



**Faculté des Sciences  
Département de Physique**

**Année 2009**

# **THESE**

présenté en vue de l'obtention du diplôme de **Docteur en Physique**  
**Option**  
**Physique des Semiconducteurs**

Par  
**Mounia DEBEZ**

## **Sujet**

**Effet de la vitesse de recombinaison au niveau d'un agrégat  
métallique plongé dans un semi-conducteur sur le contraste.  
Modèles classique et quantique**

**Directeur du mémoire : Djamel Eddine Mekki Prof Université de Annaba**

## **Devant le jury**

<b>Président :</b>	Abdellaziz Doghmane	Prof	U. Annaba
<b>Examineur:</b>	Lyamine Mahdjoubi	Prof	U. Annaba
	Bouguerra Bouzabata	Prof	U. Annaba
	Bouzid Boudejma	Prof	U. Skikda
	René Jean Tarento	D.R	U. Paris Sud Orsay

# Remerciements

*Ce travail a été effectué au Laboratoire d'Etude de Surfaces et d'Interfaces de la Matière Solide (LESIMS) et avec la collaboration du laboratoire de physique du solide L.P.S à l'université paris-sud à Orsay.*

*Je tiens à exprimer toute ma gratitude à M<sup>r</sup> D.E.Mekki - professeur à l'institut de physique de l'Université de Annaba - pour l'honneur qu'il m'a offert en me proposant ce sujet d'étude.*

*Qu'il trouve ici l'expression de ma parfaite reconnaissance pour son enthousiasme communicatif et sa disponibilité.*

*Je remercie M<sup>r</sup> le professeur **A.Dogmann** pour avoir bien voulu présider ce jury*

*Mes remerciements vont également vers M<sup>rs</sup> les professeurs et **L. Mahdjoubi**, **B. Bouzabata** et **B.Boujema** qui ont accepté d'examiner ce travail.*

*Je ne saurais enfin oublier d'exprimer tous mes remerciements à monsieur **René Jean Tarento**, directeur de recherche au sein du laboratoire L.P.S à l'université paris sud à Orsay (CNRS); pour avoir accepté de m'accueillir au sein de son équipe et de suivre ce travail.*

*Le soutien multiforme de monsieur **N.Tabet**, professeur au département de physique de l'université de Dahrans-Saudi Arabia- fut décisif, je tiens à lui exprimer toute ma gratitude.*

*Je ne saurais oublier, monsieur B. Houcine, enseignant chercheur, pour sa disponibilité lors de l'élaboration de ce mémoire, qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect.*

*Que toute ma famille, ainsi que toute personne ayant contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire, trouvent ici l'expression de ma reconnaissance.*

# Dédicace

*A la mémoire de ma sœur Wahiba*

*A ma chère Mère  
A mon Père*

*A mon Frère*

*A mes Sœurs*

*A mon oncle Nabil*

*A Kheyrou, Anis, Amir, Syrine, Mehdi, Lydia et Malek*

# Liste des symboles

- $m$  : Masse électronique
- $M$  : Masse d'un atome
- $Z$  : Nombre atomique
- $\rho$  : Nombre atomique
- $R_p$  : Parcours électronique
- $N$  : Nombre d'Avogadro
- $E_o$  : Energie du faisceau incident
- $z$  : Profondeur de pénétration
- $E_A$  : Energie absorbée par le semi-conducteur
- $E_B$  : Energie des électrons rétrodiffusés
- $E_T$  : Energie effectivement transmise au matériau
- $\eta_T$  : Fraction d'électrons transmis
- $\eta_B$  : Fraction d'électrons rétrodiffusés
- $\epsilon_{e-h}$  : Énergie moyenne de création de paires électron-trou
- $\langle E_K \rangle$  : Energie cinétique résiduelle dissipée
- $G_o$  : Taux de génération
- $\tau$  : Durée de vie des porteurs de charge minoritaires
- $C_{n,p}$  : Coefficient de capture des électrons ( trous)
- $V_{th}$  : Vitesse thermique
- $\sigma$  : Section efficace
- $\epsilon$  : Constante diélectrique du semi-conducteur utilisé
- $q$  : Charge électrique
- $\mu$  : Mobilité des porteurs de charge
- $D$  : Coefficient de diffusion des porteurs de charge
- $K_b$  : Constante de Boltzmann
- $T$  : Température
- $V_{n,p}$  : Vitesse de collecte d'électrons ( trous)
- $Z_m$  : Epaisseur de la couche métallique
- $Z_d$  : Epaisseur de la zone de charge d'espace
- $V$  : Volume du cristal semi-infini
- $\Omega$  : Volume du défaut considéré
- $N_t$  : Concentration des défauts de surface

$Q$  : Charge portée par un défaut

$U_s$  : Taux net de recombinaison

$a$  : Distance interatomique

$E_b$  : Hauteur de l'énergie de barrière

$R$  : Rayon du précipité

$\tilde{R}$  : Rayon de la sphère de Read

$n_i$  : Concentration intrinsèque du semi-conducteur utilisé

$r, \vartheta, \phi$  : Variables sphériques

$n, l, m$  : Nombres quantiques principale, orbital et magnétique

## Liste des Figures

Figure	Titre	N°
( II-1)	Processus de recombinaison : (a). Recombinaison directe (b). Recombinaison indirecte sur un niveau unique (distribution mono énergétique).	8
( III-1)	Evolution des courbures des bandes d'énergie des quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte ( $\Delta_1$ ) et dans la zone neutre ( $\Delta_2$ ) (a) en fonction du niveau d'excitation dans le volume ( $\Delta$ ). (b) en fonction de la hauteur de l'énergie de barrière ( $E_b$ ). $E_a = 0$ (eV), $\phi = 0$ (eV), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $\sigma_n = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (cm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s).	15
( III-2)	Variations de la hauteur de l'énergie de barrière $E_b$ (eV) (a) et de la vitesse de recombinaison $S_{eff}$ (cm/s) (b) avec le niveau d'excitation dans le volume ( $\Delta$ ) pour différentes densités d'états d'interface. (1) $N_i = 4 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-3</sup> ), (2) $N_i = 6 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-3</sup> ), (3) $N_i = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-3</sup> ), (4) $N_i = 10^{12}$ (cm <sup>-3</sup> ), (5) $N_i = 5 \cdot 10^{12}$ (cm <sup>-3</sup> ). $E_{a0} = -0.1$ (eV), $\phi = 0.05$ (eV), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $\sigma_n = 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (cm), $D_n = 25$ (cm <sup>2</sup> /s).	16
( III-3)	Evolution des courbures des bandes d'énergie des quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte ( $\Delta_1$ ) et dans la zone neutre ( $\Delta_2$ ) (a) en fonction du niveau d'excitation en volume ( $\Delta$ ). (b) en fonction de la hauteur de l'énergie de barrière ( $E_b$ ). $E_{a0} = -0.1$ (eV), $\phi = 0.05$ (eV), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $\sigma_n = 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 80$ (cm), $D_n = 25$ (cm <sup>2</sup> /s).	19
( III-4)	Variations de la hauteur de l'énergie de barrière $E_b$ (eV) (a) et de la vitesse de recombinaison $S_{eff}$ (cm/s)(b) avec le niveau d'excitation en volume ( $\Delta$ ) pour différentes densités d'états d'interface. (1) $N_i = 5 \cdot 10^8$ (cm <sup>-1</sup> ), (2) $N_i = 10^8$ (cm <sup>-1</sup> ), (3) $N_i = 10^7$ (cm <sup>-1</sup> ) $E_{a0} = -0.1$ (eV), $\phi = 0.05$ (eV), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $\sigma_n = 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 80$ (cm), $D_n = 25$ (cm <sup>2</sup> /s).	20
( III-5)	Variations de la hauteur de l'énergie de barrière $E_b$ (eV) (a) et de la vitesse de recombinaison $S_{eff}$ (cm/s)(b) avec le niveau d'excitation en le volume ( $\Delta$ ) pour différentes distributions d'états d'interface. 1. $E_{a0} = -0.05$ (eV), (2) $E_{a0} = -0.10$ (eV), (3) $E_{a0} = -0.15$ (eV). $\phi = 0.05$ (eV), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $\sigma_n = 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 80$ (cm), $D_n = 25$ (cm <sup>2</sup> /s).	20
( III-6)	Schéma illustrant la géométrie utilisée	22
( III-7)	Schéma représentatif d'un diagramme de bande d'énergie associé à la présence d'un précipité sphérique dans un semi-conducteur de type p.	23
( III-8)	Schéma illustrant l'état de charge du défaut considéré.	24
( III-9)	Evolution des courbures de bande associées aux quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte, $\Delta_1$ , et dans la zone quasiment neutre, $\Delta_2$ , en fonction de l'excitation en volume, $\Delta$ , et ce, pour différentes tailles de précipité R. (a : R = $\infty$ , b : R = 1500 (Å), c : R = 800 (Å)) $\sigma = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (μm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s) et $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $N_t = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ).	30

