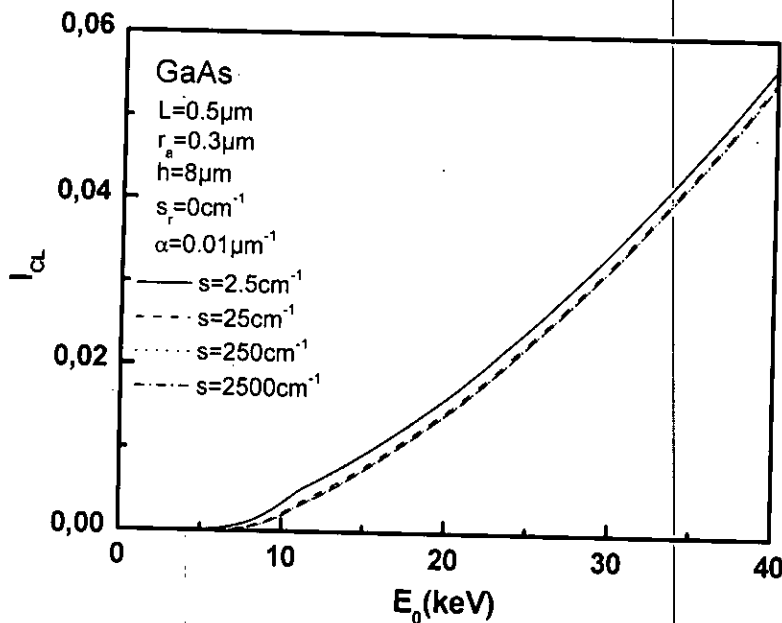


Figure 3.4: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion.

3.5 Effet du coefficient d'absorption

Les figures 3.5a, b montrent la variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour différentes valeurs du coefficient d'absorption α .

Le signal CL diminue avec l'augmentation de α . Ce comportement est similaire à celui du matériau massif.

Pour les valeurs de $\alpha > 1$ (figure 3.5b), le signal CL atteint une valeur maximale lorsque l'énergie d'excitation $E_0 \sim 15 \text{ keV}$. Ensuite, le signal devient constant quelque soit la valeur de E_0 . A cette valeur d'énergie, l'extension latérale du volume de génération est égale au diamètre de fil. Ainsi, pour les grandes valeurs de α , le signal CL est indépendant de l'énergie d'excitation lorsque l'extension latérale du volume de génération atteint le diamètre du fil. Par contre, le maximum du profil varie avec la valeur de α .

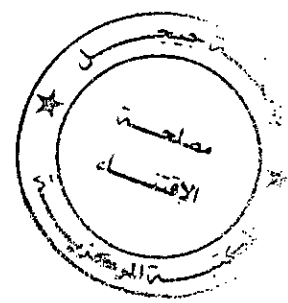
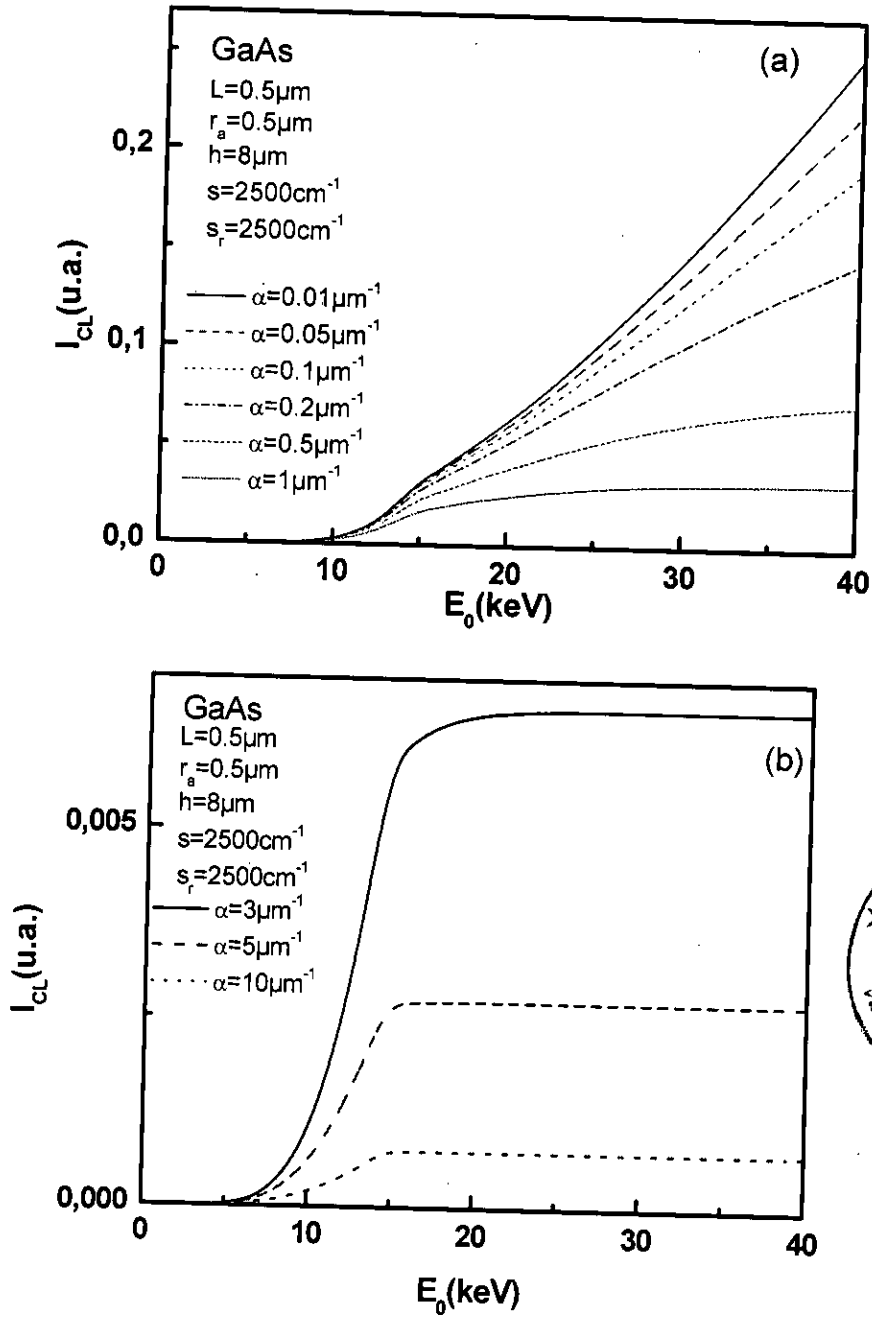


Figure 3.5: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de α . (a) pour les faibles valeurs de α , (b) pour les grandes valeurs de α .

3.6 Effet de la longueur du fil

La figure 3.6 montre la variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour différentes valeurs de h .
 Pour le cas $R < h$, le signal enregistré est indépendant de la valeur de h ; il augmente en fonction de E_0 jusqu'à ce que R atteigne la valeur h , où il est caractérisé par une valeur maximum qui dépend de la valeur de h .

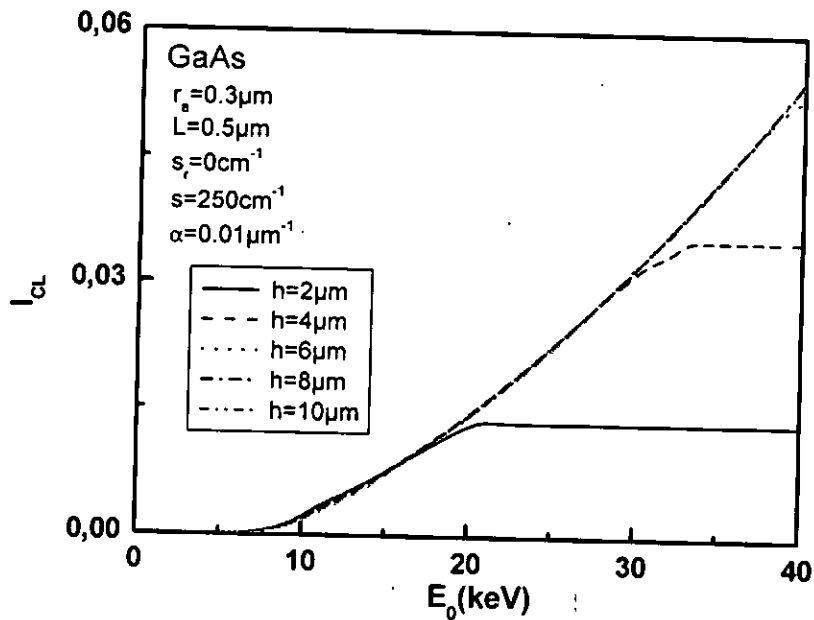


Figure 3.6: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de h .

Pour le cas où $R > h$, le signal est constant quelque soit la valeur de E_0 . Ceci prouve que le signal enregistré ne dépend pas de la valeur de h . Mais pour confirmer ce résultat, il est très utile de voir l'effet de la vitesse de recombinaison de la face arrière $z=h$ (voir figure 3.1), car la considération de cette dernière va influencer sur la forme de signal proche de cette zone. L'effet de cette dernière a été illustré par Von Roos et al pour le cas du signal EBIC [86].

3. 7 Effet de la vitesse de recombinaison de la surface latérale

L'effet de la vitesse de recombinaison de la surface latérale v_r sur le profil CL calculé est montré la figure 3.7. Le signal CL calculé diminue avec les valeurs de v_r .

Le profil CL présente une saturation pour le cas des grandes valeurs de v_r . Ceci présente une limitation de ce modèle pour la détermination de grandes valeurs de vitesse de recombinaison sur la paroi latérale.

La considération de la présence d'un champ électrique dans le fil peut approfondir nos connaissances sur le comportement des porteurs de charges au voisinage des parois de fil.

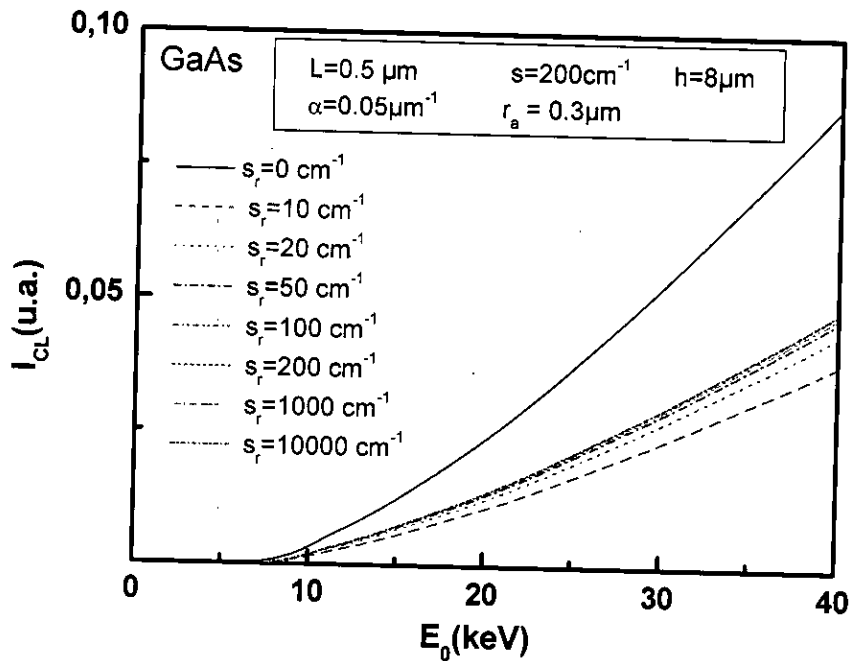


Figure 3.7: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de v_r .

3.8 Effet du rayon du cylindre

Le profil CL calculé varie considérablement avec le rayon du fil r_a . Il l'augmentation avec l'augmentation de ce dernier comme il est montré sur les figures 3.8a-c.

Cette variation peut être expliquée par le fait que lorsque le diamètre de cylindre augmente la probabilité que les porteurs de charge atteignent cette paroi diminue, donc ils ont plus de chance de se recombiner pour donner naissance à un signal CL.

En général, le signal CL peut être divisé en deux parties, la première c'est lorsque $R < r_a$ et la deuxième c'est lorsque $R > r_a$. L'augmentation du signal CL calculé en fonction de E_0 dans la première partie est plus rapide que dans la deuxième c'est pour cela un petit épaulement dans le signal CL est constaté lorsque $R = r_a$. Cette variation confirme l'effet de la vitesse latérale sur le signal CL. Lorsque les porteurs sont générés loin de la surface latérale, ils ont plus de chance de se recombiner pour donner un signal CL mais, quand on s'approche de la surface latérale, cette probabilité diminue.

Les profils CL calculés pour le cas $r_a = 2 \mu\text{m}$ et $3 \mu\text{m}$ présentent une variation différente que celle donnée à partir des autres cas étudiés. Vu les simplifications adoptées pour modéliser ce signal, on ne peut pas trancher s'il y a des phénomènes physiques responsables de cette variation ou c'est due aux limites du modèle. Pour le cas des grandes valeurs de r_a , les porteurs générés se recombinent avant d'atteindre la paroi latérale, ce qui donne un signal indépendant de r_a .