(III-10)	Evolution des courbures de bande associées aux quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte $\Delta_1$ et dans la zone quasiment neutre $\Delta_2$ en fonction de la hauteur de barrière de potentiel, $E_b$ , pour différentes tailles de précipité $R$ . ( <b>a</b> : $R = \infty$ , <b>b</b> : $R = 1500$ (Å)). $\sigma = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (µm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s) et $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ).	32
(III-11)	Evolution de la hauteur de barrière, $E_b$ , et de la vitesse effective de recombinaison, $S_{eff}$ , en fonction de l'excitation en volume $\Delta$ , pour divers états d'interface $N_t$ : $R = \infty$ , $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $L_n = 50$ (µm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s), $T = 300$ (K°). 1. $N_t = 5 \cdot 10^{12}$ (cm <sup>-2</sup> ), 2. $N_t = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 3. $N_t = 4 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 4. $N_t = 3 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 5. $N_t = 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> )	34
(III-12)	Evolution de la hauteur de barrière, $E_b$ , et de la vitesse effective de recombinaison, $S_{eff}$ , en fonction de l'excitation en volume, $\Delta$ , pour divers états d'interface $N_t$ : $R = 1500$ (Å), $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ), $L_n = 50$ (µm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s), $T = 300$ (K°) 1. $N_t = 5 \cdot 10^{12}$ (cm <sup>-2</sup> ), 2. $N_t = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 3. $N_t = 4 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 4. $N_t = 3 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 5. $N_t = 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> )	37
(III-13)	Variation de la densité de charge interfaciale $\sigma^{ch}$ avec la taille du précipité, pour différentes densités d'état $N_t$ . $\sigma = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (µm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s) et $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ). 1. $N_t = 5 \cdot 10^{12}$ (cm <sup>-2</sup> ), 2. $N_t = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), 3. $N_t = 4 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ).	37
(III-14)	Variation de la hauteur de barrière, $E_b$ , en fonction de la taille, $R$ , du précipité. $\sigma = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (µm), $D_n = 14$ (cm <sup>2</sup> /s) et $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ).	38
(III-15)	Evolution de la hauteur de barrière $E_b$ et de la vitesse effective de recombinaison $S_{eff}$ avec la température $T$ , pour trois tailles de précipité $R$ . $N_t = 8 \cdot 10^{11}$ (cm <sup>-2</sup> ), $\sigma = 2.5 \cdot 10^{-16}$ (cm <sup>-2</sup> ), $L_n = 50$ (µm), et $N_a = 10^{16}$ (cm <sup>-3</sup> ).	40
(IV-1)	Illustration de la génération et de la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semi-conducteur de type n.	44
(IV-2)	Schéma du circuit équivalent de la mesure EBIC.	45
(IV-3)	(a): Image EBIC pour un sous-joint de grains (Ge). (b): Image en électron secondaire de la même surface.	46
(IV-4)	Courbe d'intensité EBIC lorsque le faisceau d'électrons balaye une ligne à travers un défaut électriquement actif.	47
(IV-5)	Schéma illustrant les différentes géométries utilisées dans la technique EBIC	48
(IV-6)	Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie du faisceau incident 1- <b>Kyser</b> (1972) ; 2- <b>Kanaya</b> et <b>Okayama</b> (1972) ; 3- <b>Everhart</b> et <b>Hoff</b> (1971).	55
(IV-7)	<b>Figure. IV.7.</b> Fonction de dissipation d'énergie. 1- <b>Kyser</b> (1972) ; 2- <b>Kanaya</b> et <b>Okayama</b> (1972)3- <b>Everhart</b> et <b>Hoff</b> (1971)	57
(IV-8)	Variation de l'énergie de formation de paires e-h en fonction de l'énergie du gap, pour différents semi-conducteurs d'après <b>Klein</b> (1968).	59
(IV-9)	Illustration de l'effet du numéro atomique sur le volume de génération. $Z$ : numéro atomique, $R$ : profondeur de pénétration, $Z_d$ : profondeur de diffusion.	60
(IV-10)	Fonction de génération, $g(z)$ , dans le Germanium à $E_0=30$ KeV. 1- <b>Kyser</b> (1972) ; <b>Kanaya</b> et <b>Okayama</b> (1972) ; 3- <b>Everhart</b> et <b>Hoff</b> (1971) .	62

(V-1)	Génération de porteurs en présence d'un défaut.	<b>65</b>
(V-2)	Contraste EBIC théorique pour différents parcours électroniques pour un défaut ponctuel situé à une profondeur $a = 2 (\mu m)$ , $L = 10 (\mu m)$ .	68
(V-3)	Evolution du contraste EBIC d'une ligne de dislocation en fonction de l'énergie du faisceau incident $E_0$ . <b>(1)</b> $S_{eff} = 10^6 \text{ cm/s}$ , $R = 0.4 \mu m$ , <b>(2)</b> $S_{eff} = 10^5 \text{ cm/s}$ , $R = 0.36 \mu m$ .	70
(V-4)	Evolution du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des grandes tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.	72
(V-5)	Evolution du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des grandes tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.	73
(V-6)	Géométrie utilisée pour l'étude du contraste EBIC	75
(V-7)	Evolution du contraste EBIC en fonction de la taille du précipité sphérique pour deux énergies incidentes $E_0$ et $e_0$ , dans le cadre du modèle H.F.L.M.	85
(V-8)	Evolution du contraste EBIC en fonction de la taille du précipité sphérique pour trois densités d'états d'interface $N_i$ . <b>1.</b> $N_i = 5 \cdot 10^{12} (\text{cm}^{-2})$ , <b>2.</b> $N_i = 8 \cdot 10^{11} (\text{cm}^{-2})$ , <b>3.</b> $N_i = 4 \cdot 10^{11} (\text{cm}^{-2})$ .	86
(V-9)	Evolution du contraste en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des petites (a) et grandes (b) tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.	87



# Résumé

Un modèle de contraste EBIC, en présence d'un précipité sphérique dans un semiconducteur de type p est élaboré.

Dans une première étape, un calcul self- consistant de la hauteur de barrière et de la vitesse de recombinaison à l'interface d'un précipité métallique et d'une matrice semi-conductrice est présenté et ce, dans le cadre de la théorie **Hall Shockley Read (S.R.H)**.

La procédure adoptée tient compte des seules variations du quasi niveau de Fermi associé aux porteurs de charge minoritaires dans les zones de charge d'espace et quasiment neutre ; de plus, un déplacement rigide des bandes est assumé.

Par ailleurs, une distribution mono énergétique des états d'interfaces est considérée et ce, dans deux cas limites qui sont le modèle du niveau à demi plein (H.F.L.M) et celui qui suppose que le défaut sphérique est neutre à l'état initial (X.F.L.M).

Le processus de recombinaison est étudié en fonction de la concentration des défauts, de la taille du précipité et de la température.

L'effet du niveau d'injection est également discuté.

Les résultats obtenus montrent une variation continue des courbures de bande d'énergie du quasi niveau de Fermi associé aux porteurs de charge minoritaires dans les zones déserte et quasiment neutre, confirmant ainsi ceux obtenus par certains auteurs sur d'autres types de défauts comme la dislocation ou le joint de grains.

Leurs maximums décroissent avec la taille du précipité sphérique ; ceci est lié principalement à la diminution des hauteurs de barrière de potentiel et donc de la vitesse de recombinaison dont les comportements sont fonction de la densité d'états d'interface associés au défaut considéré et de l'excitation extérieure.

Un accord qualitatif entre nos résultats et ceux de la littérature est constaté, les écarts étant attribués aux différentes hypothèses de travail retenues.

Par ailleurs, l'effet combiné de la taille des précipités et de la concentration des états d'interface s'est trouvé matérialisé par la détermination, originale, d'une relation empirique caractérisant une densité de charge superficielle.

L'influence de la température sur les paramètres décrivant la recombinaison, à savoir la hauteur de barrière et la vitesse effective de recombinaison à l'interface précipité/ matrice semiconductrice est également discutée ;il apparaît que ces paramètres décroissent avec la température, la raison étant liée à l'augmentation de la durée de vie des porteurs minoritaires et de la probabilité d'occupation des niveaux d'énergie associés au précipité.

Dans une seconde étape, l'équation de continuité autour du précipité est résolue dans le cas d'une situation de faible injection, menant à la détermination du contraste EBIC à l'interface.

La méthode utilisée nécessite l'introduction de fonctions de Green appropriées au problème posé.

Le contraste EBIC est étudié en fonction de la taille pour diverses concentrations de défauts et différentes énergies incidentes. Son comportement est qualitativement comparable avec ceux trouvés dans la littérature.

**Mots clés.** EBIC, contraste, défaut sphérique, calcul self consistant, Silicium, théorie SRH.

# Abstract

An EBIC contrast model on p type Silicon that involves a spherical precipitate, has been elaborated.

In a first step, a self-consistent calculation of the barrier height and of the effective recombination velocity at the interface between a metallic precipitate and a semiconductor matrix has been performed within the Read-Hall-Shockley framework.

The procedure has taken into account the bending of the minority carrier quasi Fermi level across the precipitate space-charge region and in the quasi-neutral region. A rigid displacement of the bands is assumed.

In addition, the interface energy states are considered to have a mono-energetic distribution in two limit cases, namely the Half Filled Level model and another that takes into account an initially neutral spherical defect ( X. F. L. M).

The process of recombination has been studied as a function of the defect concentration, the precipitate size and the temperature.

The effect of the injection level is also discussed.

The results show a continuous variation of curvatures of the band energy of Fermi level associated to the minority charge carriers in the deserted and quasi neutral region, confirming those obtained by some authors on other types of defects such as dislocation or grain.

The maximum decrease with the size of the spherical precipitate; this is mainly due to the decrease of potential barrier heights and thus the recombination velocity whose behaviours are a function of the interface states density associated to the defects and external excitation.

A qualitative agreement between our results and those of the literature is found, the differences being attributed to the various working hypotheses retained.

Furthermore, the combined effect of the precipitates sizes and the concentration of

interface states was realized by determining, originally, an empirical relationship characterizing a surface charge density.

The influence of temperature on the parameters describing the recombination, namely the barrier height and the recombination velocity at the interface precipitate / semiconductor matrix is also discussed and it appears that these parameters decrease with temperature, the reason being related to the increase of the minority carrier's lifetime and the occupation probability of energy levels associated to the precipitate.

In the a second step, the continuity equation around the precipitate has been solved in the case of a low-level electron beam injection in order to determine the electron beam induced current (EBIC) contrast at the interface. The contrast has been investigated versus the size for different defect concentrations and incident beam energies.

**Keys words:** EBIC, spherical precipitate, self consistent calculation, Si (p type), SRH theory.

# خلاصة

قد تم انجاز نموذج للتباين EBIC (تيار محدث بواسطة حزمة الكترونية) اثر وجود ترسب كروي داخل نصف ناقل من النوع P.

كمرحلة أولية، تم باستعمال حساب ذاتي الحصول على ارتفاع حاجز الجهد و سرعة الاتحاد الفعالة و هذا على مستوى الترسيب الكروي.  
تم ذلك في إطار نظرية شوكلي - ريد - هول (S.R.H).  
الطريقة المستعملة في هذا الحساب تأخذ بعين الاعتبار تغيرات مستوى فرمي الخاصة بحاملات الشحنة ذات الأقلية و هذا عبر منطقة شحنات الفراغ و المنطقة الشبه محايدة.  
من ناحية أخرى، توزيع أحادي الطاقة تم اعتباره و هذا في حالتين حديتين و هما، نموذج المستوى الطاقوي النصف المملوء و الآخر الذي يعتبر العيب الكروي محايد كحالة أولية.  
عملية إعادة الاتحاد تم دراستها بدلالة تركيز العيوب السطحية، نصف قطر الترسيب الكروي و درجة الحرارة.

النتائج المتحصل عليها تبين أن حجم الترسيب الكروي يلعب دورا هاما في عملية الاتحاد المنجزة على مستوى سطحه و هذا بالرجوع إلى الكثافة السطحية للشحنات الواقعة على هذا السطح و التي تتزايد كلما نقص حجم الترسيب الكروي المدروس.  
بالإضافة إلى ذلك نشير إلى أن حالات السطح الفعالة هي التي تعطي ارتفاع جهد اعتباري على مستوى العيب الكروي. و هذا الذي يكون من اجل إنصاف أقطار تزيد على 150  $(\text{Å})$ .

في مرحلة ثانية، معادلة الاستمرارية بوجود العيب الكروي تم حلها في حالة حقن ضعيف و هذا لغرض الحصول على التباين EBIC عند السطح.

الطريقة المستعملة، تطلبت استعمال دوال Green الملائمة للمشكل المطروح.  
تم دراسة التباين EBIC بدلالة حجم الترسيب الكروي و هذا من أجل قيم مختلفة لتركيز  
العيوب السطحية و مختلف طاقات الإثارة الواردة.