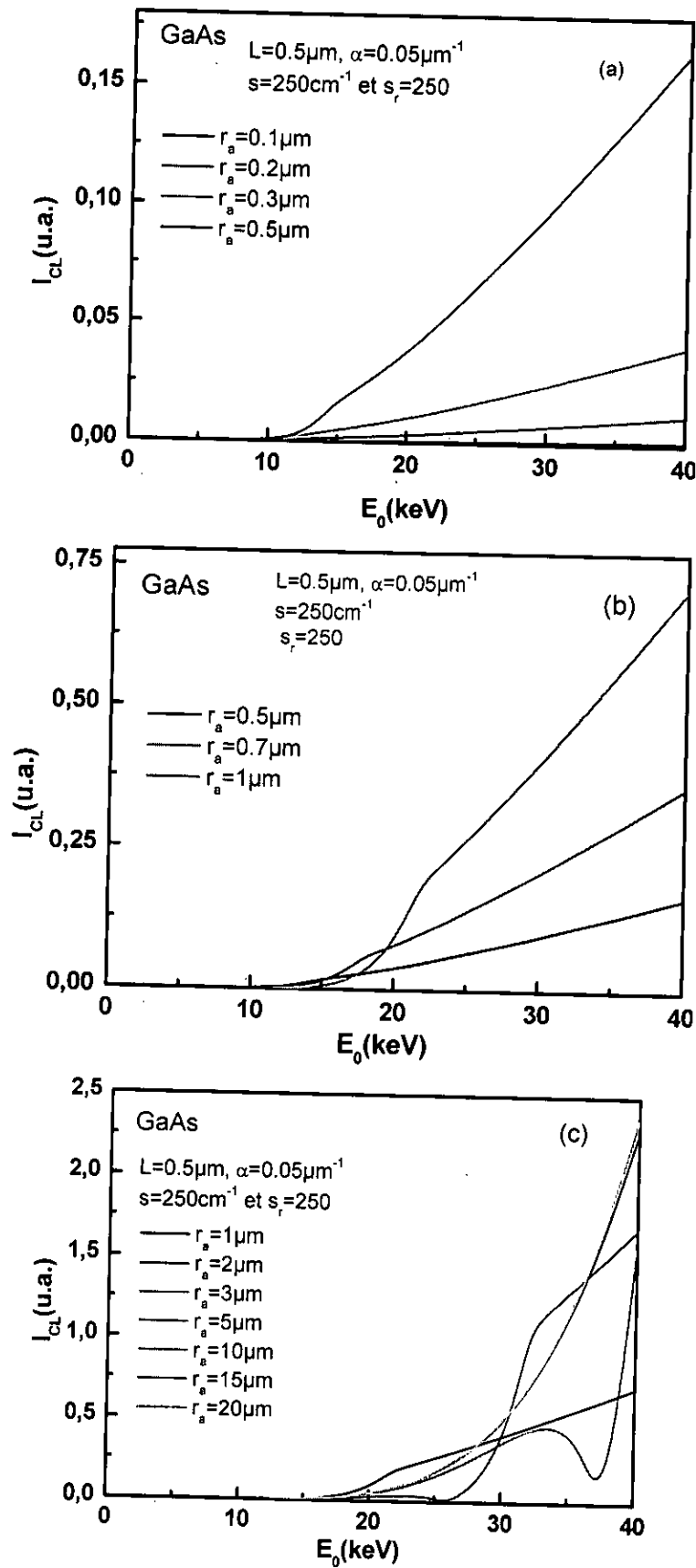


Figure 3.8: Variation du signal CL en fonction de l'énergie d'excitation pour un fil de GaAs pour différentes valeurs de r_a .

3.9 Conclusion

Un modèle mathématique simple a été proposé pour étudier le signal CL issu d'un fil semiconducteur. L'effet des différents paramètres intrinsèques du semiconducteur sur le signal CL calculé sont illustrés.

Le signal CL augmente en fonction de la longueur de diffusion et en fonction du rayon du fil. Cependant, il diminue avec l'augmentation du coefficient d'absorption et de la vitesse de recombinaison sur la paroi latérale. Le signal CL est quasi-indépendant de la vitesse de recombinaison de surface de la base supérieure.

Il est à noter que le modèle proposé a ses limites, à savoir l'impossibilité de l'utiliser pour la détermination des grandes vitesses de recombinaison et des grands longueurs de diffusion.

Chapitre 4

Modélisation du signal EBIC
de deux joints de grain proche

4.1 Introduction

L'activité électrique des joints de grains (Grain Boundaries: GBs) influe considérablement sur la réponse électrique des matériaux semiconducteurs poly-cristallins. Généralement, les GBs sont considérés comme des régions de recombinaison de porteurs de charges. Leur présence est généralement caractérisée par une diminution de la durée de vie des porteurs de charge et en conséquence, la diminution de l'intensité du signal électrique (optique) collecté.

L'activité électrique des GBs est caractérisée soit par la vitesse de recombinaison des porteurs de charge sur le joint de grain [62, 63, 87], soit par une densité des états localisés dans le gap du semiconducteur (jouent le rôle des centres de recombinaison). Cette activité est traitée par la théorie de Schottky-Read-Hall SRH [88–90].

La miniaturisation des composants électroniques exige l'élaboration des matériaux monocristallins ou poly-cristallins avec de très petits grains. Dans ce cas, la distance entre les différents GBs devient très courte, ce qui peut se traduire par leur interaction mutuelle. Cette miniaturisation de la taille des matériaux présente un déficit pour les techniques de caractérisation basées sur l'injection des charges (EBIC et CL), en particulier, si la distance entre les différents GBs est inférieure au diamètre du volume de génération. Dans cette situation, les informations obtenues à partir du signal électrique (optique) collecté seront le résultat de la contribution de tous les joints de grains présents à l'intérieur du volume de génération. Par conséquent, il ne faut pas supposer un joint de grain isolé lors de l'investigation des propriétés électriques des nanomatériaux.

La détermination des propriétés électriques d'un semiconducteur présentant des défauts avec les modes EBIC ou CL nécessite l'utilisation de modèles mathématiques. Le signal EBIC (CL) est calculé à partir de la résolution de l'équation de continuité des porteurs de charge excédentaires en présence de GB. Généralement, la modélisation du signal EBIC (CL) due à un joint de grain est une tâche difficile, même si des approximations et des hypothèses simplificatrices sont faites. Par suite, on ne peut aboutir à des solutions analytiques que dans des cas simples [62,63, 87].

A notre connaissance, il y a très peu de travaux qui ont tenté de décrire le signal EBIC de deux joints de grains adjacents à l'exception de celui de Taili et al. [91]. Les auteurs ont tenté de décrire l'effet de l'interaction des joints de grains sur le signal EBIC du silicium poly-cristallin. Dans cette étude les GBs sont caractérisés par une vitesse infinie.

Dans ce chapitre, nous décrivons une modélisation signal EBIC de deux joints de grains adjacents pour le cas d'un semiconducteur semi-infini, tout en essayant de quantifier l'effet de la distance entre les joints sur l'intensité et la forme du signal EBIC collecté.

4.2 Modèle proposé

Le schéma de la figure 5.1 représente la géométrie adoptée pour le modèle proposé. Afin d'arriver à dériver une expression analytique du courant EBIC calculé, on pose les hypothèses suivantes:

- 1- le semiconducteur est de type n, avec un dopage uniforme dans les trois régions.
- 2- Les joints de grains sont perpendiculaires au plan de collecte.
- 3- Chaque joint de grain est simulé par une ligne de largeur négligeable avec des vitesses de recombinaisons surfacique ν_1 , ν_2 respectives.
- 4- La fonction de génération est prise comme ponctuelle $g(x,y,z) = G_0\delta(x-x_1)\delta(y)\delta(z-z_1)$ ou une génération constante avec une extension spatiale de forme cubique de côté l .
- 5- La vitesse de recombinaison à l'interface métal- semiconducteur est infinie.

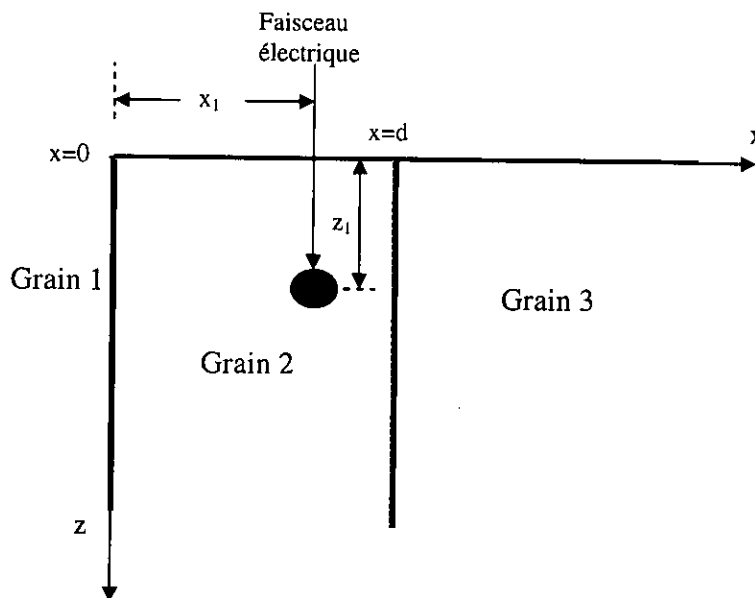


Figure 4.1: La géométrie du modèle EBIC de deux joints de grains proches.

4. 3 Solution du problème et résultats

4.3.1 Cas de la fonction de génération ponctuelle

La distribution des porteurs en excès est déterminée par l'équation de continuité qui s'écrit:

$$\nabla^2 \Delta p - L^{-2} \Delta p = -D_p^{-1} g(x, y, z) \quad (4.1)$$

avec, Δp la densité des trous en excès, D_p le coefficient de diffusion des trous, L la longueur de diffusion des trous et $g(x, y, z)$ la fonction de génération.

La fonction de génération est considérée ponctuelle, $G_0 \delta(x - x_1)(z - z_1)$, avec, G_0 le taux de génération.

Les conditions aux limites sont:

à $z = 0$

$$\Delta p = 0 \quad (4.2)$$

Pour le premier GB:

$$\Delta p(-0, z) - \Delta p(+0, z) = 0 \quad (4.2.a)$$

$$D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=-0} - D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=+0} = -v_1 \Delta p(0, z) \quad (4.2.b)$$

Pour le deuxième GB:

$$\Delta p(d-0, z) - \Delta p(d+0, z) = 0 \quad (4.2.c)$$

$$D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=d-0} - D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=d+0} = -v_2 \Delta p(d, z) \quad (4.2.d)$$

Le courant collecté peut être exprimé par:

$$I_c = qD_p \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Delta p}{\partial z} \Big|_{z=0} dy \quad (4.3)$$

Le courant normalisé est $I_{cN} = (q G_0)^{-1} I_c$

La solution de l'équation 4.1 avec les conditions aux limites de 4.2.a, b,c et d, peut être trouvée en utilisant une approche similaire à celle donnée par Donolato et Oldwig von Roos [63, 92].

Si la fonction de génération est ponctuelle, l'utilisation des transformés de Fourier avec sinus, sur l'équation 4.1 donne:

$$\frac{\partial^2 \widetilde{\Delta p}}{\partial x^2} - (L^{-2} + k^2) \widetilde{\Delta p} = -\frac{2G_0}{\pi D_p} \sin(k.z_1) \delta(x - x_1) \quad (4.4)$$

avec,

$$\widetilde{\Delta p} = \int_0^{\infty} dz \sin(k.z).p(x,z) \quad (4.5)$$

La solution de l'équation 4.4 dépendra de la position x_1 . Si x_1 est dans le grain 2, la solution est:

Pour $x < 0$ (region1)

$$\widetilde{\Delta p} = a.\exp(\beta x) \quad (4.6)$$

Pour $0 < x < d$ (region2)

$$\widetilde{\Delta p} = b.\exp(\beta x) + c.\exp(-\beta x) - \frac{2G_0}{\pi\beta D} \sin(k.z_1) \sinh(\beta(x - x_1)) \theta(x - x_1) \quad (4.7)$$

Pour $x > d$ (region2)

$$\widetilde{\Delta p} = e.\exp(-\beta x) \quad (4.8)$$

Si x_1 est dans le grain 3 la solution est:

Pour $x < 0$ (region1)

$$\widetilde{\Delta p} = A.\exp(\beta x) \quad (4.9)$$

Pour $0 < x < d$ (region2)

$$\widetilde{\Delta p} = B \cdot \exp(\beta x / L) + C \cdot \exp(-\beta x / L) \quad (4.10)$$

Pour $x > d$ (region3)

$$\widetilde{\Delta p} = D' \exp(-\beta x / L) - \frac{2G_0}{\pi\beta D} \sin(k \cdot z_1) \sinh(\beta(x - x_1)/L) \theta(x - x_1) \quad (4.11)$$

$\theta(x)$ est la fonction step, $\beta^2 = 1 + (k/L)^2$. Les coefficients a, b, c, et e ou A, B, C, D' peuvent être exprimés depuis les conditions aux limites. Le courant normalisé collecté peut être exprimé par:

$$I_N = \frac{I_{cN}(x_1)}{I_{cN}(\infty)} \quad (4.12)$$

$$\lim_{x_1 \rightarrow \infty} I_{cN}(x_1) = I_{cN}(\infty) = \exp(-z_1/L) \quad (4.13)$$

Pour le cas $0 \leq x_1 \leq d$

$$I_N = 1 - \frac{2}{\pi} \exp(z_1/L) \times \int_0^{\infty} \sin(uz_1/L) (A_1 + A_2 + A_3) du \quad (4.14)$$

$$A_1 = \frac{\eta_I}{\beta^2 B} \left[(2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta x_1 / L\right) - \eta_{II} \exp\left(-\beta(2d - x_1) / L\right) \right] \quad (4.15)$$

$$A_2 = -\frac{1}{\beta B} \left[\frac{(2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta(d - x_1) / L\right) \frac{\eta_I \eta_{II}}{2\beta}}{\times \left(\exp\left(-\beta(d + x_1) / L\right) - \exp\left(-\beta 3(d + x_1) / L\right) \right)} \right] \quad (4.16)$$

$$A_3 = \frac{1}{\beta^2} \left(\frac{2\beta + \eta_I}{B} \eta_{II} + 1 \right) \exp\left(-\beta(d - x_1) / L\right) + \frac{\eta_I \eta_{II}}{2\beta B} \exp\left(-\beta(d + x_1) / L\right) \quad (4.17)$$

$$\eta_{II} = \frac{v_1 L}{D_p} \quad (4.18)$$

$$\eta_{II} = \frac{v_2 L}{D_p} \quad (4.19)$$

$$u = k / L \quad (4.20)$$

$$B = (2\beta + \eta_I)(2\beta + \eta_{II}) - \eta_I \eta_{II} \exp(-\beta d / L) \quad (4.21)$$

Pour le cas $d \leq x_1$

$$I_N = 1 - \frac{2}{\pi} \exp(z_1 / L) \times \int_0^{\infty} \sin(uz_1 / L) A_4 du \quad (4.22)$$

$$A_4 = \frac{1}{\beta^2 B} \left[\frac{2\beta\eta_I + (2\beta + \eta_I)\eta_{II} \exp(\beta d / L) -}{\eta_I \eta_{II} \exp(-\beta d / L)} \right] \exp\left(-\beta x_1 / L\right) \quad (4.23)$$

Le cas $x_1 \leq 0$ donne la même formule que la précédente mais il faut remplacer juste x_1 par $d - x_1$.

$$I_N = 1 - \frac{2}{\pi} \exp(z_1 / L) \times \int_0^{\infty} \sin(uz_1 / L) A_5 du \quad (4.24)$$

$$A_4 = \frac{1}{\beta^2 B} \left[\frac{2\beta\eta_I + (2\beta + \eta_I)\eta_{II} \exp(\beta d / L) -}{\eta_I \eta_{II} \exp(-\beta d / L)} \right] \exp\left(-\beta(d - x_1) / L\right) \quad (4.25)$$

4.3.2 Résultats

4.3.2.1 Effet de la vitesse de recombinaison

La figure 4.2 présente l'effet de la vitesse de recombinaison des deux GBs sur le profil EBIC pour un semiconduteur de type n avec une longueur de diffusion de 0.3 μm et une distance entre ces deux est de l'ordre de 0.3 μm . La vitesse de recombinaison du deuxième joint est maintenue constante et celle du premier est variable.

Dans le cas des grandes vitesses de recombinaison des deux joints, le profil EBIC montre clairement la participation des deux GBs dans le signal EBIC calculé. Le profil EBIC atteint son minimum au niveau des joints de grains. Entre les joints, le profil EBIC augmente en s'éloignant de premier GB et sa valeur maximale est différente de la valeur initiale si le scan est à mi-distance entre les deux joints. Après, il diminue jusqu'à ce qu'il atteigne son minimum sur le deuxième GB. Le maximum du profil entre les deux joints augmente avec la taille du grain (la distance entre les deux GBs).

L'influence du premier joint sur le profil calculé régresse avec la diminution de la vitesse de recombinaison. Aux faibles valeurs de la vitesse de recombinaison ($v_1 \leq 10^4$ cm/s), l'influence du premier joint sur le signal EBIC devient négligeable. Ce dernier devient égal exactement à celui d'un joint de grain isolé (présenté en pointues sur la figure 4.2).

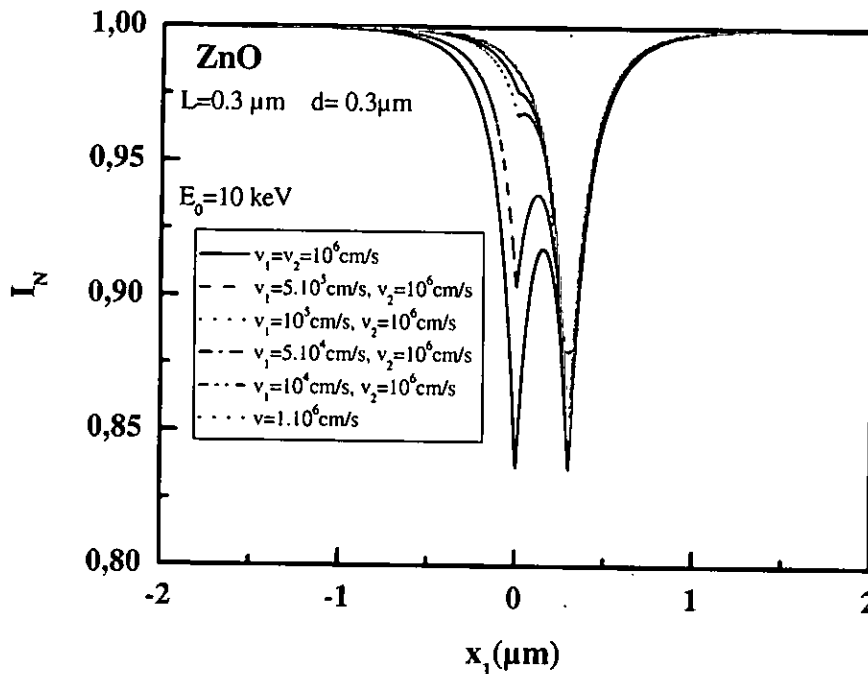


Figure 4.2: Variation de I_N en fonction de x_1 pour différentes valeurs de la vitesse de recombinaison du premier joint de grain.

4.3.2.2 Effet de la longueur de diffusion du matériau

Les figures 4.3 a, b montrent la variation du courant EBIC collecté en fonction de la distance du scan x pour différentes valeurs de L , avec une distance entre les deux joints inférieure (supérieure) à la profondeur de pénétration des électrons respectifs. On remarque que dans les deux cas la signature des deux joints est présente sur le signal EBIC calculé. L'intensité et la largeur du profil EBIC augmente avec l'augmentation de L . Donc, la résolution spatiale du profil diminue avec l'augmentation de L . Ce résultat est en accord avec ceux des travaux de certains auteurs [93,94].

Le maximum de l'intensité du signal dans la région entre les deux joints (sur le grain) est inversement proportionnel à la distance d . Plus la distance d augmente plus l'interaction entre les deux joints diminue.

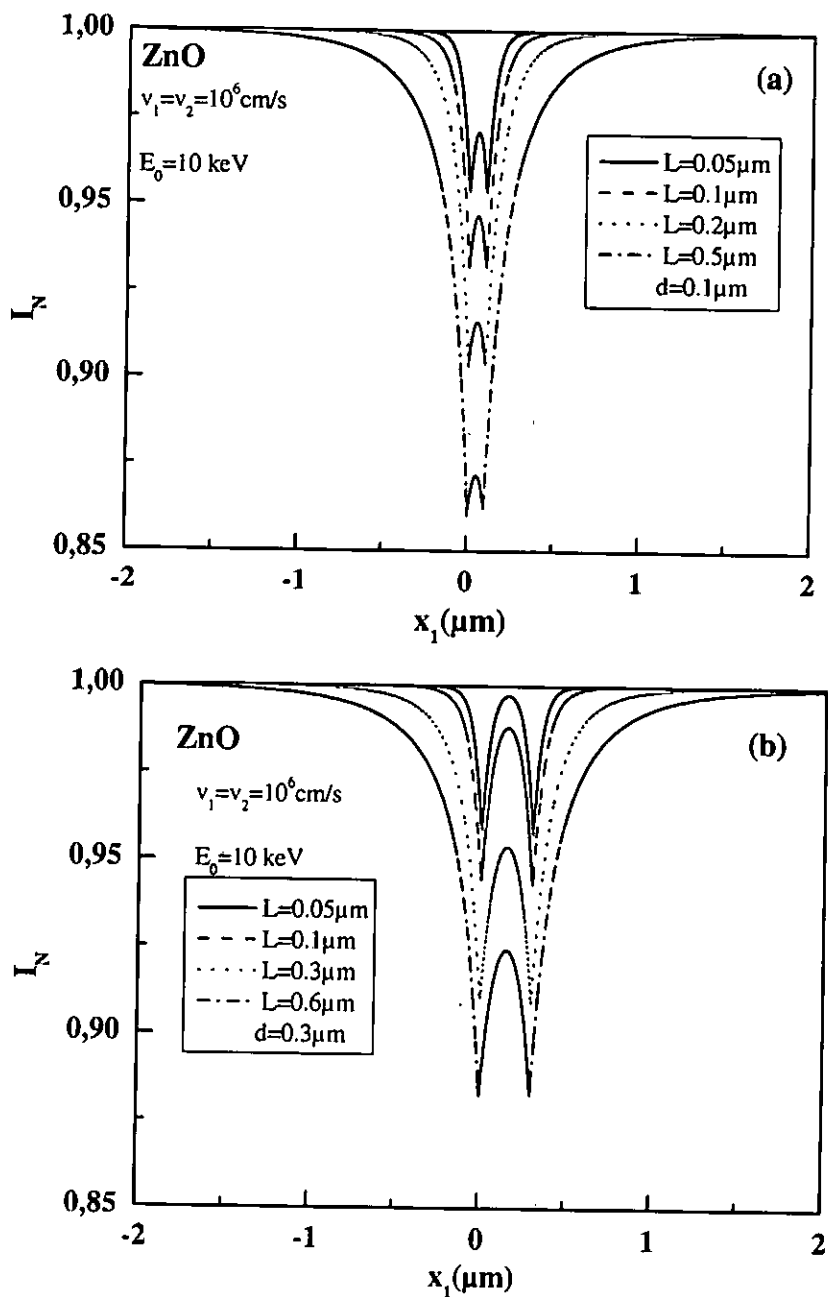


Figure 4.3: Variation de I_N en fonction de x_1 pour différentes valeurs de L . (a) $d=0.1 \mu\text{m}$, (b) $d=0.3 \mu\text{m}$.

4.3.2.3 Effet de la distance d entre les deux joints

Soit d la distance entre les GBs. La figure 4.4 montre une diminution de l'intensité du signal EBIC calculé sur les GBs en fonction de la taille du grain. On constate une augmentation du maximum du profil entre les deux joints. Ceci montre l'effet de l'interaction entre les deux joints. Plus les joints sont proches, plus l'interaction entre eux est plus forte. Cette interaction

disparaît seulement si $d > R$ et $d > 2L$, où R représente le parcours électronique. Cette condition peut nous guider pour bien choisir la valeur de l'énergie de bombardement.

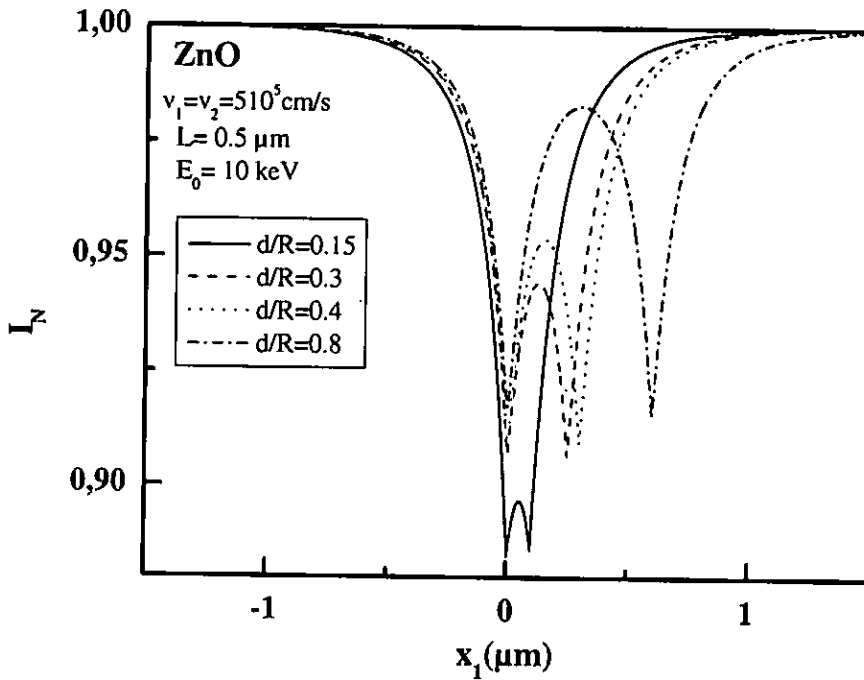


Figure 4.4: Variation de I_N en fonction x_1 pour différentes valeurs de d .

De ce qui précède, il est clair que si deux joints de grains sont proches (le grain est petit) leur interaction électrique est considérable.

Les résultats obtenus ci-dessus, sont calculés en utilisant une fonction de génération ponctuelle (pas d'extension spatiale du volume de génération), qui représente le maximum de résolution qu'on peut obtenir en utilisant la technique EBIC ou CL (il n'y a pas de l'extension spatiale du volume de génération).

Pour montrer l'effet de l'extension spatiale du volume de génération sur le profil EBIC de deux joints de grains adjacents, une génération plus réaliste sans qu'elle soit complexe sera utilisée. Dans le chapitre 2, il est montré que les formes simples de génération peuvent être utilisées dans la modélisation du signal EBIC (CL) si elles sont connectées avec des parcours électroniques adéquats. De plus, il est montré que pour le cas de la génération constante, la forme du volume de génération n'influe pas sur le signal EBIC. Donc, une fonction de génération constante avec un volume cubique est choisie. Le choix de ce volume de génération a pour but de simplifier les calculs comme il a été prouvé dans des travaux ultérieurs [28,87].