**كلمات مفتاحية:** EBIC، تباين، عيب كروي، حساب بأسلوب ذاتي، نصف ناقل من النوع

P، نظرية S.R.H

# Sommaire

## Chapitre I : Introduction.....1

## Chapitre II : Etude de la recombinaison dans le cadre de la théorie Hall Shockley Read (S.R.H)

II.1. Introduction.....	4
II.2. Phénomènes de surface.....	4
II.3. Génération - Recombinaison.....	5
II.4. Eléments de théorie.....	7
II.5. Equation de continuité.....	11

## Chapitre III : Analyse de la vitesse de recombinaison au niveau d'un précipité sphérique plongé dans un semiconducteur (Si)

III.1. Introduction.....	13
III.2. Modèles de la littérature.....	14
a. Modèle du joint de grains.....	14
b. Modèle de la dislocation .....	17
III.3. Notre Modèle.....	21
a. Introduction.....	21
b. Bases du modèle .....	23
1. La hauteur de l'énergie de barrière.....	23
2. La vitesse effective de recombinaison.....	26
3. Les quasi-niveaux de Fermi des porteurs de charge minoritaires.....	27
c. Résultats relatifs à la recombinaison.....	28
1. Evolution des paramètres avec l'excitation extérieure (effet de la taille du précipité et de la concentration des états d'interface .....	29
i. Evolution des courbes $(\Delta_1, \Delta_2) = f(\Delta)$ et des courbes $(\Delta_1, \Delta_2) = f(E_b)$ .....	29
ii. Evolution des courbes $E_b, S_{eff} = f(\Delta)$ .....	33

2. Evolution de la densité de charges $\sigma^{ch}$ et de la hauteur de barrière $E_b$ en fonction de la taille $R$ , pour différentes densités d'états d'interface.....	37
3. Evolution de la hauteur de barrière $E_b$ et de la vitesse effective de recombinaison $S_{eff}$ en fonction de la température $T$ .....	39

## Chapitre IV : Le mode EBIC

IV.1. Introduction .....	42
IV.2. Présentation du mode EBIC .....	43
IV.2.1. Principe.....	43
IV.2.2. Montage expérimental .....	44
IV.3. Applications du mode EBIC .....	45
IV.3.1. Applications qualitatives .....	45
IV.3.2. Applications quantitatives.....	47
IV.3.2.1. Introduction.....	47
IV.3.2.2. Détermination de la longueur de diffusion.....	49
a. Cas d'une jonction parallèle à la surface de l'échantillon.....	49
b. Cas d'une jonction normale à la surface de l'échantillon .....	49
IV.4. Interaction électron - matière .....	51
IV.4.1. Type d'interaction.....	51
a. Interaction élastique.....	51
b. Interaction inélastique.....	51
IV.4.2. Parcours électronique et fonction de dissipation d'énergie.....	52
a. Parcours électronique .....	52
b. Fonction de dissipation d'énergie .....	55
IV.4.3. Phénomène de génération de porteurs .....	57
a. Production de porteurs (électron - trou) .....	57
b. La fonction de génération.....	60



## Chapitre V : Etude du contraste EBIC

V.1. Introduction .....	64
V.2. Modèles de contraste EBIC.....	64
V.2. 1.Modèle de Donolato (78/79) pour un défaut quelconque.....	64
V.2. 2.Modèle de R.J.Tarento et al pour un défaut linéaire.....	68
V.2. 3.Modèle de N.Tabet (98) pour un défaut sphérique .....	70
a. cas d'un défaut sphérique de petite taille.....	71
b. cas d'un défaut sphérique de grande taille.....	72
V.3. Notre modèle.....	73
V.3.1. Introduction.....	73
V.3.2. Géométrie et bases du modèle.....	74
V.3.3. Equation de continuité.....	75
V.3.4. La fonction de Green.....	75
a. Définition de la fonction de Green.....	75
b. Analyse de la fonction de Green.....	76
1. Détermination de $G_0$ .....	77
2. Détermination de $G$ .....	78
c. Application de la fonction de Green à notre modèle.....	80
1. Détermination de $G_0$ .....	80
2. Détermination de $G$ .....	80
3. Détermination de $\tilde{G}$ .....	81
V.3.5. Calcul de la concentration des électrons en excès.....	82
a. loin du défaut.....	82
b. près du défaut.....	83
V.3.6. Calcul du contraste EBIC.....	83
a. loin du défaut.....	83
b. près du défaut.....	84
V.4. Résultats du contraste.....	84

## Chapitre VI : Conclusion.....88

## Références bibliographiques.....90

# *Introduction*

Les techniques d'injection de porteurs électroniques par une source extérieure (électrons, photons,...) constituent un outil précieux pour la compréhension des propriétés électriques des défauts dans les matériaux, tels que les précipités, les dislocations ou encore les joints de grains.

Parmi ces techniques, l'**EBIC** (**E**lectron **B**eam **I**nduced **C**urrent) est particulièrement adapté à l'étude de la recombinaison des paires électrons- trous.

Elle a d'abord fait l'objet d'applications qualitatives, telle que la formation d'images faisant apparaître l'existence de défauts ; plus tard, des investigations plus quantitatives d'étude du courant EBIC ont été abordées, bien que des difficultés mathématiques importantes apparaissent dès que l'on veut approcher, autant que faire se peut, la réalité physique du problème posé, en matière d'efficacité de collecte ou de contraste.

Plusieurs démarches ont été proposées pour apprécier l'évolution de quelques paramètres physiques qui caractérisent le processus de recombinaison au niveau des dislocations [1], des joints de grains [2, 3], du défaut, quelconque ou ponctuel [4], ainsi que pour les précipités [5].

Notre contribution s'inscrit dans ce cadre, il s'agit de construire un modèle de contraste EBIC en présence d'un agrégat métallique sphérique dans un semi-conducteur de type p et ce, dans le cadre de la théorie **H**all **S**hockley **R**ead (**S.R.H**), ainsi que dans une situation de faible injection.

## ***Cette étude comporte essentiellement deux volets :***

Le premier est relatif à l'étude de la recombinaison proprement dite des porteurs de charge au niveau du défaut considéré et ce, en analysant le comportement de paramètres

physiques la caractérisant ( la hauteur de barrière, la vitesse effective de recombinaison et les quasi niveaux de Fermi ).

Il consiste, d'une part, à développer un calcul self consistant, matérialisant la conservation de la répartition des charges,  $Q$ , à l'interface précipité/matrice semiconductrice et d'autre part, au niveau des défauts situés à l'interface du précipité.

La procédure, basée sur les travaux effectuées par R.J. Tarento et al sur les dislocations [1] et par J.Oualid et al sur les joints de grains [2], prend en considération la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , la densité de défauts,  $N_t$ , la concentration de dopant,  $N_a$ , la sphère de Read,  $\tilde{R}$ , la taille du précipité sphérique,  $R$ , les différentes concentrations de porteurs électroniques, la vitesse effective de recombinaison,  $S_{eff}$ , ainsi que les courbures de bande des quasi niveaux de Fermi, dans les zones déplétée et quasiment neutre, notées respectivement  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ .

Le déplacement rigide des bandes est également pris en compte.

Une distribution mono énergétique des états d'interface est considérée dans deux cas limites :

- Cas du niveau à demi plein (Modèle H.F.L.M), dans lequel le niveau énergétique associé au défaut considéré est à moitié rempli.
- Cas où le précipité sphérique est initialement neutre, c'est à dire avant excitation extérieure. Le modèle associé est noté X.F.L.M.

La seconde partie de notre travail est relative au calcul du contraste EBIC.

La démarche suivie fait appel à des fonctions de Green très lourdes d'utilisation et ayant des formes asymptotiques différentes selon la nature du problème posé.

L'équation de continuité autour du précipité est résolue pour une situation de faible injection, tout en tenant compte de la zone d'épuisement et de la vitesse de recombinaison à l'interface.

Le contraste EBIC à l'interface est étudié en fonction de la taille du précipité et ce, pour divers états d'interface et différentes énergies incidentes.

Quant au manuscrit, il est structuré de la manière suivante :

Le *chapitre II* rapporte une étude théorique de la recombinaison dans le cadre de la théorie Hall Shockley Read, S.R.H, cette dernière devant servir de base pour notre propre modèle.

*Le chapitre III* caractérise la première partie de notre étude, à savoir l'analyse de l'activité recombinante d'un précipité sphérique plongé dans une matrice semiconductrice de type p, en fonction d'un certain nombre de paramètres tels que la taille du précipité sphérique, la concentration de défauts supposées à l'interface, la température...

Les principaux résultats obtenus sont également présentés.

Le chapitre résume aussi les principaux modèles classiques de recombinaison relatifs au mode EBIC et servant de base à notre travail. Une analyse critique de leur développement est également effectuée.

*Le chapitre IV* présente la technique EBIC, tant du point de vue du principe que de celui des applications potentielles. L'interaction électron-matière est également discutée.

Quant au *chapitre V*, il est consacré à l'étude du contraste EBIC proprement dit, sur la base des informations obtenues au *chapitre III*.

Dans un premier temps, les principaux modèles relatifs à l'étude du contraste EBIC en présence d'un défaut sont résumés et font l'objet d'une analyse fine.

Dans un seconde étape, la démarche mathématique qui a été adoptée pour rendre compte des différents comportements du contraste est présentée, ainsi que les résultats y afférant.

Enfin, une conclusion générale, présentée dans *le chapitre VI*, met en évidence les principaux résultats obtenus.

# Etude de la recombinaison dans le cadre de la théorie Hall-Shockley-Read (S.R.H)

## II.1. Introduction

L'existence de défauts ponctuels, linéaires ou plans a des conséquences non négligeables sur un certain nombre de propriétés physiques des matériaux, telles que les propriétés optiques ou électroniques [6]. Il est admis que leur présence se traduit par une diminution de la durée de vie des porteurs minoritaires [6], ou encore par une augmentation du bruit de fond associé aux différents signaux émanant du semiconducteur lorsque ce dernier est soumis à l'action d'un rayonnement primaire [6].

Du point de vue électronique, la présence d'un défaut est matérialisée par des états énergétiques localisés dans le gap du semiconducteur, il était donc important de commencer cette étude par un traitement préalable de quelques aspects de physique électronique. C'est l'objet du présent chapitre.

## II.2. Phénomènes de surface

Les surfaces extérieures délimitant un cristal sont des perturbations naturelles du potentiel périodique d'un réseau cristallin. La rupture du réseau cristallin à la frontière d'un cristal fait apparaître de nouveaux états électroniques dont les fonctions d'onde s'estompent à mesure que l'on pénètre plus avant dans la masse du cristal [7]. Une autre cause d'apparition des états électroniques de surface peut être l'existence de liaisons covalentes non saturées d'atomes superficiels (niveaux de Shockley) [8], ainsi que les perturbations de la périodicité du potentiel à proximité de surfaces contaminées par des atomes ou par des molécules adsorbés [9-13].