4.4.1 Cas de la fonction de génération constante avec un volume cubique

Dans ce cas, le problème reste identique au cas précédent en terme de conditions aux limites. Cependant, la solution de l'équation de continuité est obtenue par la méthode des fonctions de Green en utilisant la même approche de von Roos et Luke [86], le courant EBIC s'exprime par:

Pour $0 \leq x_1 - l/2$ et $x_1 + l/2 \geq d$

$$I_N = I_1 + I_2 + I_3 \quad (4.26)$$

$$I_1 = \frac{\left(\frac{1}{2}l - x\right)}{l} - \frac{8L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^{\infty} \sin(uz_1/L) \sin(ul/2L) A_1 du \quad (4.27)$$

$$A_1 = \frac{L}{\beta^3 B} \left[2\beta\eta_l + (2\beta + \eta_l)\eta_{ll} \exp(\beta d/L) - \eta_l\eta_{ll} \exp(-\beta d/L) \right] \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) * \left(\exp\left(-\frac{\beta(2x_1-l)}{2L}\right) - 1 \right) \quad (4.28)$$

$$I_2 = \frac{d}{l} - \frac{8L^2}{\pi} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^{\infty} \left(\frac{\sin(uz_1/L) \sin(ul/2L)}{(A_2 + A_3 + A_4)} \right) du \quad (4.29)$$

$$A_2 = \frac{\eta_l L}{\beta^3 B} \left[\begin{array}{l} (2\beta + \eta_{ll}) \exp\left(-\beta x_1/L\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\beta d}{L}\right)\right) - \\ \eta_{ll} \exp\left(-\beta(2d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - 1\right) \end{array} \right] \quad (4.30)$$

$$A_3 = -\frac{1}{\beta B} \left[\begin{array}{l} (2\beta + \eta_{ll}) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - 1\right) + \frac{\eta_l \eta_{ll}}{2\beta} \times \\ \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\beta d}{L}\right)\right) - \exp\left(-\beta^3(d-x_1)/L\right) \\ \left(\exp\left(\frac{\beta w}{L}\right) - 1\right) \end{array} \right] \quad (4.31)$$

$$A_4 = \frac{L}{\beta^3} \left(\frac{2\beta + \eta_l}{B} \eta_{ll} + 1 \right) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - 1\right) + \frac{\eta_l \eta_{ll}}{2\beta B} \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\beta d}{L}\right)\right) \quad (4.32)$$

$$I_3 = \frac{\left(x_1 + \frac{l}{2}\right) - d}{l} - \frac{8L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^\infty \left(\frac{\sin(uz_1/L)}{\sin(ul/2L)} A_5 \right) du \quad (4.33)$$

$$A_5 = \frac{L}{\beta^3 B} \left[2\beta\eta_i + (2\beta + \eta_i)\eta_{ii} \exp(\beta d/L) - \eta_i\eta_{ii} \exp(-\beta d/L) \right] \exp\left(-\beta x_1/L\right) \left(\exp\left(-\frac{\beta d}{L}\right) - \exp\left(-\frac{\beta(2x_1 - d)}{2L}\right) \right) \quad (4.34)$$

Pour $x_1 - l/2 \leq d$ et $x_1 + l/2 \geq d$

$$I_N = I_1 + I_2 \quad (4.35)$$

$$I_1 = \frac{\left(x_1 + \frac{l}{2}\right) - d}{l} - \frac{8L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^\infty \left(\frac{\sin(uz_1/L)}{\sin(ul/2L)} A_6 \right) du \quad (4.36)$$

$$A_6 = A_5 \quad (4.37)$$

$$I_2 = \frac{\left(d - \left(x_1 - \frac{l}{2}\right)\right)}{l} - \frac{8L^2}{\pi} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^\infty \left(\sin(uz_1/L) \sin(ul/2L) (A_7 + A_8 + A_9) \right) du \quad (4.38)$$

$$A_7 = \frac{\eta_i L}{\beta^3 B} \left[\begin{aligned} & (2\beta + \eta_{ii}) \exp\left(-\beta x_1/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(l - 2x_1)}{2L}\right) - \exp\left(\frac{-\beta d}{L}\right) \right) - \\ & \eta_{ii} \exp\left(-\beta(2d - x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - \exp\left(\frac{\beta(2x_1 - l)}{2L}\right) \right) \end{aligned} \right] \quad (4.39)$$

$$A_8 = -\frac{L}{\beta^2 B} \left[\begin{aligned} & (2\beta + \eta_{ii}) \exp\left(-\beta(d - x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - \exp\left(\frac{\beta(2x_1 - l)}{2L}\right) \right) \\ & + \frac{\eta_i \eta_{ii}}{2\beta} \times \left[\begin{aligned} & \exp\left(-\beta(d + x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(l - 2x_1)}{2L}\right) - \exp\left(\frac{-\beta d}{L}\right) \right) \\ & - \exp\left(-\beta(3d - x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - \exp\left(\frac{\beta(2x_1 - l)}{2L}\right) \right) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right] \quad (4.40)$$

$$A_9 = \frac{L}{2\beta^3} \left(\frac{2\beta + \eta_I}{B} \eta_{II} + 1 \right) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta d}{L}\right) - \exp\left(\frac{\beta(2x_1-l)}{2L}\right) \right) + \frac{\eta_I \eta_{II} L}{2\beta^2 B} \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(l-2x_1)}{2L}\right) - \exp\left(\frac{-\beta d}{L}\right) \right) \quad (4.41)$$

Pour $x_1 - l/2 \leq 0$ et $x_1 + l/2 \geq 0$

$$I_N = I_1 + I_2 \quad (4.42)$$

$$I_1 = \frac{\left(\frac{1}{2}l - x_1\right)}{l} - \frac{8L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^\infty \left(\frac{\sin(uz_1/L)}{\sin(ul/2L)} A_{10} \right) du \quad (4.43)$$

$$A_{10} = A_1 \quad (4.44)$$

$$I_2 = \frac{\left(x_1 + \frac{l}{2}\right)}{l} - \frac{8L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^\infty \sin(uz_1/L) \sin(ul/2L) (A_{11} + A_{12} + A_{13}) du \quad (4.45)$$

$$A_{11} = \frac{\eta_I L}{\beta^3 B} \left[\begin{array}{l} (2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta x_1/L\right) \left(1 - \exp\left(\frac{-\beta(l+2x_1)}{2L}\right) \right) - \\ \eta_{II} \exp\left(-\beta(2d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(2x_1+l)}{2L}\right) - 1 \right) \end{array} \right] \quad (4.46)$$

$$A_{12} = -\frac{L}{\beta^2 B} \left[\begin{array}{l} (2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(2x_1+l)}{2L}\right) - 1 \right) + \\ \frac{\eta_I \eta_{II}}{2\beta} \times \left[\begin{array}{l} \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \left(1 - \exp\left(\frac{-\beta(l+2x_1)}{2L}\right) \right) - \\ \exp\left(-\beta(2d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(2x_1+l)}{2L}\right) - 1 \right) \end{array} \right] \end{array} \right] \quad (4.47)$$

$$A_{13} = \frac{L}{2\beta^3} \left(\frac{2\beta + \eta_I}{B} \eta_{II} + 1 \right) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \left(\exp\left(\frac{\beta(2x_1+l)}{2L}\right) - 1 \right) + \frac{\eta_I \eta_{II} L}{2\beta^2 B} \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \left(1 - \exp\left(\frac{-\beta(l+2x_1)}{2L}\right) \right) \quad (4.48)$$

Pour $x_1 - l/2 \leq 0$ et $x_1 + l/2 \leq 0$

$$I = 1 - \frac{16L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^{\infty} \left(\beta^{-1} \sin(uz_1/L) \sin\left(\frac{ul}{2L}\right) \sinh\left(\frac{\beta l}{2L}\right) B_1 \right) du \quad (4.49)$$

$$B_1 = \frac{1}{\beta^2 B} \left[\begin{array}{l} 2\beta\eta_1 + (2\beta + \eta_1)\eta_{II} \exp(\beta d/L) \\ -\eta_1\eta_{II} \exp(-\beta d/L) \end{array} \right] \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \quad (4.50)$$

Pour $x_1 - l/2 \geq d$ et $x_1 + l/2 \geq d$

$$I = 1 - \frac{16L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^{\infty} \beta^{-1} \sin(uz_1/L) \sin\left(\frac{ul}{2L}\right) \sinh\left(\frac{\beta l}{2L}\right) B_2 du \quad (4.51)$$

$$B_2 = \frac{1}{\beta^2 B} \left[\begin{array}{l} 2\beta\eta_1 + (2\beta + \eta_1)\eta_{II} \exp(\beta d/L) \\ -\eta_1\eta_{II} \exp(-\beta d/L) \end{array} \right] \exp\left(-\beta x_1/L\right) \quad (4.52)$$

Pour $x_1 - l/2 \geq 0$ et $x_1 + l/2 \leq d$

$$I = 1 - \frac{16L^2}{\pi l^2} \exp(z_1/L) \sinh\left(\frac{l}{2L}\right) \times \int_0^{\infty} \left(\beta^{-1} \sin(uz_1/L) \sin\left(\frac{ul}{2L}\right) \sinh\left(\frac{\beta l}{2L}\right) (B_3 + B_4 + B_5) \right) du \quad (4.53)$$

$$B_3 = \frac{\eta_1}{\beta^2 B} \left[(2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta x_1/L\right) - \eta_{II} \exp\left(-\beta(2d-x_1)/L\right) \right] \quad (4.54)$$

$$B_4 = -\frac{1}{\beta B} \left[\begin{array}{l} (2\beta + \eta_{II}) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) \frac{\eta_1\eta_{II}}{2\beta} \times \\ \left(\exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) - \exp\left(-\beta 3(d+x_1)/L\right) \right) \end{array} \right] \quad (4.55)$$

$$B_5 = \frac{1}{\beta^2} \left(\frac{2\beta + \eta_1}{B} \eta_{II} + 1 \right) \exp\left(-\beta(d-x_1)/L\right) + \frac{\eta_1\eta_{II}}{2\beta B} \exp\left(-\beta(d+x_1)/L\right) \quad (4.56)$$

4.4.2 Résultats

4.4.2.1 Effet de la vitesse de recombinaison

Les figures 4.5 a-c présentent le profil EBIC de deux GBs en fonction de la distance du scan pour les cas (a) $d < R$, (b) $d = R$ et (c) $d > R$.

Pour le cas des faibles valeurs de vitesses de recombinaison du premier GB, l'effet électrique de ce dernier est négligeable quelque soit la distance entre les deux GBs. Cependant, pour le cas des fortes vitesses de recombinaison du premier joint deux cas sont constatés:

- Si la taille du grain est telle que $d \leq R$, on ne peut pas distinguer l'effet de chaque GB sur le profil EBIC calculé. Ce dernier est similaire à celui obtenu pour un seul GB isolé mais avec une large largeur à mi-hauteur, qui est proportionnelle à la vitesse de recombinaison et elle diminue avec la diminution de v_1 jusqu'à ce qu'elle devienne identique à celle d'un profil EBIC d'un GB isolé. Le minimum du profil EBIC se localise au milieu des deux joints et il commence à se déplacer vers le deuxième joint lorsque la vitesse de recombinaison du premier joint (v_1) diminue et vis-versa.
- Si, $d > R$ (figure 4c), la signature des deux GBs sur le profil EBIC calculé est remarquable. L'activité électrique du GB baisse avec la diminution de sa vitesse de recombinaison. Si cette vitesse est faible, l'activité devient indétectable. Ce résultat semble correct du fait que si la vitesse de recombinaison est petite, la majorité des porteurs arrivant au joint peuvent le traverser sans être recombinés. Il faut noter que l'activité électrique des joints de grains dépend fortement de la présence des impuretés dans le joint. Généralement, un GB ne contenant pas d'impuretés métalliques, dite « joint de grain propre », présente une faible activité électrique.

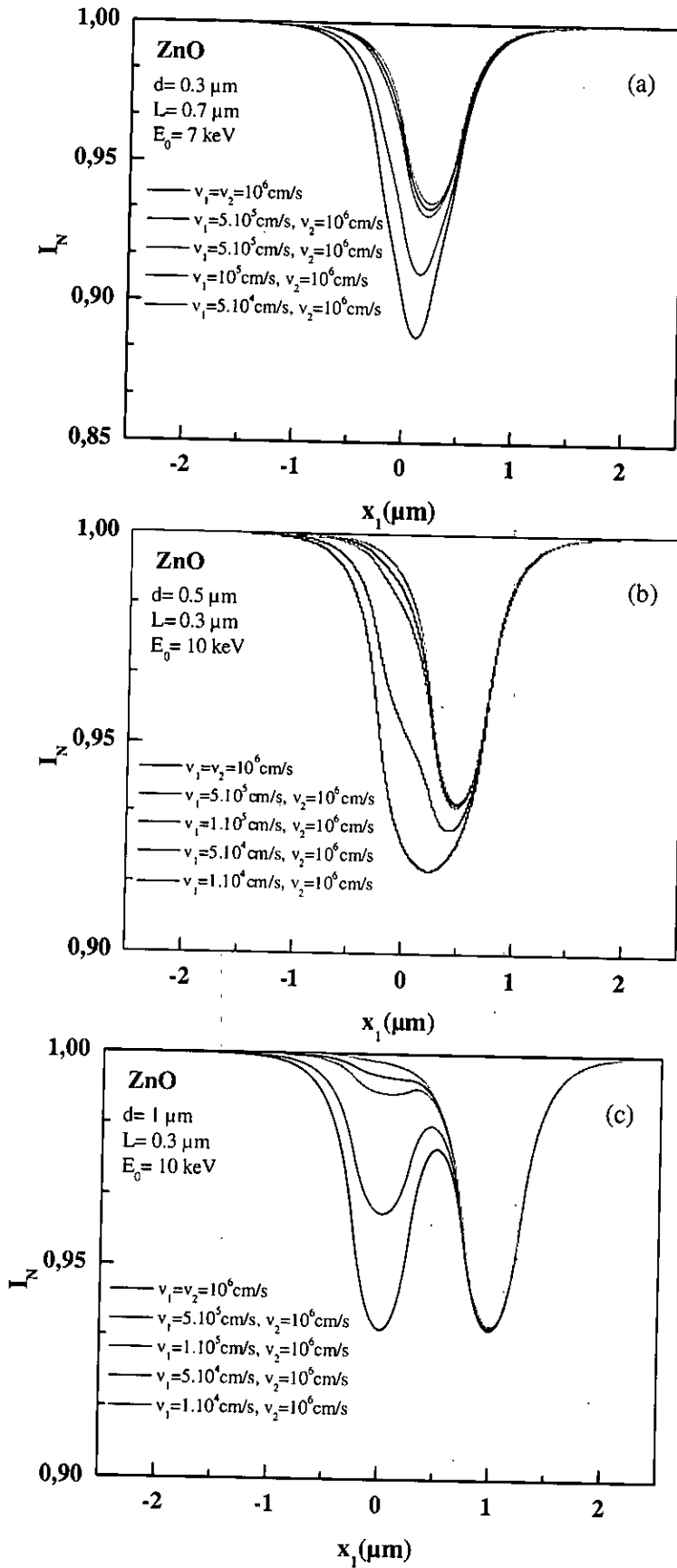


Figure 4.5: Variation du profil EBIC en fonction de la distance entre les deux GBs pour différentes valeurs de la vitesse de recombinaison surfacique. (a) $d/R = 0.5$, (b) $d/R = 1$ et (c) $d/R = 2$.

4.4.2.2 Effet de la longueur de diffusion

Les figures 4.6a, b présentent la variation du signal EBIC de deux GBs en fonction de la distance du scan dans le cas $R < d$ et $R > d$, respectivement

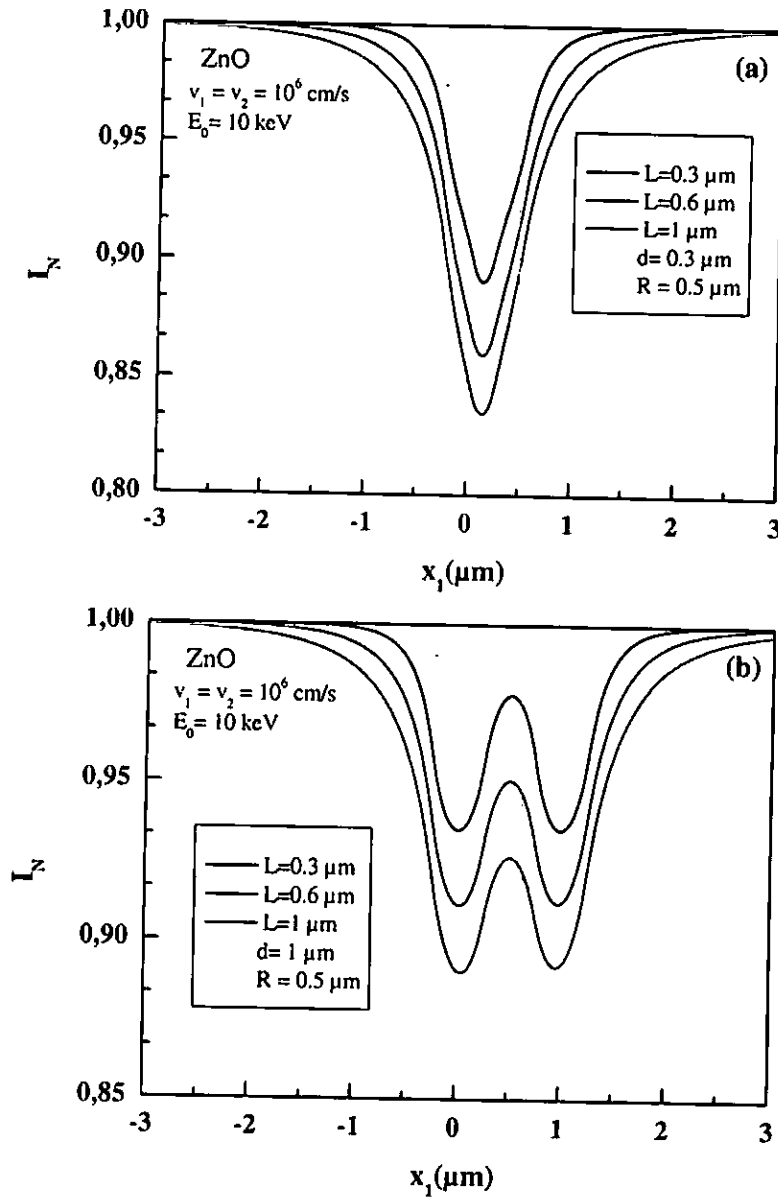


Figure 4.6: Variation du profil EBIC en fonction de la distance entre les deux GBs pour différentes valeurs de la longueur de diffusion. (a) $d = 0.3 \mu\text{m}$ et (b) $d = 1 \mu\text{m}$.

La longueur de diffusion joue un rôle prédominant sur le profil EBIC de deux GBs. L'intensité du signal EBIC et la largeur à mi-hauteur du profil augmentent avec l'augmentation de la longueur de diffusion. Donc la longueur de diffusion influe sur la résolution spatiale du profil EBIC des deux joints. Ainsi, elle diminue avec l'augmentation de L . Ce résultat est en accord avec celui trouvé pour le cas d'un seul défaut [62,63]. Si $d > R$, le signal EBIC calculé

montre clairement la signature des deux GBs. L'interaction entre les deux joints augmente avec l'augmentation de L , se qui se traduit par une diminution de la hauteur du profil EBIC dans la zone située entre les deux GBs. Le profil devient presque similaire à celui d'un seul GB pour $L > 1\mu\text{m}$. Ceci confirme le fait qu'il faut que $d > 2L$ pour pouvoir constater l'activité électrique de deux GBs séparément.

4.4.2.3 Effet de la distance d entre les deux joints de grain

La distance d entre les deux GBs joue un rôle important sur leur l'interaction et en conséquence sur leurs profils EBIC. Plus cette distance augmente plus l'interaction entre les deux GBs diminue comme il est montré sur les figures 5.7a-c.

Pour les trois cas, le signal EBIC de deux GBs est distinct lorsque $d > R$. Donc, il est très crucial de choisir une énergie d'électrons primaires qui génère un volume de génération de rayon inférieur à d . De plus, l'intensité du signal EBIC calculé diminue avec l'augmentation de d et par conséquence l'interaction entre les deux GBs diminue.

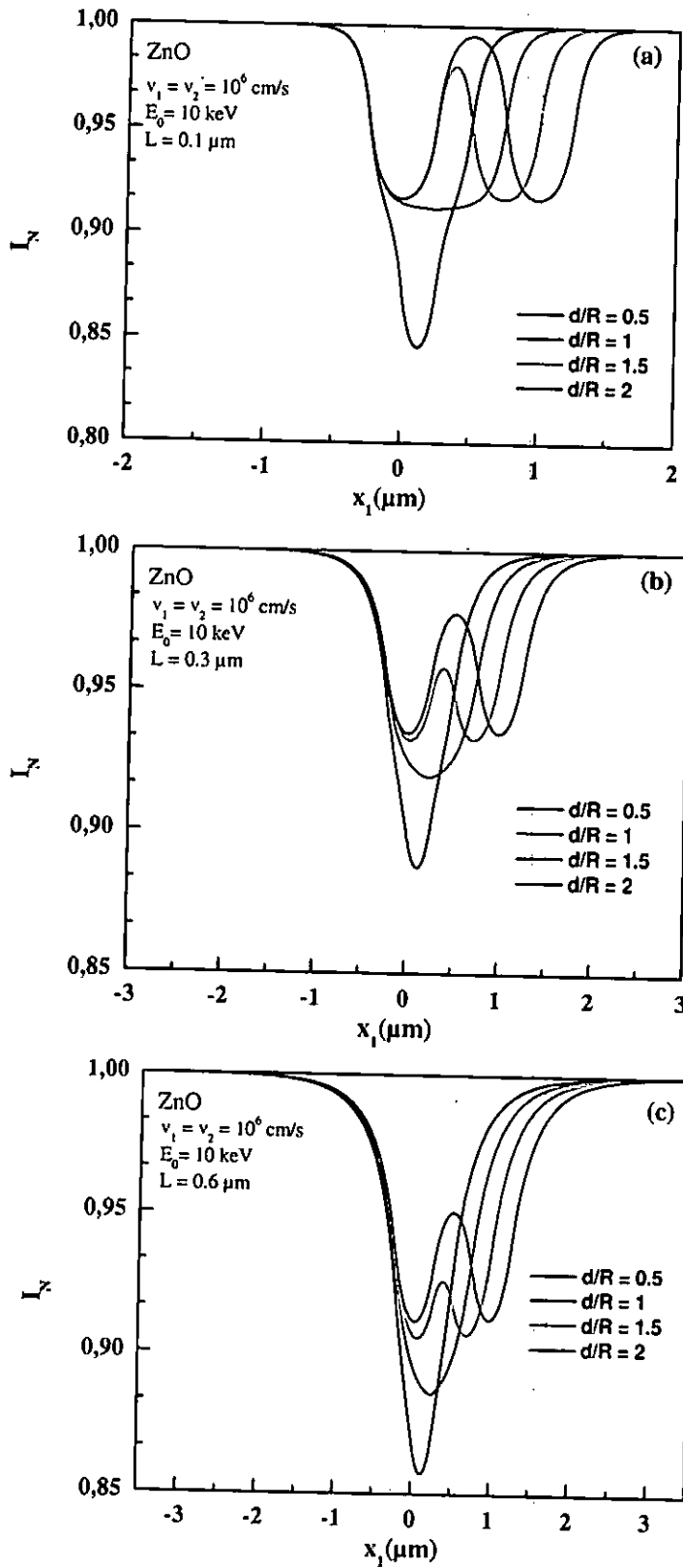


Figure 4.7: Variation du profil EBIC en fonction de la distance de scan pour différentes valeurs de la distance entre les deux joints de grain d .

4.4.2.4 Détermination de la position des deux joints de grains

L'extension spatiale du volume de génération rend, dans certains cas, la distinction de la contribution de chaque GB dans la construction du signal EBIC impossible. Dans le cas $d < R$, on observe une activité électrique importante sur le grain que sur le GB lui-même (la recombinaison sur le grain est supérieure que sur les joints de grains, voir figure 4.8a). De même, si la vitesse de recombinaison des porteurs de charges sur un GB est faible, ce dernier donne une faible activité électrique. Cette activité devient indétectable si ce joint de grain se trouve au voisinage d'un autre joint de grain caractérisé par une forte activité électrique (grande vitesse de recombinaison). Dans des situations similaires, l'analyse du profil EBIC donne la contribution des deux joints de grain. Alors que dans, le cas des semiconducteurs de taille miniaturisée (défauts sont adjacents), une question peut se poser: comment peut-on savoir si le signal EBIC enregistré est le résultat d'un seul défaut ou qu'il représente la contribution de plusieurs défauts et comment peut-on faire pour quantifier la contribution de chaque défaut?

Pour pouvoir répondre à cette question, on propose une nouvelle approche du traitement du signal EBIC issu de deux GBs. La deuxième dérivée du signal EBIC est utilisée à la place du signal EBIC. Cette approche a été utilisée pour la détermination de la longueur de diffusion d'un semiconducteur ; son application est sa validité a été l'objet de plusieurs publications [67,95, 96]. Dans notre cas, son utilisation n'est pas pour la détermination de la longueur de diffusion, mais pour la localisation de la position des défauts lorsque la résolution spatiale du signal EBIC enregistré ne le permet pas.

Le profil EBIC calculé et sa deuxième dérivée peuvent être divisés en trois zones comme il est montré sur les figures 4.8 et 4.9.

La première zone représente l'interaction du premier GB. Le signal EBIC dans cette partie commence à diminuer jusqu'à ce que le premier GB soit atteint.

La deuxième zone présente la zone d'interaction entre les deux GBs. La forme du profil EBIC de cette région dépend de la distance entre les deux GBs. Si elle est très petite, le profil EBIC continue sa diminution jusqu'à ce qu'il atteigne son minimum après, il reprend sa croissance (figure 5.8). Si elle est grande, le profil EBIC commence à croître jusqu'à ce qu'il atteigne un maximum, puis, il diminue quand on s'approche du deuxième GB.

La troisième zone représente la zone de l'interaction du deuxième GB. Le profil EBIC dans cette zone commence à croître jusqu'à ce qu'il atteigne sa valeur initiale.

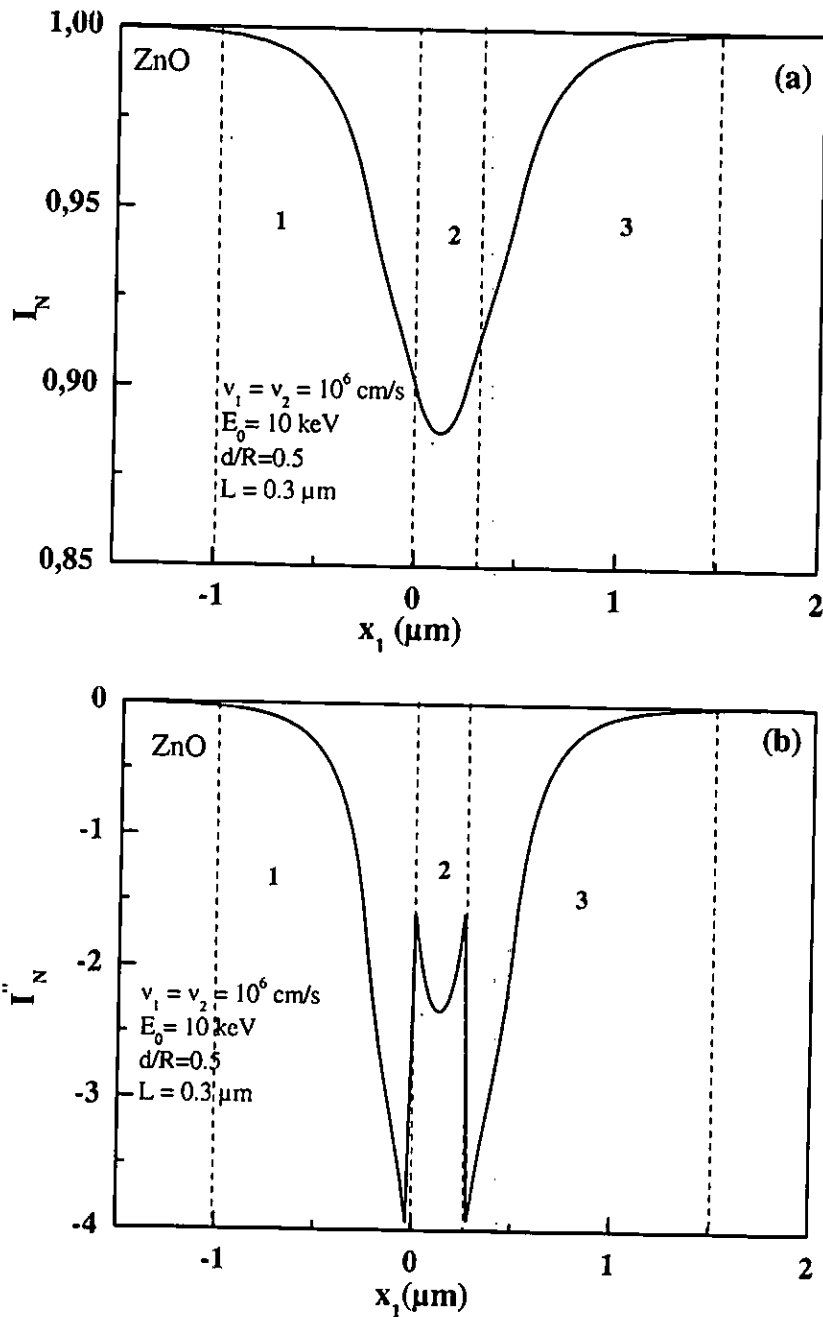


Figure 4.8: Variation du profil EBIC et son deuxième dérivé vs la distance de scann x_1 pour $d < R$.

Pour le profil de la deuxième dérivée du signal EBIC, la même démarche est faite. Dans ce cas, la position des GBs présente un point d'inflexion, où le profil change de direction quand il atteint le GB. Juste après, il change encore de direction dans la zone d'interaction. Par conséquent, il est possible de déterminer la position du défaut en utilisant la deuxième dérivée du profil EBIC. Expérimentalement, la contrainte majeure pour l'utilisation de cette méthode est dans la détermination de la distance Δx qu'on peut choisir pour faire deux mesures distinctes, puisque la précision de la mesure dépend de cette distance. Cette question a été traitée par Luke

dans le cas de la détermination de la longueur de diffusion en utilisant la deuxième dérivée du profil EBIC [96].