Les défauts de surface dans les matériaux semiconducteurs, associés en particulier à la rupture de la périodicité cristalline, sont chargés ; cet état de fait engendre, à terme, la saturation des états électroniques de surface et fait apparaître un champ électrique dont l'existence détermine la manifestation de nombreux effets sensibles à l'état de surface du cristal [7].

Les études expérimentales concernant le mouvement des porteurs en excès indiquent que la recombinaison d'une paire électron-trou se fait au niveau de la surface [14], dont les états localisés au niveau du gap du semiconducteur se comportent comme ceux qui leur correspondent en volume [15].

Shockley [17] définit une quantité qui a la dimension d'une longueur par unité de temps, appelée vitesse de recombinaison en surface  $S$ , qui est liée directement au courant,  $I_n$ , dû au flux de porteurs de charge minoritaires et à leur densité à la surface,  $n$ .

Pour un semiconducteur de type p, on a :

$$I_n = -q n S \quad \text{à la surface}$$

$q$  est la charge électrique.

Cette vitesse de recombinaison dépend des hauteurs de barrière et des densités de défauts interfaciales [16].

### II.3. Génération – Recombinaison

On caractérise la création de porteurs dans le semiconducteur par un paramètre qui mesure le nombre de porteurs créés par unité de volume et unité de temps,  $g'$  ( $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ).

$g'$  résulte de la contribution de deux types de porteurs. La première est liée à une génération spontanée due à l'agitation thermique, que l'on caractérise par un paramètre noté  $g_{th}$ , c'est le taux de génération thermique, tandis que la seconde résulte d'une excitation extérieure, par exemple d'une excitation optique, d'une injection électrique, d'une irradiation par des particules, d'un champ électrique intense, ... ce type de génération est caractérisé par un paramètre  $g$ , qui est spécifique du processus mis en jeu.

Par ailleurs, la recombinaison des porteurs excédentaires est matérialisée par un paramètre  $r'$ , propre au matériau et fonction des processus la régissant.

Ainsi, la variation du nombre de porteurs par unité de volume et unité de temps, due aux processus de génération-recombinaison, s'écrit :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g' - r' = g + g_{th} - r' \quad (\text{II.1})$$

Parmi ces trois paramètres,  $g$ ,  $g_{th}$  et  $r'$ , le premier est fonction de l'excitation éventuelle du matériau, les deux autres sont spécifiques du matériau à une température donnée.

Il est habituel de regrouper ces derniers dans un même terme, qui représente leur différence, en posant  $r = r' - g_{th}$ ;  $r$  représente donc le bilan entre les recombinaisons et les générations thermiques.

L'équation (II.1) devient alors :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g - r \quad (\text{II.2})$$

$g$  et  $r$  sont respectivement appelés taux de génération et taux de recombinaison des porteurs.

La recombinaison d'un électron avec un trou, dans le semiconducteur, peut se produire soit directement par la rencontre des deux particules, soit par l'intermédiaire d'une impureté, qui joue en quelque sorte le rôle d'agent de liaison [18].

La contribution de ces deux mécanismes au processus de recombinaison dépend du rapport de leurs probabilités respectives, de la position en énergie des centres de recombinaison à l'intérieur de la bande interdite, de la concentration de ces centres et de celles des porteurs à l'équilibre [19].

Pour notre étude, on considère le cas où il existe des centres de recombinaison actifs dans le gap du semiconducteur ; dans ce cas, on dit que la recombinaison est assistée par des centres de recombinaison.

Lorsque le semiconducteur est peu dopé, les densités de porteurs libres sont faibles de sorte que la probabilité pour qu'un électron et un trou se recombinent est faible. La durée de vie des porteurs devrait alors être considérable. En fait, il n'en n'est pas ainsi car la présence d'impuretés incontrôlées joue un rôle non négligeable dans le processus de recombinaison.

En ce qui concerne le rôle joué dans ce domaine par les impuretés, on distingue deux types de centre. Si le défaut qui a initialement capturé un électron a une plus grande probabilité de piéger un trou plutôt que de remettre cet électron vers la bande de conduction, il capture le trou et provoque de ce fait la recombinaison de la paire électron-trou. Ce centre s'appelle *centre de recombinaison*. Si au contraire, le défaut qui a capturé, au départ, un électron a une plus grande probabilité de remettre cet électron vers la bande de conduction que de capturer un trou, il a simplement piégé momentanément un électron, c'est le cas d'un *centre piège à électron*.

Dans notre travail, seuls les centres de recombinaison sont pris en considération. Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres se fait dans le cadre de la théorie **Hall Shockley Read (S.R.H)**, il fait l'objet du paragraphe suivant.

## II.4. Eléments de théorie

Les densités de centres de recombinaison occupés  $N_{to}$  et vides  $N_{tv}$  sont respectivement données par  $N_{to} = N_t f$ ,  $N_{tv} = N_t (1-f)$ .  $N_t$  dénote la densité de centres de recombinaison et  $f$  la fonction de probabilité de ces niveaux,  $c'$  est la fonction de Fermi qui s'écrit ainsi :

$$f_t = 1 / (1 + \exp \{ (E_t - E_F) / (K_b T) \}) \quad (\text{II.3})$$

$E_F$  est le niveau de Fermi,  $K_b$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

$E_t$  est le niveau que les défauts occupent dans le gap du semiconducteur utilisé.

Les taux de recombinaison des électrons et des trous s'écrivent :

$$r_n = C_n n N_{tv} - E_n N_{tv} \quad (\text{II.4})$$

$$r_p = C_p p N_{to} - E_p N_{to} \quad (\text{II.5})$$

ou

$$r_n = N_t (C_n n (1-f) - E_n f) \quad (\text{II.6})$$

$$r_p = N_t (C_p p f - E_p (1-f)) \quad (\text{II.7})$$

$C_n$ ,  $C_p$ ,  $E_n$  et  $E_p$  sont les coefficients de capture et d'émission des électrons et des trous.

$n$  et  $p$  sont respectivement les densités d'électrons et de trous hors équilibre, elles s'expriment en fonction des densités de porteurs équivalents en équilibre,  $n_0$  et  $p_0$ , comme suit :

$$n = n_0 + \Delta n \quad (\text{II.8})$$

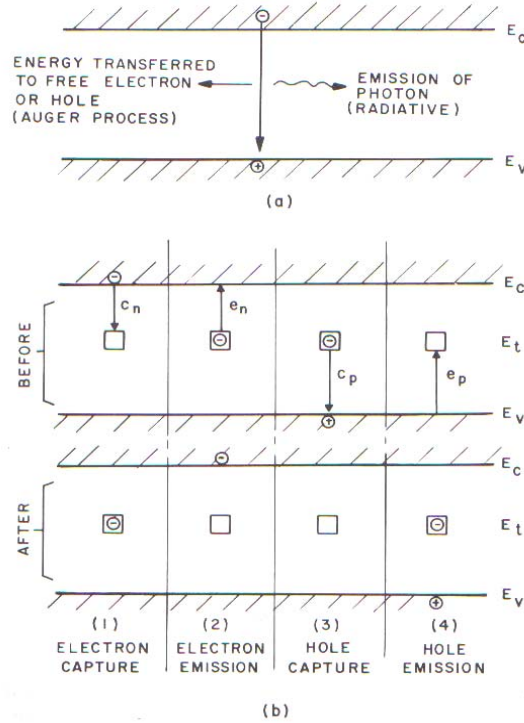
$$p = p_0 + \Delta p$$

(II.9)

où  $\Delta n$  et  $\Delta p$  sont respectivement les concentrations de porteurs de charge en excès.

La figure (II.1), schématise les phénomènes de capture et de recombinaison mis en jeu.





**Figure II.1.** Processus de recombinaison : (a). Recombinaison directe (b). Recombinaison indirecte sur un niveau unique (distribution mono énergétique) [20].

A l'équilibre thermodynamique  $n = n_0$ ,  $p = p_0$ ,  $r_n = r_p = 0$ , il s'ensuit :

$$E_n = C_n n_0 (1 - f) / f \quad (\text{II.10})$$

$$E_p = C_p p_0 f / (1 - f) \quad (\text{II.11})$$

Explicitons  $f$  à partir de l'expression (II.3) et  $n_0$  et  $p_0$  à partir des expressions suivantes :

$$n_0 = n_i \exp(E_{Fi} / K_b T) \quad (\text{II.12})$$

$$p_0 = n_i \exp(-E_{Fi} / K_b T) \quad (\text{II.13})$$

$E_{Fi}$  est le niveau intrinsèque de Fermi, tandis que  $n_i$  est la densité intrinsèque des porteurs ; elle s'exprime en fonction de l'énergie du gap,  $E_g$ , du semiconducteur utilisé sous cette forme :

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left\{-\frac{E_g}{2 K_b T}\right\} \quad (\text{II.14})$$

$N_c$  et  $N_v$  représentent les densités effectives d'état dans les bandes de conduction et de valence respectivement (ce sont des paramètres qui dépendent de la température et des masses effectives des électrons et des trous).

Les taux d'émissions  $E_n$  et  $E_p$  s'écrivent alors :

$$E_n = C_n n_i \exp((E_c - E_{Fi})/K_b T) \quad (\text{II.15})$$

$$E_p = C_p n_i \exp(-(E_c - E_{Fi})/K_b T) \quad (\text{II.16})$$

Les taux de recombinaisons sont donnés par les expressions suivantes :

$$r_n = C_n N_t (n(1-f) - f n_i \exp(E_c - E_{Fi}/K_b T)) \quad (\text{II.17})$$

$$r_p = C_p N_t (p f - (1-f) n_i \exp(-(E_c - E_{Fi})/K_b T)) \quad (\text{II.18})$$

Le centre de recombinaison provoque la recombinaison d'une paire électron trou de sorte que  $r_n = r_p$ . En écrivant cette égalité, on obtient la probabilité d'occupation du centre sous cette forme :

$$f = \frac{C_n n + C_p n_i \exp(-(E_c - E_{Fi})/K_b T)}{C_n \left\{ n + n_i \exp\left(\frac{E_c - E_{Fi}}{K_b T}\right) \right\} + C_p \left\{ p + n_i \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{K_b T}\right) \right\}} \quad (\text{II.19})$$

En explicitant  $f$  dans les expressions (II.17 et II.18), on obtient le taux net de recombinaison  $r = r_n = r_p$  comme:

$$r = C_n C_p N_t \frac{pn - n_i^2}{C_n \left\{ n + n_i \exp\left(\frac{E_c - E_{Fi}}{K_b T}\right) \right\} + C_p \left\{ p + n_i \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{K_b T}\right) \right\}} \quad (\text{II.20})$$

Les deux coefficients de capture des électrons et de trous  $C_n$  et  $C_p$  sont reliés aux sections de capture  $\sigma_n$  et  $\sigma_p$  pour les deux types de porteurs par :

$$C_{n,p} = \sigma_{n,p} V_{th} \quad (\text{II.21})$$

où  $V_{th}$  est la vitesse thermique des porteurs, elle est de l'ordre de  $10^7$  (cm/s) à  $T = 300 \text{ K}$ .