La figure 4.9 montre que la variation du profil EBIC de la deuxième dérivée est similaire à celle de l'EBIC ordinaire. Donc, le profil de la deuxième dérivée du signal EBIC peut donner des informations sur tous les paramètres du défaut, à savoir sa vitesse de recombinaison et la distance entre les défauts.

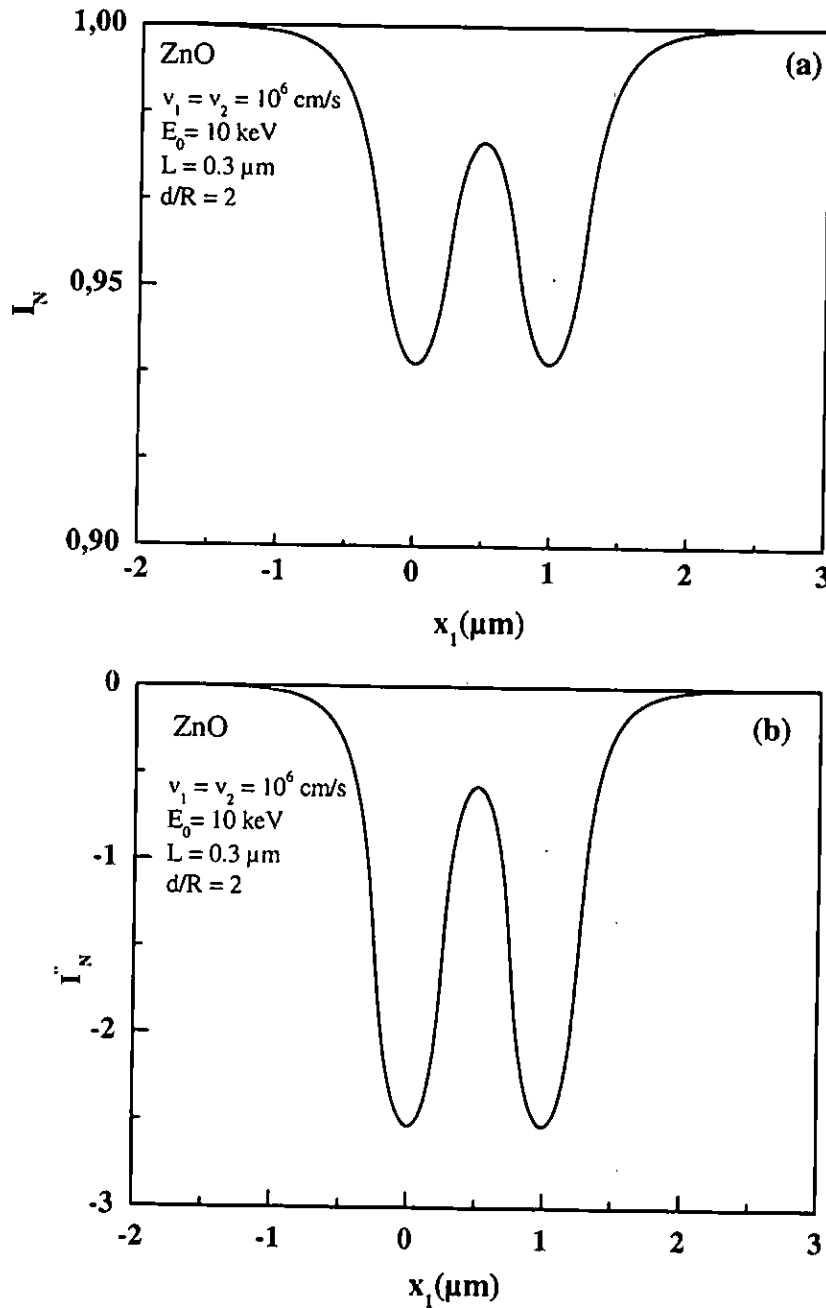


Figure 4.9: Variation du profil EBIC et son deuxième dérivée en fonction de la distance de scann x_1 pour $d=2R$ respectivement.

Dans le cas d'un GB avec une faible vitesse de recombinaison, il a été montré précédemment que son signal EBIC est indiscernable de celui caractérisé par une forte vitesse de recombinaison. La figure 4.10 présente la variation du profil EBIC et de sa deuxième dérivée pour deux GBs. Le premier est caractérisé par une faible vitesse de recombinaison par contre le deuxième est caractérisé par une forte vitesse de recombinaison. Le profil de la deuxième dérivée peut distinguer entre deux GBs proches même si l'un des deux présente une faible activité électrique.

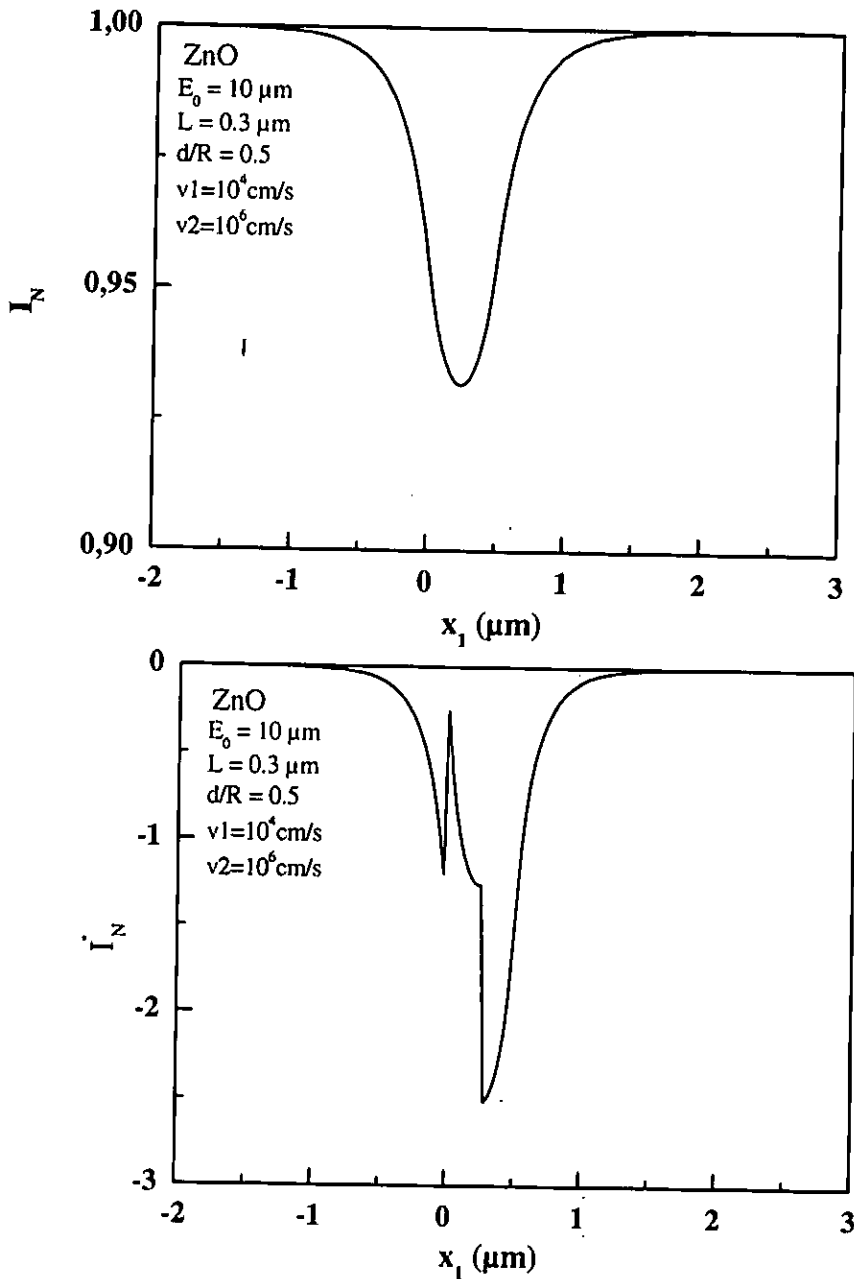


Figure 4. 10: Variation du profil EBIC et sa deuxième dérivée en fonction de la distance de scannage x_1 pour deux GBs le premier avec petite valeur de v , et le deuxième avec grande valeur de v , pour le cas $d < R$.

Si les deux GBs sont éloignés, le profil de la deuxième dérivée ne peut pas détecter la position du joint caractérisé par une faible activité électrique.

Ceci est expliqué par le fait que la technique EBIC est une technique de caractérisation à caractère locale et les informations obtenues sont généralement liées au volume de génération. Donc, lorsque la distance entre les GBs est supérieure à l'extension spatiale du volume de génération l'interaction entre les GBs est minime voir nulle, donc le signal du GB qui présente une faible activité électrique ne peut être détecté.

4.5 Conclusion

Le profil EBIC de deux joints de grains a été modélisé à l'aide d'un modèle mathématique simple. Nous avons montré que l'extension spatiale du volume de génération, la vitesse de recombinaison des deux GBs et la distance les séparant contrôlent la forme et l'intensité du profil EBIC obtenu.

Nous avons montré aussi que la résolution du profil dépend de la longueur de diffusion et du volume de génération. La position des GBs peut être déterminée avec précision lorsque la deuxième dérivée du profil EBIC est utilisée.

Il est possible aussi d'utiliser la méthode de la deuxième dérivée pour extraire les paramètres intrinsèque des GBs. En plus, cette technique sera bénéfique pour la caractérisation des nano-semiconducteurs par la technique EBIC (CL), car elle résout le problème de la résolution spatiale du profil EBIC (CL) calculé.

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons modélisé les signaux EBIC et cathodoluminescence (CL) résultant d'une interaction d'un faisceau d'électrons avec un semiconducteur avec et sans défauts. L'effet des différents paramètres tels que la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison des porteurs sur l'intensité et la forme des signaux EBIC et CL a été étudié.

Le problème du choix des parcours électroniques à utiliser avec la fonction de génération ponctuelle et constante a été résolu par la détermination des expressions mathématiques pour ces derniers. La modélisation des signaux EBIC et CL en considérant ces nouveaux parcours a conduit à une précision nette dans la détermination de la longueur de diffusion et la vitesse de recombinaison. La démonstration a été faite pour le cas du fit des courbes théoriques et expérimentales de l'efficacité de collecte EBIC des diodes à base d'une large gamme de semiconducteurs (Si, Ge, GaAS, InP).

Dans le cas où la sonde électronique est fixe (faisceau électronique perpendiculaire à la jonction de collecte), les résultats obtenus, pour le cas d'une fonction de génération constante, ont montré que le parcours électronique est indépendant de la longueur de diffusion. Cependant, une légère dépendance est constatée pour le cas de la fonction de génération ponctuelle. De plus, l'utilisation des modèles mathématiques basés sur la fonction de génération ponctuelle et uniforme et la prise en considération de parcours phénoménologiques a permis la reproduction de courbes expérimentales d'efficacité de collecte EBIC de plusieurs diodes à base de différents semiconducteurs.

Les expressions mathématiques des parcours électroniques obtenues pour cette configuration sont:

$$R_{php}(\mu m) = \frac{0.329}{\rho} E_0^{1.19} \text{ pour la fonction de génération ponctuelle.}$$

$$R_{phc}(\mu m) = \frac{0.046}{\rho} E_0^{1.67} \text{ pour la fonction de génération constante.}$$

Dans le cas de la configuration où la sonde électronique est mobile (faisceau électronique parallèle à la jonction de collecte), nous avons montré que les parcours extraits sont indépendants de la longueur de diffusion et de la vitesse de recombinaison. De plus, pour le cas de la fonction de génération constante, la forme du volume de génération n'influe pas sur le signal EBIC calculé. Par contre, dans le cas de la fonction de génération ponctuelle, nous avons montré qu'une meilleure précision est obtenue si la condition $L \geq R_{php}/3$ est respectée.

Les expressions mathématiques du parcours électronique obtenus pour cette configuration sont:

Conclusion Générale

$R_{phc}(\mu m) = \frac{0.066}{\rho} E_0^{1.67}$ pour la fonction de génération constante.

$R_{php}(\mu m) = \frac{0.056}{\rho} E_0^{1.90}$ pour la fonction de génération ponctuelle.

Pour la modélisation du signal CL, les expressions des parcours électroniques extraits sont similaires à celles obtenues pour la configuration EBIC avec le faisceau électronique parallèle à la jonction de collecte. L'utilisation des parcours extraits a permis de réduire le désaccord entre les courbes CL calculées par les modèles à base de la fonction de génération constante et ponctuelle et celles obtenues par des modèles utilisant la fonction de génération gaussienne. Cependant, il est recommandé d'utiliser des énergies d'excitation $E_0 \leq 25 \text{keV}$ pour obtenir un bon accord si les calculs sont faits en considérant les modèles à base de la fonction de génération ponctuelle.

L'utilisation des parcours phénoménologiques dans la modélisation du contraste EBIC des défauts ont permis de minimiser le désaccord existant entre les résultats obtenus en utilisant les deux fonctions de génération. Nous avons montré que les calculs des contrastes EBIC de la dislocation, pour les différentes fonctions de génération ne se concordent pas dans la plage de faibles énergies et aux grandes longueurs de diffusion.

Concernant le contraste EBIC des joints de grains, nous avons remarqué que le désaccord disparaît si les parcours électroniques phénoménologiques sont utilisés avec la fonction de génération ponctuelle et constante.

Nous avons également proposé deux modèles mathématiques pour décrire le signal EBIC provenant de deux joints de grain adjacent et CL provenant et d'un semiconducteur de forme cylindrique. Nous avons constaté que le rayon du cylindre et sa longueur affecte le signal CL. L'effet de la longueur de diffusion des porteurs, la vitesse de recombinaison sur les parois et le coefficient d'absorption sur le signal CL sont données par des courbes d'efficacité de collecte. Les résultats ont montré que signal CL est indépendant de la vitesse de recombinaison des porteurs à la surface libre du fil mais il dépend de la vitesse de recombinaison de la surface latérale. Le signal CL diminue pour les faibles valeurs de la vitesse de recombinaison. Le signal augmente avec l'augmentation de la longueur de diffusion et diminue avec l'augmentation du coefficient d'absorption. Une saturation de ce signal est enregistrée pour les fortes valeurs du coefficient d'absorption ($\alpha \geq 10^4 \text{cm}^{-1}$). Nous avons constaté que le modèle proposé ne permis pas d'extraire les grandes longueurs de diffusion et les grandes valeurs des vitesses de recombinaison surfaciques.

La modélisation du signal EBIC de deux joints de grain (GBs) proches d'un semiconducteur poly-cristallin nous a permis de montrer que l'intensité et la forme du profil

Conclusion Générale

EBIC calculé dépendent fortement de la distance séparant les deux GBs et de la vitesse de recombinaison de ces deux derniers. Le profil EBIC calculé est contrôlé par le joint de grain qui possède la plus grande vitesse de recombinaison. De plus, lorsque l'extension spatiale du volume de génération est plus grande que le volume du grain (la distance entre les deux joints), le profil EBIC calculé est similaire à celui d'un seul GB et les résultats obtenus représentent la contribution des deux GBs. Par conséquent, la détermination de la contribution de chaque GB dans la formation du signal EBIC formé ainsi que leurs positions deviennent impossible. Ce problème de résolution spatiale du signal EBIC calculé est résolu par la proposition d'une nouvelle approche. Cette approche consiste essentiellement à l'utilisation de la deuxième dérivée du profil. L'approche a permis, non seulement, de montrer la contribution de chaque joint de grain dans la formation du signal EBIC calculé, mais aussi la localisation exacte de la position des joints. Cette méthode pourra avoir un impact particulier lors de la caractérisation des semiconducteurs nano-structurés par la technique EBIC, car elle élimine la contrainte de la résolution spatiale du profil obtenu.

ANNEXES

ANNEXE 1

1. Modèle Wu Wittry

Si on prend l'origine des coordonnées à l'interface entre la zone désertée et la zone neutre (voire figure 2.1) on obtient :

$$u_s = u_m + u_d$$

avec, $u_d = \rho z_d / R$, $u_m = \rho_m z_m / R$, $\omega = R / \rho L_p$ et R exprimer en g/cm^2

1.1 Fonction de Génération polynomiale

$$\phi(u) = G_0(0.6 + 6.21u - 12.4u^2 + 5.69u^3)$$

Si $u_s > 1.1$

$$J_d = -qG_0(0.6(1.1 - u_s) + \frac{6.21}{2}(1.1 - u_s^2) - \frac{12.4}{3}(1.1 - u_s^3) + \frac{5.69}{4}(1.1 - u_s^4))$$

$$J_b = 0$$

Si $u_s < 1.1$

$$J_d = -qG_0(0.6u_d + \frac{6.21}{2}(u_s^2 - u_m^2) - \frac{12.4}{3}(u_s^3 - u_m^3) + \frac{5.69}{4}(u_s^4 - u_m^4))$$

$$J_b = qG_0\left(\frac{0.6}{\omega}(\exp(\omega(u_s - 1.1)) - 1) + \frac{6.21}{\omega}(\exp(\omega(u_s - 1.1))\left(1.1 - \frac{1}{\omega}\right) - (u_s + \frac{1}{\omega}))\right. \\ \left. - \frac{12.4}{\omega}\left(\exp(\omega(u_s - 1.1))\left(1.1 + \frac{2}{\omega}\left(1.1 + \frac{1}{\omega}\right)\right) - (u_s^2 + \frac{2}{\omega}\left(u_s + \frac{1}{\omega}\right))\right)\right. \\ \left. + \frac{5.69}{\omega}\left\{1.1^3 \exp(\omega(u_s - 1.1)) + \frac{3}{\omega} \exp(\omega(u_s - 1.1))\left[1.1^2 + \frac{2}{\omega}\left(1.1 + \frac{1}{\omega}\right)\right]\right.\right. \\ \left.\left. - u_s^3 - \frac{3}{\omega}\left[u_s^2 + \frac{2}{\omega}u_s + \frac{1}{\omega}\right]\right\}\right)$$

1.2 Fonction de génération constante

$$\phi(u) = G_0$$

Si $u_s > 1$

$$J_a = -qG_0 \int_{-u_d}^{1-u_s} du = qG_0(u_m - 1) \text{ et } J_b = 0$$

Si $u_s < 1$

$$J_a = -qG_0 \int_{-u_d}^0 du = -qG_0 u_d$$

$$J_b = q \frac{G_0}{\omega} (\exp(\omega(u_s - 1)) - 1)$$

1.3 Fonction de génération ponctuelle

$$\phi(u) = G_0 \delta(u - u')$$

avec, $u' = \frac{1}{3} - u_s$

Si $u' < 0$ ou $u_s > 1/3$

$$J_a = -qG_0 \int_{-u_d}^0 \delta(u - u') du = -qG_0$$

et $J_b = 0$

Si $u' > 0$ ou $u_s < 1/3$

$J_a = 0$

$$J_b = -qG_0 \exp\left(\omega\left(\frac{1}{3} - u_s\right)\right)$$

ANNEXE 2

2. Modèle Tabet Toronto

En premier lieu nous rappelons les expressions nécessaires qui rentrent dans le calcul de l'efficacité de collecte. Les constantes en question sont ceux relatives aux trous G_p , H_p et aux électrons, G_n , ainsi que la densité du courant dans le volume J_b^0 donnée par ww sont les suivantes:

$$G_p = \int_0^{z_d} \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}(\alpha^{\frac{1}{2}}(z' - z_d)) \frac{g(z' + \frac{z_m \rho_m}{\rho})}{D_p} dz'$$

$$H_0 = \frac{L_p}{D_p} \int_0^{z_d} g(z') dz'$$

$$G_n = \int_0^{z_d} \alpha^{\frac{1}{2}} \frac{g(z' + \frac{z_m \rho_m}{\rho})}{D_n} F\left[\alpha^{\frac{1}{2}}(z' - z_d)\right] dz'$$

$$J_b^0 = -D_p \frac{d}{dz} \left\{ \frac{L_p}{D_p} \int g(z' + \frac{z_m \rho_m}{\rho}) \left[\exp\left(-\frac{|z - z'|}{L_p}\right) - \exp\left(-\frac{(z + z' - z_d)}{L_p}\right) \right] dz' \right\}_{z=z_d}$$

2.2 Fonction de génération constante:

Si $R < z_d + z_m \rho_m / \rho$

$$H_p = \frac{L_p G_0}{D_p} (1 + u_m) \quad \text{et} \quad J_b = 0$$

Si $R > z_d + z_m \rho_m / \rho$

$$H_p = \frac{L_p G_0}{D_p} u_d$$

J_b a la même expression que celle donnée dans le cadre du modèle ww pour le cas ($u_s < 1$) pour la fonction de génération constante

Remarque:

Il a noté que pour modèle TT et dans le cas des fonctions de génération polynomiale et constante, les bornes supérieures des intégrales H_p , G_n et G_p prennent la valeur $R - z_m$ au lieu de la valeur z_d dans le cas où $R < z_d + z_m \rho_m / \rho$. Les deux intégrales G_n et G_p sont calculées numériquement.

2.2 Fonction de génération ponctuelle:

Si $u_s > 1/3$

$$G_p = \left(G_0 \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{1/2} \right) / \left(\operatorname{erf} \left(\alpha^{1/2} \left(\frac{1}{3} - u_s \right) R \right) 2D_p \right)$$
$$H_p = \frac{L_p G_0}{D_p}$$

$$G_n = \left(G_0 / (D_n \alpha^{1/2}) \right) \operatorname{Fex} \left(\alpha^{1/2} \left(\frac{1}{3} - u_s \right) R \right) \text{ et } J_b^0 = 0$$

si $u_s < 1/3$

- 1- Les expressions H_p , G_n et G_p sont nulles.
- 2- Dans ce cas, J_b a la même expression que celle obtenue dans le cadre du modèle ww en utilisant la fonction de génération ponctuelle pour le cas $u_s < 1/3$.

Références

Références

- [1] H. A. Bethe, *Handb. d. phys.* 24, 519 (1933).
- [2] M. J. Berger and S. M. Seltzer, *Nat. Acad. Sci-Nat. Rest. Concl Publ.* 1133, 205 (1964).
- [3] D. F. Kyser, *Proc of the 6th Int. Conf. On X-Rays Optics and Microanalysis*, September 5th to 10th, Osaka, Univ. Tokyo Press, 147 (1972).
- [4] K. Kanaya and S. Okayama, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 5, 43 (1972).
- [5] T. E. Everhart and P. H. Hoff, *J. Appl. Phys.* 42, 13, 5837 (1971).
- [6] B. G. Yacobi and D. B. Holt, *J. Appl. Phys.*, Vol. 59, R1 (1986).
- [7] H. J. Fitting, H. Glaefcke and W. Wild, *Phys. Status Solidi A* 43, 185 (1977).
- [8] C. J. Wu and W. R. Wittry, *J. Appl. Phys.* 49, 2827 (1978).
- [9] C. A. Klein, *J. Appl. Phys.* 39, 2029 (1968).
- [10] C. A. Klein, *Phys. Lett. A*, 24, 513 (1967).
- [11] H. R. Zulleger, *J. Appl. Phys.* 42, 5570 (1971).
- [12] C. Donolato, *Phys. Status Solidi A* 65, 649 (1981).
- [13] L. Pasmann, *Phys. Status Solidi A* 84, 133 (1984).
- [14] C. Donolato, *Optiki* 52, 19 (1979).
- [15] C. Parish and P. Russell, *App. Phys. Lett.* 89, 192108 (2006).
- [16] B. Akamatsu, and J. P. Henoc, *J. Appl. Phys.* 52, 7245 (1981).
- [17] D. Drouin, A. R. Coutre, R. Gauvin, P. Hovington, P. Horny and H. Demers, *CASINO V 2.42 software*; www.gel.usherbrooke.ca/casino/.
- [18] H. J. Lemy, *J. Appl. Phys.* 53, R51 (1981).
- [19] E. B. Yakimov, *Scanning Microscopy*, 6, 81 (1992).
- [20] K. S. Vincent, O. Kurniawan, G. Mldovan and C. J. Humphreys, *J. Appl. Phys.* 100, 114501 (2006).
- [21] D. E. Burk and R. Sundaresan, *Sol.Stat. Elec.* 27, 59 (1984).
- [22] M. Kittler and W. Seiffert, *Rev. Phys. Appl. Colloque C6, Suppl.* 6, 24, 31 (1989).
- [23] H. Higuchi and H. Tamura, *Jap. Jour. Appl. Phys.* 4, 316 (1965).
- [24] W. Czaja, "Response *J. Appl. Phys.* 37, 4236-4248, (1966).
- [25] D. B. Holt, "Quantitative scanning electron microscopy", London; New York: Academic Press (1974).
- [26] T. Fuyuki, H. Matsunami, and T. Tanaka, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 13, 1093 (1980).
- [27] C. Donolato, *Sol. Stat. Elec.* 25, 1077 (1982).

- [28] K. L. Luke, O. von Roos, and L.J. Cheng, *J. Appl. Phys.* **57**,1978 (1985)
- [29] K. L. Luke, *J. Appl. Phys.* **75**, 1623 (1994)
- [30] K. L. Luke, *J. Appl. Phys.* **76**, 1081 (1994)
- [31] J. D. Kamm, *Sol. Stat. Elec.* **19**, 921 (1976).
- [32] V. I. Petrov and R. S. Gvozdover, *Scanning*, **13**, 410 (1991).
- [33] D. Pastré, Thèse de Doctorat, Université De Reims Champagne Ardenne (1999).
- [34] B. G. Yacobi and D. B. Holt, "Cathodoluminescent Microscopy of Inorganic Solids", Plenum Press (1991).
- [35] W. Hergert, P. Reck, L. Pasmann and J. Schreiber, *Phys. Status Solidi A* **101**, 611 (1987).
- [36] J. Schreiber, S. Hildebrandt and H. S. Leipner, *Phys. Status Solidi A* **138**, 705 (1993).
- [37] L. J. Brillson, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45**, 183001 (2012).
- [38] N. Tabet and R. J. Tarento, *Phil. Mag.* **B59**, 243 (1988).
- [39] D. J. Mekki, R. J. Tarento and N. Tabet, *Phys. Status Solidi A* **130**, 383 (1992).
- [40] Y. Beggah, N. Tabet and R.-J. Tarento, *Mater. Sci. Eng. B*, **24**, 101 (1994).
- [41] Y. Beggah, D. E. Mekki, N. Tabet, and R.-J. Tarento, *Sol. Stat. Elec.* **42**, 379 (1998).
- [42] W. van Roosboeck, *J. Appl. Phys.* **26**, 4 (1955).
- [43] J. F. Beress and D. Lafueille, Proc. 25th anniversary Meeting at EMAG, Institute of Physics, 220 (1971).
- [44] F. Berzt and H. K. Kuiken, *Sol. Stat. Elec.* **19**, 437 (1976).
- [45] C. Donolato, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 120 (1983).
- [46] K. L. Luke, *J. Appl. Phys.* **57**, 1978 (1985).
- [47] O. Kurniawan and V. C. Ong, *IEEE Trans. Electron Devices* **56**, 1094 (2009).
- [48] D. B. Wittry and F. Kyzer, *J. Appl. Phys.* **38**, 375 (1967).
- [49] W. Hergert and L. Pasmann, *Phys. Status Solidi A* **85**, 641 (1984).
- [50] W. Hergert, S. Hildebrandt, *Phys. Status Solidi A* **102**, 819 (1987).
- [51] A. Djemel, R. J. Tarento, Y. Marfaing and A. Nouiri, *Phys. Status Solidi A* **168**, 425 (1998).
- [52] A. Djemel, A. Nouiri, S. Kouissa and R. J. Tarento, *Phys. Status Solidi A* **191**, 223 (2002).
- [53] L. Pasmann, *Ultramicroscopy* **6**, 237 (1981).
- [54] L. Pasmann, H. Blumtritt and R. Gleichmann, *Phys. Status Solidi A* **70**, 197 (1982).
- [55] C. Donolato, *Appl. Phys. Lett.* **34**, 80 (1979)
- [56] A. Jackubowicz, *J. Appl. Phys.* **59**, 2205 (1986).
- [57] L. Pasmann, *J. Appl. Phys.* **69**, 633 (1991).
- [58] C. Donolato, *J. Appl. Phys.* **70**, 7657 (1991).
- [59] C. Donolato and L. Pasmann, *Rev. Phys. Appl.* **25**, 1107 (1990).