Afin de rendre plus claire l'influence de divers facteurs physiques sur la recombinaison, on suppose que les sections efficaces d'électrons et de trous,  $\sigma_{n,p}$ , respectives sont égales,  $\sigma_n = \sigma_p$ . Ceci permet d'écrire l'équation (II. 20) sous la forme :

$$r = \sigma V_{th} N_t \frac{(p n - n_i^2)}{n + p + 2 n_i \cosh\left[\frac{E_t - E_{Fi}}{K_B T}\right]} \quad (\text{II.22})$$

On peut noter que le taux net de recombinaison  $r$  est d'autant plus élevé que le niveau associé aux défauts  $E_t$  est proche du milieu du gap.

C'est par exemple le cas de l'or dans le Silicium [21, 22].

Le régime de faible injection est défini par la condition  $\Delta n = \Delta p \ll n_0$  ou  $p_0$  ; en d'autres termes, l'excès de porteurs par rapport au régime d'équilibre est faible devant la densité de porteurs majoritaires du semi-conducteur .

pour un semi conducteur dopé et en régime de faible injection, le taux de recombinaison de porteurs de charge minoritaires s'écrit :

$$\text{semi-conducteur de type p :} \quad r_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{II.23})$$

$$\text{semi-conducteur de type n :} \quad r_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (\text{II.24})$$

$\tau_{n,p}$  est appelée durée de vie de porteurs minoritaires dans le semi- conducteur.

A faible injection et pour un semi-conducteur de type p , l'expression (II.20) se simplifie sous la forme :

$$r = r_n = \frac{\Delta n}{(N_t C_n)^{-1}} \quad (\text{II.24})$$

En tenant compte de la relation (II.21 ) et (II.24),  $\tau_n$  s'écrit :

$$\tau = \tau_n = \frac{1}{N_t \sigma V_{th}} \quad (\text{II.25})$$

Il est connu que les défauts cristalographiques ( dislocations, joints de grains, ...) dans les semi- conducteurs dégradent la durée de vie des porteurs de charge minoritaires et les caractéristiques électriques des jonctions de collecte de courant.

Afin d'apprécier quantitativement leur influence, l'élaboration de modèles théoriques est fondamentale [1-5, 23-32].

Ces modèles sont basés sur l'étude de l'interaction électron – matière (partie qu'on verra au chapitre IV) et nécessitent la résolution de l'équation de continuité régissant le transport de charges, c'est l'objet du paragraphe suivant.

## II.5. Equation de continuité

Le comportement des porteurs générés en excès, suite à l'action du faisceau, est régi par les équations de continuité qui décrivent la variation du nombre de porteurs par unité de temps ; elles sont données par :

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = g - r + \frac{1}{q} \overrightarrow{\text{div}} \vec{J}_p \quad \text{pour les électrons} \quad (\text{II.26})$$

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = g - r - \frac{1}{q} \overrightarrow{\text{div}} \vec{J}_n \quad \text{pour les trous} \quad (\text{II.27})$$

où :

$g$  et  $r$  sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs ( $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ), ils sont dus à une excitation extérieure.

$\vec{J}_n$  et  $\vec{J}_p$  sont respectivement les densités de courant d'électrons et de trous ; elles contiennent les deux contributions, de diffusion (causée par le gradient de concentration) et de conduction (causée par la présence du champ électrique dû au contact métal-semiconducteur) ; elles sont données par les relations suivantes.

$$\vec{J}_n = q \mu_n n \vec{E} + q D_n \overrightarrow{\text{grad}} n \quad (\text{II.28})$$

$$\vec{J}_p = q \mu_p p \vec{E} + q D_p \overrightarrow{\text{grad}} p \quad (\text{II.29})$$

où  $\mu_{n,p}$  et  $D_{n,p}$  sont respectivement les mobilités et coefficients de diffusion des électrons et des trous.

Ils sont reliés entre eux par la relation d'Einstein qui s'écrit :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{K_b T}{q} \quad (\text{II.30})$$

$K_b$  est la constante de Boltzmann,  $q$  la charge électrique.

La détermination du champ électrique  $\vec{E}$  nécessite la résolution de l'équation de Gauss qui s'écrit sous la forme :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (\text{II.31})$$

où  $\rho$  correspond à la densité de charge ;  $\epsilon$  est la constante diélectrique du milieu.

Le champ électrique est d'autre part lié au potentiel par la relation :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} V \quad (\text{II.32})$$

Ainsi l'équation (II.31) devient :

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (\text{II.33})$$

C'est l'équation de Poisson, dont l'intégration permet de calculer la variation du potentiel dans un semiconducteur à partir de la charge d'espace.

Dans le cas d'une recombinaison sur un niveau d'énergie,  $E_t$ , situé dans la bande interdite,  $r$  est donné par la théorie de **Hall- Shockley –Read**, équations (II.23 et II. 24).

La résolution de l'équation de continuité, qui est la base de toutes les théories EBIC, permet de déterminer des paramètres très importants, tels que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires défini par  $L=(D \tau)^{1/2}$ , la vitesse de recombinaison en surface, ...etc.

Notre travail s'inscrit dans ce cadre et consiste à déterminer la hauteur de barrière de potentiel, la vitesse de recombinaison et plusieurs paramètres physiques susceptibles de caractériser les phénomènes de recombinaison mis en jeu.

Nous allons d'abord présenter un calcul self consistant, relatif à l'analyse de la recombinaison au niveau d'un précipité sphérique.

La deuxième partie de notre travail concerne l'étude des variations des concentrations de porteurs de charge, suite à une excitation extérieure.

# ***Analyse de la vitesse de recombinaison au niveau d'un précipité sphérique plongé dans un semiconducteur ( $S_i$ )***

## **III.1. Introduction**

Les défauts ponctuels et étendus jouent un rôle essentiel dans la performance des dispositifs à semiconducteurs, particulièrement pour ce qui concerne leurs propriétés électroniques et optiques [6, 33, 34].

Les états d'interface présents à la surface de ces défauts sont à l'origine de ces effets. Beaucoup d'auteurs [1-5, 23-32] ont orienté leurs efforts en direction de l'étude de l'activité électrique des défauts en modélisant le contraste EBIC et en confrontant le produit de leur théorie avec l'expérience, si elle existe ; il n'en demeure pas moins que la prise en considération exhaustive de toute la réalité physique posée rend extrêmement difficile sa résolution.

Une analyse fine de la bibliographie montre que les travaux les plus accomplis sont ceux de R. J.Tarento et al [1] sur les dislocations et de J.Oualid et al [2] sur les joints de grains.

Il paraissait donc naturel d'aborder ce chapitre par une présentation de ces deux modèles historiques, avant de mettre en exergue notre modèle.

Dans ce chapitre, une analyse de la recombinaison au niveau du précipité sphérique, qui est le défaut considéré, est présentée.

## III.2. Modèles de la littérature

### a. Modèle du joint de grains

J.Oualid et al [2] ont étudié la recombinaison au niveau d'un joint de grains placé dans un semi-conducteur de type p, en supposant une situation de faible injection, ainsi qu'une constance du quasi-niveau de Fermi pour les porteurs de charges majoritaires,  $E_{Fp}$ , contrairement à celui relatif aux porteurs de charges minoritaires,  $E_{Fn}$ , qui, lui, varie. Les courbures de bande correspondant au quasi-niveau de Fermi,  $E_{Fn}$ , sont notées respectivement ( $\Delta_1$ ) dans la zone déserte et ( $\Delta_2$ ) dans la zone quasiment neutre.

L'état de charge est donné par le modèle de la bande à demi-pleine (Half Filled Band:HFB).

L'occupation des niveaux est contrôlée par la fonction de Fermi Dirac à l'équilibre et par le mécanisme de **Hall-Shockley-Read (S.R.H)** [34] pour des conditions hors équilibre.

Une excitation uniforme (elle est représentée par la différence entre les quasi-niveaux de Fermi dans la région neutre du semi-conducteur), est prise en compte.

Le défaut est pris dans une bande d'épaisseur  $2\delta$  et occupe un niveau énergétique dans l'intervalle suivant :  $E_i + E_a - \delta < E_t < E_i + \delta$ , avec  $E_i$  le niveau de Fermi intrinsèque du semiconducteur utilisé et  $E_a$ , le niveau énergétique associé au défaut.

La condition de neutralité d'un semi-conducteur de type p, pour un taux de dopage  $N_a$ , est décrite par l'expression suivante :

$$Q = q N_t |f - 1/2| = 2 q N_a W_B \quad (\text{III.1})$$

$W_B$  est l'épaisseur de la zone déserte formée et  $N_t$ , la concentration des défauts d'interface.

La probabilité d'occupation des niveaux profonds ainsi que le taux net de recombinaison  $U_s$  sont donnés par les relations (II. 19) et (II.22).

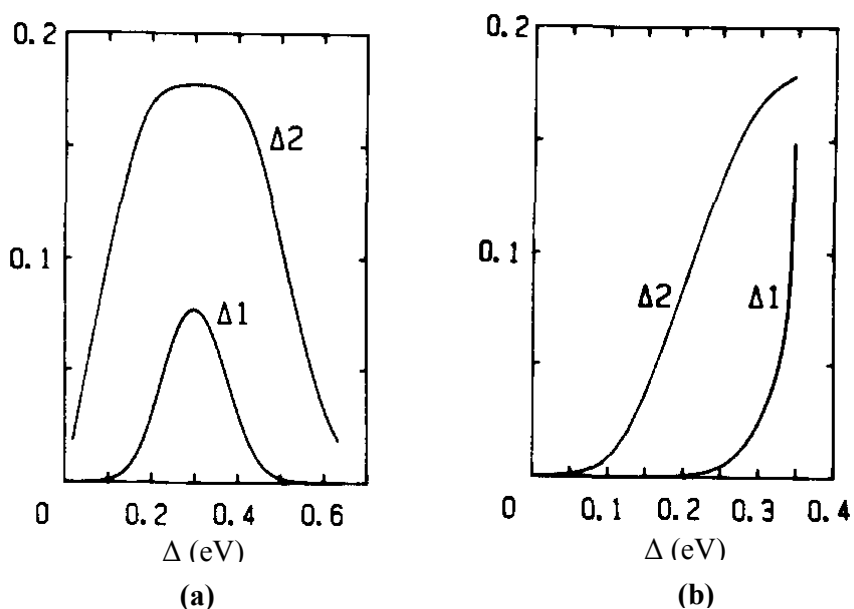
Les concentrations respectives de trous et d'électrons à l'interface du joint de grain,  $n(o)$  et  $p(o)$ , ainsi que celle d'électrons au bas de la zone déserte,  $n(W_B)$ , sont calculées, d'où la possibilité de déterminer les variations du quasi niveau de Fermi dans la zone déserte.