- [60] J. L. Farvacque and B. Sieber, Rev. Phys. Appl. 25, 353 (1990).
- [61] J. L. Farvacque and B. Sieber, Rev. Phys. Appl. 25, 1109 (1990).
- [62] J. Marek, J. Appl. Phys. 53, 1454 (1982).
- [63] C. Donolato, J. Appl. Phys. 54, 1314 (1983).
- [64] N. Tabet, Thèse de Doctorat es-Science-Université de Paris Sud, Centre d'Orsay (1989).
- [65] J. M. Bonard and J. D. Ganière, J. Appl. Phys. 77, 3257 (1996).
- [66] D. S. H. Chan, V. K. S. Ong, and J. C. H. Phang, IEEE Trans. Electron Devices, 42, 963 (1995).
- [67] V. K. S. Ong and D. Wu, IEEE Trans. Electron Devices, 48, 332 (2001).
- [68] D. Wu and V. K. S. Ong, IEEE Trans. Electron Devices, 49, 1455 (2002).
- [69] E. B. Dorothea, IEEE Trans. Electron Devices, 29, 1887 (1982).
- [70] R. Corkish, T. Puzzer, A. B. Spoul and K. L. Luke, J. Appl. Phys. 84, 5473 (1998).
- [71] Y. Beggah, Thèse de Magistère, Université de Constantine (1992).
- [72] J. Fiddicker and G. Oelgart, Phys. Status Solidi A 87, 383 (1985).
- [73] J. L. Maurice, J. Phys. III 3, 603 (1993).
- [74] P. M. Morse and H. Feshbach, "Methods of Theoretical Physics", New York: McGraw-Hill (1953).
- [75] J. C. H. Phang, K. L. Pey and D. H. S. Chan, IEEE Trans. Electron Devices 39, 782 (1992).
- [76] S. I. Maximenko and T. S. Sudarshan, J. Appl. Phys. 97, 074501 (2005).
- [77] C. Weisbuch, B. Vinter, "Quantum semiconductor structures: fundamentals and applications", Boston: Academic Press (1991).
- [78] B. Tian, X. Zheng, T. J. Kempa, Y. Fang, N. Yu, G. YU, J. Huang and C. M. Leiber, Nature, 449, 885 (2007).
- [79] A. I. Hochbaum and P. Yang, Chim. Rev. 110, 527 (2010).
- [80] M. Law, L. E. Green, J. C. Johnson, R. Saykally and P. Yang, Nature Mater. 4, 445 (2005).
- [81] C. Q. Chem, Y. Shi, Y. S. Zhang, J. Zhu and Y. J. Yan, Phys. Rev. Lett. 96, 075505 (2006).
- [82] L. T. Ngo, D. Almecija, J. E. Sader, B. Daly, N. Petkov, J. D. Holmes, D.E.rts and J. J. Bouland, Nano. Lett. 6, 2964 (2006).
- [83] S. Barth, C. Harnagea, S. Mathur and F. Rosei, Nanotechnology 20, 115705 (2008).
- [84] S. Berth, F. H. Ramirez, J. D. Holmes and A. R. Rodriguez, Prog. Mat. Scien. 55, 563 (2010).
- [85] D. G. Duffy, "Green's Function with application", Chapman & Hall/CRC (2001).
- [86] O. von Roos and K. L. Luke, J. Appl. Phys. 54, 3938 (1983).
- [87] D. Zook, App. Phys. Lett, 37, 223 (1980).

Références Bibliographiques

- [88] W. Hwang, E. Poon and H. C. Card, Sol. Stat. Elec. 26, 599 (1983).
- [89] C. H. Seager, J. Appl. Phys. 52, 3960 (1981).
- [90] J. Oualid, J. H. Singal, J. P. Dugas, J. P. Crest and H. Amzil, J. Appl. Phys. 55, 1195 (1984).
- [91] M. C. Talai, D. E. Mekki1, and R.J. Tarento, Eur. Phys. J: Appl. Phys 8, 1 (1999).
- [92] O. Von Roos and K. L. Luke, J. Appl. Phys. 55, 4275 (1984).
- [93] V. I. Petrov, Phys. Status Solidi A 133, 189 (1992).
- [94] C. Donolato, Phys. Status Solidi A 141, k131 (1994).
- [95] K. L. Luke, J. Appl. Phys. 80, 5775 (1996).
- [96] K. L. Luke, J. Appl. Phys. 90, 3413 (2001).

Liste de Publications

Articles

A. Lahreche, Y. Beggah and R. Corkish, *The effect of electron range on electron beam induced current collection, simple method to extract an electron range for any generation function*, Ultramicroscopy 111, 1343–1351 (2011). (Chapitre 2).

Y. Beggah Yamina and A. Lahreche, *Modeling of signal generation function and electron penetration effects on the EBIC signal of Schottky diodes of Ge*, American Journal of Applied Sciences 5 (6): 678-682 (2008). (Chapitre 2).

A. Lahreche, Y. Beggah and J. R. Taranto, *Modelling Cathodoluminescenc signal of wire semiconductor*, in preparation. (Chapitre 3).

Articles de conferences

A. Lahreche, Y. Beggah and D. Mekki , *An EBIC model to describe two close grain boundaries in semiconductors*, Int. J. Nanoparticules 6 (2/3), 208–214 (2013) (Presented in the 11th International workshop on Beam Injection Assessment of Microstructures in Semiconductors" Annaba, Algeria, 25-28 June 2012). (Chapitre 4).

A. Lahreche and Y. Beggah, *The choice of the right electron range to connect with uniform generation shape in modelling EBIC signal problem and solution*, Phys. Status solidi c 8 (4), 1412–14167 (2011). (Presented in the 10th International workshop on Beam Injection Assessment of Microstructures in Semiconductors" Halle (Saale)/Germany, 4-8 July 2010). (Chapitre 2).

Proceeding

Y. Beggah1 and A. Lahreche, *New electron range for uniform generation function for semiconductors*, 6th Internation Multi-Conference on Systems, Signals and Devices, IEEE (2009). (Chapitre 2).

ملخص:

في هذه الأطروحة قمنا بدراسة نمذجة الإشارة الناتجة عن تيار الدارة المقصورة (EBIC) وإشارة التألق المهبطي (CL) من اجل قياس الخصائص الذاتية للمادة و من اجل دراسة الخصائص الكهربائية للعيوب في أنصاف النواقل و قمنا أيضا بنمذجة الإشارة (EBIC) و (CL) الإشارة في أنصاف النواقل ذات الأبعاد الصغيرة.

إن استعمال دالة التوزيع النقطية و دالة التوزيع الثابتة للشحنات يساعد كثيرا في حساب الإشارة (EBIC) أو (CL) ولكن هذه التوزيعات تكون ذات قيمة إلا إذا استعملت هذه التوزيعات مع الوسائط الخاصة بها مثل المسار الإلكتروني.

لقد قمنا بمعالجة مشكلة اختيار المسار الإلكتروني الذي يجب استعماله مع هذه التوزيعات و كانت النتائج جد مرضية و حسنت من دقة لنماذج المبنية على تلك التوزيعات.

إن نموذج الإشارة (CL) لمواد ذات شكل اسطواني أعطى نتائج جيدة و خاصة قرب الجانب العرضي.

إن نموذج الإشارة (EBIC) لفواصلين يبينان قريبين يبين أن شكل الإشارة و قوتها يتعلق بالخصائص الذاتية لهذين الحدين.

إن مشكلة التداخل في الإشارة قد تمت معالجته بواسطة إدخال المشتقة الثانية للإشارة. إن استعمال هذه الطريقة يعالج مشكلة تداخل الإشارة و يحدد بدقة وضعية كل فاصل. إن هذه الطريقة تكون ذو فائدة كبيرة عند دراسة المواد على مستوى النانومتري.

Abstract

This work deals with the modeling EBIC and CL signals to extract intrinsic parameters of semiconductors and to assess the electrical activity of defects in those materials. It is also addressed to model EBIC (CL) signal of small size semiconductors.

The use of simple forms of generation of charge carriers can be very helpful in modeling EBIC (CL) signal. However, their use are beneficial if only they are connected with theirs appropriates electron range. Therefore, the choice of the right electron range to connect with simple forms of generation is addressed. Mathematical expressions of those electron ranges are derived.

The use of those extracted electron range have ameliorate the extraction of physical parameters using EBIC models base on the point and uniform generations. For the point generation function, it is important to fulfill the condition $R > L/3$ to guarantee that the extracted physical parameters agree with those gotten with Gaussian generation function.

For dislocation contrast, the extracted electron range work well for materials with longue diffusion length value, but, not with the same success for the material with low one. Therefore, it is recommended to use relatively high beam energy excitation to get reasonable results.

For the cathodoluminescence signal, if the point generation function is used in the modeling, good results are gotten only at low and medium beam energies excitation.

For small size semiconductors, two mathematical models to describe a CL signal of semiconductor with a wire shape and EBIC signal of two close grain boundaries are proposed. For CL model, the effect of the diffusion length, rayon of wire and the surface recombination velocity of charge carrier have been addressed in details. For EBIC model, it is shown that the intensity and the shape of the calculated EBIC signal depends on the grain boundaries parameters. The problem of the spatial resolution of the calculated EBIC signal is addressed and resolved by proposing the use of the second derivate of the profile. The use of this method removes the resolution problem and permits to localize the GB position. This method will be very useful to characterize nano-semiconductors.

Résumé

Ce travail est une contribution à la modélisation des signaux EBIC et CL. L'objectif étant d'extraire les paramètres intrinsèques des semiconducteurs et d'étudier les propriétés électriques et optiques de leurs défauts. Il est également consacré à la modélisation des signaux EBIC et CL des semiconducteurs à petites tailles.

L'utilisation de la fonction de génération ponctuelle et constante facilitent énormément la modélisation des signaux EBIC et CL. Cependant, leurs utilisations ne sont efficaces que si elles sont utilisées avec des parcours électroniques appropriés. Le problème du choix d'un bon parcours électronique pour l'utiliser avec ces fonctions est étudié. Des expressions mathématiques pour ces parcours sont déterminées.

L'utilisation de parcours extraits a conduit à une nette amélioration dans la détermination des paramètres physiques en utilisant des modèles basés sur ces deux fonctions de génération. La condition $R > L/3$ est nécessaire pour s'assurer que les paramètres physiques obtenues par les modèles basés sur la génération ponctuelle sont proches de ceux obtenus par les modèles basés sur la génération gaussienne.

Dans le cas des contrastes EBIC des défauts, les parcours électroniques extraits conviennent le cas de matériaux à faible valeur de longueur de diffusion. De plus, il est recommandé d'utiliser des hautes tensions d'excitation pour l'obtention d'une meilleure précision avec ces parcours.

Concernant le signal cathodoluminescence, si la fonction de génération ponctuelle est utilisée, il est recommandé d'utiliser des faibles et moyennes tensions d'excitation pour avoir de bons résultats.

Dans le cas des semiconducteurs à petites tailles, deux modèles décrivant le signal CL d'un fil semiconducteur et le signal EBIC de deux joints de grains proche sont proposés. Concernant le signal CL, l'effet de la longueur de diffusion, le rayon du fil et de la vitesse de recombinaison surfacique sont mis en évidence. Pour le signal EBIC, il est montré que la forme et l'intensité du signal calculé dépendent des paramètres des deux joints. Le problème de la résolution spatiale du signal calculé est résolu par l'utilisation de la deuxième dérivée du profil. L'utilisation de cette méthode a permis d'enlever le problème de la résolution spatiale du profil et de localiser la position des deux joints.

La méthode de la deuxième dérivée du profil aura un grand intérêt dans la caractérisation des nanomatériaux.

Résumé

Ce travail est une contribution à la modélisation des signaux EBIC et CL. L'objectif étant d'extraire les paramètres intrinsèques des semiconducteurs et d'étudier les propriétés électriques et optiques de leurs défauts. Il est également consacré à la modélisation des signaux EBIC et CL des semiconducteurs à petites tailles.

L'utilisation de la fonction de génération ponctuelle et constante facilitent énormément la modélisation des signaux EBIC et CL. Cependant, leurs utilisations ne sont efficaces que si elles sont utilisées avec des parcours électroniques appropriés. Le problème du choix d'un bon parcours électronique pour l'utiliser avec ces fonctions est étudié. Des expressions mathématiques pour ces parcours sont déterminées.

L'utilisation de parcours extraits a conduit à une nette amélioration dans la détermination des paramètres physiques en utilisant des modèles basés sur ces deux fonctions de génération. La condition $R > L/3$ est nécessaire pour s'assurer que les paramètres physiques obtenues par les modèles basés sur la génération ponctuelle sont proches de ceux obtenus par les modèles basés sur la génération gaussienne.

Dans le cas des contrastes EBIC des défauts, les parcours électroniques extraits conviennent le cas de matériaux à faible valeur de longueur de diffusion. De plus, il est recommandé d'utiliser des hautes tensions d'excitation pour l'obtention d'une meilleure précision avec ces parcours.

Concernant le signal cathodoluminescence, si la fonction de génération ponctuelle est utilisée, il est recommandé d'utiliser des faibles et moyennes tensions d'excitation pour avoir de bons résultats.

Dans le cas des semiconducteurs à petites tailles, deux modèles décrivant le signal CL d'un fil semiconducteur et le signal EBIC de deux joints de grains proche sont proposés. Concernant le signal CL, l'effet de la longueur de diffusion, le rayon du fil et de la vitesse de recombinaison surfacique sont mis en évidence. Pour le signal EBIC, il est montré que la forme et l'intensité du signal calculé dépendent des paramètres des deux joints. Le problème de la résolution spatial du signal calculé est résolu par l'utilisation de la deuxième dérivée du profil. L'utilisation de cette méthode a permis d'enlever le problème de la résolution spatiale du profil et de localiser la position des deux joints.

La méthode de la deuxième dérivée du profil aura un grand intérêt dans la caractérisation des nanomatériaux.