De plus, la concentration d'électrons loin du joint de grains,  $n(\infty)$ , est obtenue grâce à la résolution de l'équation de continuité dans la région quasiment neutre.

En outre, la vitesse effective de recombinaison,  $S_{eff}$ , a été prise comme [35] :

$$S_{eff} = \frac{1}{2} \frac{v_s}{[n(w_B) - n_0]} \quad (\text{III.2})$$

La figure III.1 rapporte l'évolution des courbures de bande, dans la zone déserte ( $\Delta_1$ ) et dans la zone neutre ( $\Delta_2$ ), en fonction de l'excitation extérieure,  $\Delta$ .



**Figure. III.1.** Evolution des courbures des bandes d'énergie des quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte ( $\Delta_1$ ) et dans la zone neutre ( $\Delta_2$ )

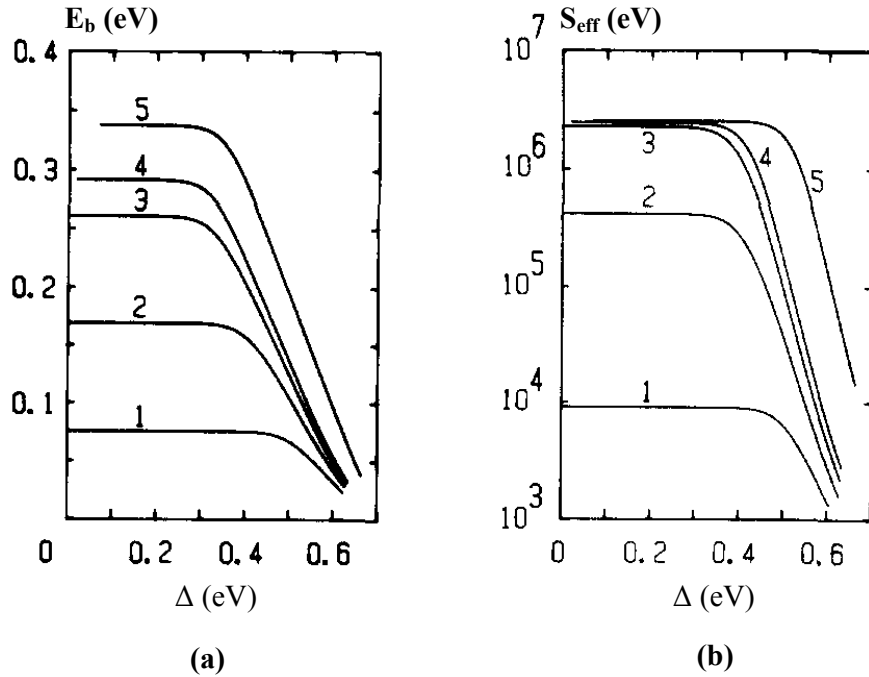
(a) en fonction du niveau d'excitation dans le volume ( $\Delta$ ).

(b) en fonction de la hauteur de l'énergie de barrière ( $E_b$ ).

$E_a = 0$  (eV),  $\phi = 0$  (eV),  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $\sigma_n = 2.5 \cdot 10^{-16}$  (cm<sup>-2</sup>),  $L_n = 50$ (cm),  $D_n = 14$  (cm<sup>2</sup>/s).



Par ailleurs, les variations de la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , et de la vitesse de recombinaison interfaciale,  $S_{eff}$ , avec l'excitation,  $\Delta$ , sont représentées sur la figure III.2.



**Figure. III.2.** Variations de la hauteur de l'énergie de barrière  $E_b$  (eV) **(a)** et de la vitesse de recombinaison  $S_{eff}$  (cm/s) **(b)** avec le niveau d'excitation dans le volume ( $\Delta$ ) pour différentes densités d'états d'interface.

(1)  $N_t = 4 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-3</sup>), (2)  $N_t = 6 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-3</sup>), (3)  $N_t = 8 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-3</sup>), (3)  $N_t = 10^{12}$  (cm<sup>-3</sup>), (3)  $N_t = 5 \cdot 10^{12}$  (cm<sup>-3</sup>)..  
 $E_{ao} = -0.1$ (eV),  $\phi = 0.05$  (eV),  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $\sigma_n = 10^{-16}$  (cm<sup>-2</sup>),  $L_n = 50$ (cm),  $D_n = 14$  (cm<sup>2</sup>/s).

On peut noter que dans ce modèle, les courbures de bandes ont été prises en considération dans les zones déserte et quasiment neutre, respectivement.

Par ailleurs, il a été montré que les courbes d'évolution de la barrière de potentiel et de la vitesse effective de recombinaison, dans le cadre de la théorie de **Hall Shockley Read (S.R.H)**, dépendent fortement de l'excitation extérieure et du niveau associé aux états d'interface mis en jeu.

Enfin, il est apparu que la vitesse effective de recombinaison admet une valeur limite, de l'ordre de  $\frac{1}{2}V_{th}$  et qu'elle varie exponentiellement avec la hauteur de barrière de potentiel  $E_b$ , pour des valeurs de  $E_b < 0.2$  (eV) ; le quasi niveau de Fermi est, dans ce cas, considéré comme plat dans la zone de charge d'espace associée au joint de grains.

### b. Modèle de la dislocation

R.J.Tarento et al [1], en étudiant le contraste EBIC d'une dislocation, reprennent la démarche suivie par J.Oualid [2] pour les joints de grains mais en améliorant les hypothèses de travail, en ce sens qu'ils prennent en considération l'existence d'une densité d'états de surface,  $N_t$ , occupant une bande d'énergie de largeur ( $2\delta$ ), dont le centre est situé en un niveau noté ( $E_a$ ). D'après Veth et Lannoo [36], le niveau du défaut ( $E_a$ ) est une fonction de l'état de charge de la dislocation ; ainsi, R.J.Tarento et al [1] le représentent en fonction de ( $E_a$ ) dans le cas neutre, comme suit :

$$E_a = E_{a_0} + p \quad (\text{III.3})$$

où  $\delta$  est une constante estimée à 0.7 et  $p$  la valeur absolue de l'excès d'électrons par atome.

La ligne de dislocation, de longueur  $L$ , est occupée par des défauts de surface de concentration  $N_t$  ; les auteurs expriment la charge  $Q$  portée par la dislocation comme :

$$Q/L = q (p/a) \quad (\text{III.4})$$

où  $a$  est la distance interatomique le long du défaut.

La charge  $Q$  dérive de l'occupation des niveaux des défauts et ce, dans le cadre du modèle de Hall-Shockley-Read (S.R.H) [28]:

$$Q = \frac{e N_t K_b T}{4\delta} \left[ \ln \left( \frac{n(o) + p(o) + 2 n_i \cosh[(E_a + \delta)/K_b T]}{n(o) + p(o) + 2 n_i \cosh[(E_a - \delta)/K_b T]} \right) - \frac{[n(o) - p(o)]}{\alpha} \ln \left( \frac{n(o) + p(o) + 2 n_i + \alpha t1 n(o) + 2 n_i - \alpha t2}{n(o) + p(o) + 2 n_i - \alpha t1 n(o) + 2 n_i + \alpha t2} \right) \right] \quad (\text{III.5})$$

avec

$$\alpha = \{[n(o) + p(o)]^2 - 4n_i^2\}^2$$

$$t1 = \tanh[(E_a + \delta)/K_b T] \quad \text{et} \quad t2 = \tanh[(E_a - \delta)/K_b T]$$

$n_i$  est la concentration intrinsèque du semi-conducteur utilisé.

$n(o)$  et  $p(o)$  sont respectivement les concentrations d'électrons et des trous sur la ligne de dislocation. Elles ont la même forme que celles obtenues dans le cas du modèle des joints de grains.

La quantité  $\Delta(o)$  note le niveau d'excitation sur la ligne de dislocation.

Le rayon du cylindre de Read obéit à la relation suivante:

$$\pi R^2 N_a = \rho/2 \quad (\text{III.6})$$

où  $N_a$  est la concentration de dopant.

Notons que le volume caractérisé par la différence entre le rayon du cylindre de Read et celui de la dislocation est le siège d'une charge qui compense celle existant sur le défaut considéré.

La résolution de l'équation de Poisson permet d'exprimer la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , sous la forme :

$$E_b = \frac{2\varepsilon^2 \rho}{\alpha \varepsilon} [\ln(R/\alpha) - 1/2] \quad (\text{III.7})$$

Les variations du quasi niveau de Fermi,  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , dans les deux zones, déserte et quasiment neutre respectivement, sont reliées à la vitesse de recombinaison,  $S_{eff}$ .

Ce paramètre est pris sous la forme suivante :

$$S_{eff} = \frac{U_s}{2\pi R [n(R) - n_r]} \quad (\text{III.8})$$

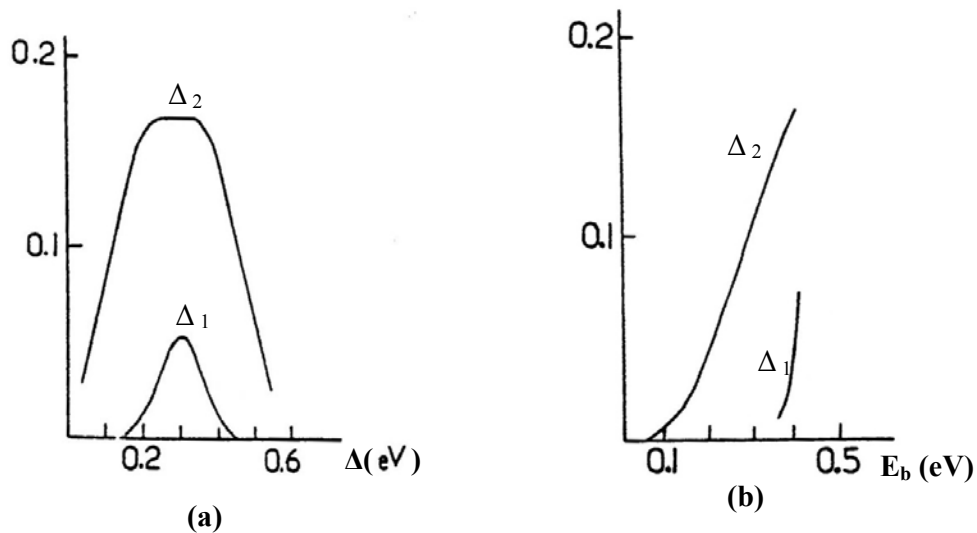
où  $U_s$  est le taux de recombinaison, il est déterminé à partir de la théorie de (S.R.H) par l'expression suivante :

$$U_s = \frac{\sigma V_{th} K_b T}{2\delta\alpha} [p(o)n(o) - n_i^2] \ln \left[ \frac{n(o) + p(o) + 2n_i + \alpha t1}{n(o) + p(o) + 2n_i - \alpha t1} \frac{n(o) + p(o) + 2n_i - \alpha t2}{n(o) + p(o) + 2n_i + \alpha t2} \right]$$

## (III.9)

$V_{th}$  est la vitesse thermique et  $\sigma$  la section efficace.

Adoptant une procédure de calcul self consistante, les auteurs rapportent les variations des courbures des bandes d'énergie  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , en fonction du niveau d'excitation dans le volume,  $\Delta$ , (Figure (III.3. a)) et de la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , (Figure (III.3. b)).



**Figure. III.3.** Evolution des courbures des bandes d'énergie des quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte ( $\Delta_1$ ) et dans la zone neutre ( $\Delta_2$ )

(a) en fonction du niveau d'excitation en volume ( $\Delta$ ).

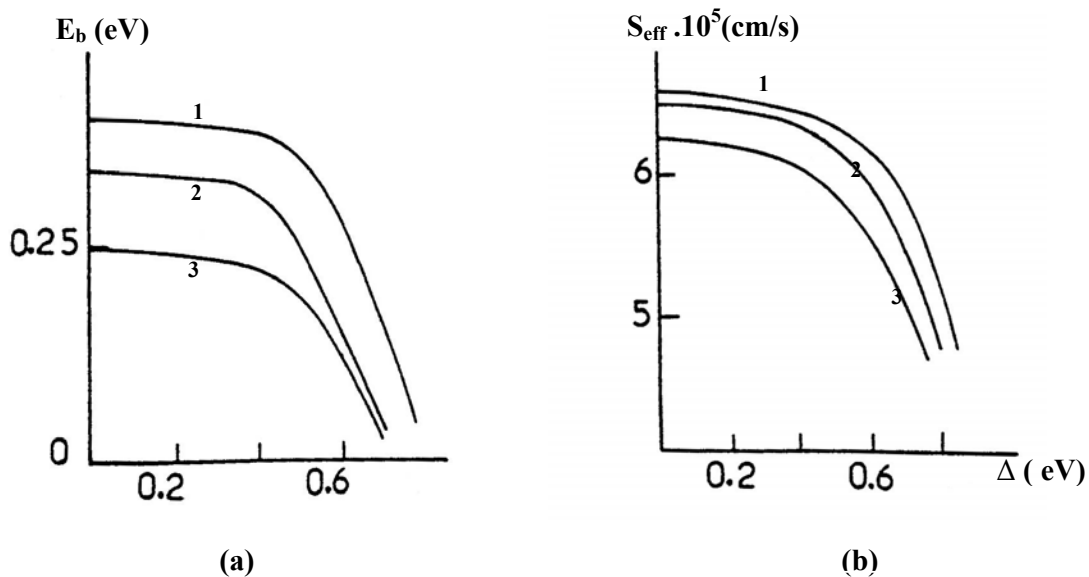
(b) en fonction de la hauteur de l'énergie de barrière ( $E_b$ ).

$E_{a0} = -0.1$  (eV),  $\phi = 0.05$  (eV),  $N_a = 10^{16}$  ( $\text{cm}^{-3}$ ),  $\sigma_n = 10^{-16}$  ( $\text{cm}^{-2}$ ),  $L_n = 80$  (cm),  $D_n = 25$  ( $\text{cm}^2/\text{s}$ ).

Pour une excitation  $\Delta$  (o) donnée ( $\Delta$  (o) = 0.01 eV), les résultats obtenus indiquent la constance du quasi-niveau de Fermi dans la zone déserte.

D'autre part, l'approximation ( $\Delta_2 \approx 0$ ) apparaît comme vraie dans le cas des faibles excitations, elle est due aux faibles valeurs de l'énergie de barrière,  $E_b$ ; ces dernières sont notamment dues à la décroissance de la vitesse effective de recombinaison,  $S_{eff}$ .

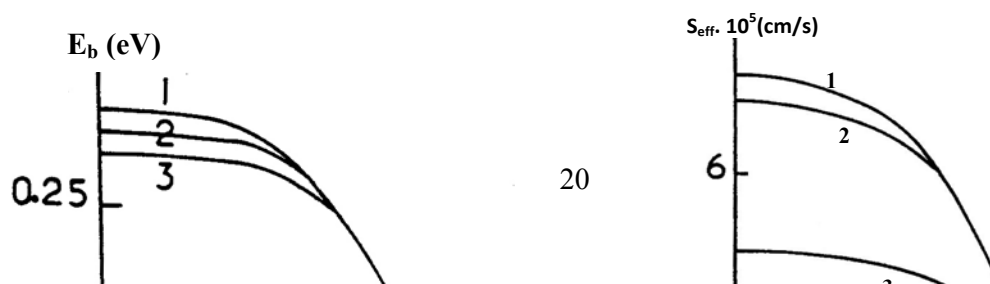
Les variations de la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , et de la vitesse effective de recombinaison,  $S_{eff}$ , en fonction de  $\Delta$ , sous l'influence de deux paramètres physiques de surface qui sont la concentration d'états d'interface,  $N_t$ , et le niveau des défauts,  $E_{ao}$ , sont rapportées sur les figures (III.4) et (III.5) respectivement.



**Figure. III.4.** Variations de la hauteur de l'énergie de barrière  $E_b$  (eV) (a) et de la vitesse de recombinaison  $S_{eff}$  (cm/s) (b) avec le niveau d'excitation en volume ( $\Delta$ ) pour différentes densités d'état d'interface.

(1)  $N_t = 5 \cdot 10^8$  (cm<sup>-1</sup>); (2)  $N_t = 10^8$  (cm<sup>-1</sup>), (3)  $N_t = 10^7$  (cm<sup>-1</sup>)

$E_{ao} = -0.1$  (eV),  $\phi = 0.05$  (eV),  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $\sigma_n = 10^{-16}$  (cm<sup>-2</sup>),  $L_n = 80$  (cm),  $D_n = 25$  (cm<sup>2</sup>/s).



(a) (b)

**Figure. III.5.** Variations de la hauteur de l'énergie de barrière  $E_b$  (eV) **(a)** et de la vitesse de recombinaison  $S_{eff}$  (cm/s) **(b)** avec le niveau d'excitation en volume ( $\Delta$ ) pour différentes distributions d'état d'interface.

(1)  $E_{ao} = -0.05$  (eV), (2)  $E_{ao} = -0.10$  (eV), (3)  $E_{ao} = -0.15$  (eV).

(2)  $E_{ao} = -0.1$  (eV),  $\delta = 0.05$  (eV),  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $\sigma_n = 10^{-16}$  (cm<sup>-2</sup>),  $L_n = 80$ (cm),  $D_n = 25$  (cm<sup>2</sup>/s).

Il apparaît que l'influence de  $N_t$  sur les courbes  $E_b = f(\Delta)$  et  $S_{eff} = f(\Delta)$  est en bon accord avec les résultats de la littérature [2], dans le sens où l'augmentation des densités surfaciques des charges fait croître les hauteurs de barrière et donc les vitesses de recombinaison dans le même sens.

En ce qui concerne l'effet du niveau d'énergie associé aux défauts,  $E_{ao}$ , sur l'évolution de  $E_b$  et  $S_{eff}$  en fonction de  $\Delta$ , il faut noter que plus  $E_{ao}$  se rapproche du milieu de la bande d'énergie (donc du milieu du gap), plus son influence est marquée car le processus de recombinaison est important.

### III.3. Notre Modèle

#### a. Introduction

Cette partie est consacrée à la présentation de notre étude, relative au processus de recombinaison à l'interface d'un précipité métallique plongé dans un semiconducteur ; la première partie de notre travail s'appuie sur les travaux effectués par R.J. Tarento et al [1] sur les dislocations et par J.Oualid et al [2] sur les joints de grains.

Elle consiste à apprécier, par une méthode self consistante, l'évolution de quelques paramètres physiques qui matérialisent le phénomène de recombinaison au niveau d'un précipité sphérique.

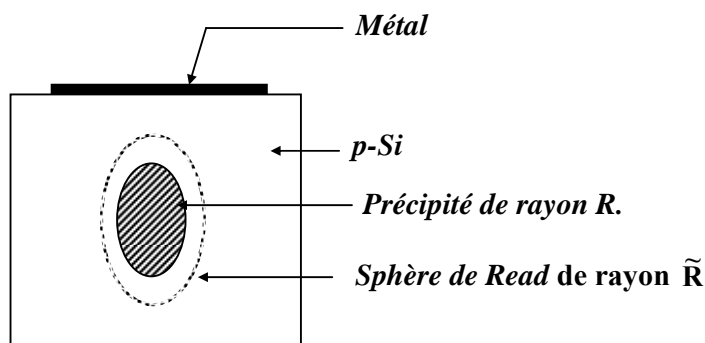
Ces paramètres sont l'énergie de barrière,  $E_b$ , la vitesse effective de recombinaison du défaut,  $S_{\text{eff}}$ , le rayon de Read,  $\tilde{R}$ , les courbures de bande associées au quasi-niveau de Fermi dans les deux zones, ( déserte ( $\Delta_1$ ) et quasiment neutre ( $\Delta_2$ ) ), la probabilité d'occupation des niveaux,  $f_t$ , la densité de charge qui lui est associée, ...etc.

La recombinaison est abordée dans le cadre de la théorie **H**all – **S**hockley - **R**ead (SRH).

Une distribution mono énergétique des états d'interface est considérée dans deux cas limites :

- Cas du niveau à demi plein (Modèle H.F.L.M), dans lequel le niveau énergétique associé au défaut considéré est à moitié rempli.
- Cas où le précipité sphérique est initialement neutre, c'est à dire avant excitation extérieure. Le modèle associé est noté X.F.L.M.

La figure traduit la géométrie étudiée.



**Figure. III.6** Schéma illustrant la géométrie utilisée.

Nous nous sommes restreints, pour des raisons simplificatrices, à une situation de faible injection, d'où la constance du quasi-niveau de Fermi,  $E_{Fp}$ , pour les porteurs de charges majoritaires, en première approximation, contrairement au quasi-niveau de Fermi des porteurs de charge minoritaires,  $E_{Fn}$ , qui lui, varie.

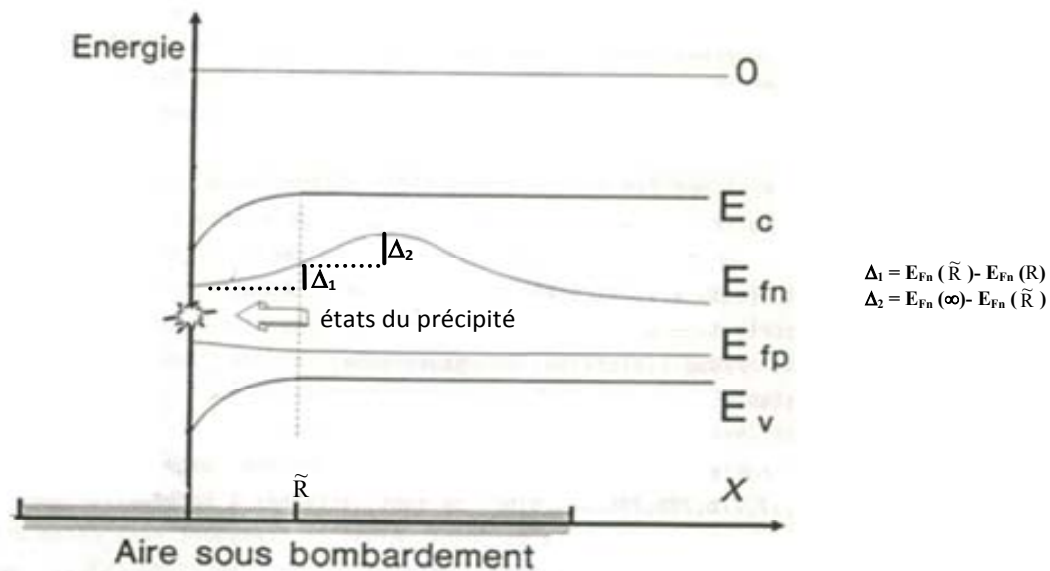
Les états de surface, de densité  $N_t$ , sont distribués sur un niveau unique,  $E_t$ , qui ne dépend pas de la charge interfaciale au précipité ; de plus, un déplacement rigide des bandes est pris en compte.

Par ailleurs, l'occupation des niveaux énergétiques est caractérisée par la fonction de Fermi Dirac à l'équilibre et par celle de **Hall – Shockley - Read (SRH)** pour une situation hors équilibre.

Le taux net de recombinaison,  $U_s$ , est déterminé à partir de la théorie **S.R.H.**

Concernant la charge sur le défaut, elle est étudiée selon deux modèles (HFLM et XFLM), définis plus haut.

L'existence d'un précipité sphérique métallique dans un semiconducteur de type p modifie l'architecture des bandes d'énergie ; ceci implique l'apparition de courbures au niveau des zones déserte (ZCE) et quasiment neutre (ZQN) entourant le précipité. Elles sont notées respectivement  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  et sont schématisées sur le diagramme de bande rapporté par la figure III.7.





**Figure III.7.** Schéma représentatif d'un diagramme de bande d'énergie associé à la présence d'un précipité sphérique dans un semi-conducteur de type p.

## b. Bases du modèle

### 1. La hauteur de barrière

Le précipité sphérique est affecté d'une charge  $Q$  qui traduit la répartition des charges électroniques à l'interface de ce défaut ; elle est donnée par la relation suivante :

$$\begin{aligned} Q &= e N_t (1 - f) && \text{Pour le modèle X.F.L.M} \\ Q &= e N && \text{Pour le modèle H.F.L.M} \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

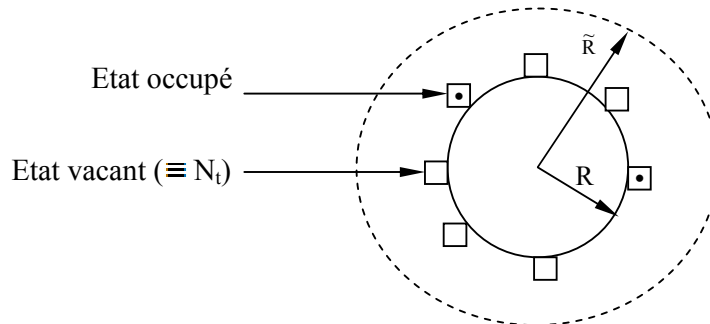
$N_t$  est le nombre de défauts par unité de surface,  $f$  la fonction de probabilité d'occupation d'un niveau profond dans le gap du semi-conducteur,  $e$  la charge élémentaire et  $R$ , le rayon du précipité sphérique.

$Q$  compense la charge des dopants ionisés qui se trouvent dans la zone de charge d'espace située entre le précipité de rayon  $R$  et la sphère de Read de rayon  $\tilde{R}$  ; elle peut donc être exprimée comme:

$$Q = \frac{4}{3} \pi e N_a (R^3 - \tilde{R}^3) \quad (\text{III.10})$$

où  $N_a$  est la concentration de dopant.

La figure (III.8) schématise cette situation :



**Figure . III.8.** Schéma illustrant l'état de charge du défaut considéré

Par ailleurs, l'équation de Poisson s'écrit comme suit :

$$-\frac{d^2 V(r)}{dr^2} = \frac{\rho(r)}{\epsilon} \quad (\text{III.11})$$

où  $\epsilon$  représente la constante diélectrique du semi-conducteur utilisé,  $\rho(r)$  sa densité électrique et  $V(r)$  le potentiel électrique à une distance  $r$  du défaut.

Si on admet qu'un champ électrique  $E(r)$  est établi à travers la zone de charge d'espace, il est possible de déduire son expression et par voie de conséquence, de déterminer la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , établie au bas de la zone de déserte, c'est à dire en  $(\tilde{R} - R)$ .

Tous calculs faits, on aboutit à :

$$E_b = \frac{e^2 N_a}{2\epsilon} \tilde{R}^2 - \frac{e^2 N_a}{2\epsilon} \left[ \frac{i}{\dots} \right] \quad (\text{III.12})$$

L'état de charge est déterminé à partir de l'occupation des niveaux de défauts. Dans le modèle de **Hall - Shockley - Read** (SRH), la probabilité d'occupation d'un niveau énergétique  $E_t$  sur la surface du précipité de rayon  $R$  est :

$$f = \frac{n(R) + n_i \exp[E_t - E]}{n(R) + p(R) + 2n_i \exp[E]} \quad (\text{III.13})$$

où  $p(R)$  et  $n(R)$  sont les concentrations de trous et d'électrons à la surface du précipité, elles sont données par :

$$p(R) = n_i \exp\left[-\frac{E}{kT}\right] \quad (\text{III.14})$$

$$n(R) = n_i \exp\left[-\frac{E_{Fp}}{kT}\right] \quad (\text{III.15})$$

$n_i$  est la concentration électronique intrinsèque.

Avec l'hypothèse de la constance du quasi-niveau de Fermi pour les porteurs de charge majoritaires ( $E_{Fp} = E_F = \text{constante}$ ), les équations (III.14) et (III.15) deviennent :

$$p(R) = \frac{N_a + \sqrt{N_a^2 + 4n_i^2}}{2} \exp \quad (\text{III.16})$$

et

$$n(R) = \frac{n_i^2}{2} \exp \left[ \quad (\text{III.17}) \right.$$

avec  $p_0$ , la concentration de trous à l'équilibre ; elle est donnée par la relation suivante [34] :

$$p_0 = \frac{N_a + \sqrt{N_a^2 + 4n_i^2}}{2}$$

$\Delta(R) = E_{Fn}(R) - E_{Fp}$ , représente le niveau d'excitation à l'interface du précipité sphérique, provoquant une modification de la position, à l'équilibre, du quasi niveau de Fermi associé aux porteurs de charge minoritaires (électrons), par rapport à celui des majoritaires (trous).

Il est relié à celui qui lui correspond dans la zone neutre  $\Delta$  ( $\Delta = E_{Fn}(\infty) - E_{Fp}$ ) par :

$$\Delta = [E_{Fn}(\infty) - E_{Fn}(\tilde{R})] + [E_{Fn}(\tilde{R}) - E_{Fn}(R)] + [E_{Fn}(R) \quad (\text{III.18})$$

Introduisons les paramètres,  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , comme :

$$\Delta_1 = [E_{Fn}(\tilde{R}) - \quad \text{et} \quad \Delta_2 = [E_{Fn}(\infty) -$$

Il s'ensuit que l'équation (18) devient :

$$\Delta = \Delta_2 + \Delta_1 \quad (\text{III.19})$$

## 2. La vitesse effective de recombinaison

La vitesse effective interfaciale de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , dépend du rayon de Read (qui est déterminé, de façon self consistante, dans la section II.1 en résolvant l'équation implicite de la charge  $Q$  (équations (III.9) et (III.10)), de la densité des porteurs de charge minoritaires sur la sphère de Read,  $n(\tilde{R})$ , et du taux net de recombinaison,  $U_s$ , à l'interface. Seul le cas d'une distribution mono énergétique des états d'interface sur un niveau  $E_t$  est discuté.

$U_s$  est défini dans le cadre de la théorie de **Hall-Shockley-Read** (SRH) par la relation suivante [6]:

$$U_s = \sigma V_{th} N_t \frac{(p(R)n(R))^{-1}}{n(R) + p(R) + 2n_i \cos} \quad (\text{III.20})$$

où  $V_{th}$  représente la vitesse thermique et  $\sigma$ , la section efficace de capture (pour simplifier, on suppose que la section efficace est la même pour les électrons et pour les trous).

En l'absence de génération et de recombinaison des porteurs dans la zone déserte, le flux de porteurs de charge minoritaires,  $J_n(r)$ , peut être relié au taux de recombinaison,  $U_s$ , comme suit :

$$-U_s = 4\pi r^2 J_n(r) = e D_n n(r) \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (\text{III.21})$$

où

$$n(r) = n_i \exp \left[ \frac{E_{Fn}}{k_B T} \right] \quad (\text{III.22})$$

$D_n$  est le coefficient de diffusion des électrons.

La combinaison des relations (III.20), (III.21) et (III.22) d'une part, et la prise en considération de la forme analytique de  $E_b$  (relation III.12) d'autre part, permet d'aboutir à une équation aux dérivées partielles du type :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[ \exp(E_{Fn}(r)) \right] = \frac{U_s}{4\pi R^2 D_n n_i r^2} \exp \left\{ \frac{E_i - E_b + \frac{e^2 N_a}{3\epsilon} \left[ \frac{\tilde{R}^2}{R} + \frac{R^2}{2} \right]}{k_B T} \right\} \exp \left\{ - \frac{\frac{e^2 N_a}{3\epsilon} \left[ \frac{\tilde{R}^2}{r} + \frac{r^2}{2} \right]}{k_B T} \right\} \quad (\text{III.23})$$

Après intégration et en faisant intervenir l'équation (III.23) aux positions  $R$  et  $\tilde{R}$ , on trouve une relation exprimant la concentration des porteurs de charge minoritaires sur la sphère de Read,  $n(\tilde{R})$  :

$$n(\tilde{R}) = n(R) \exp \left( - \frac{E_b}{k_B T} \right) \quad (\text{III.24})$$

avec

$$F = \exp \left\{ \frac{E_i - E_b + \frac{e^2 N_a}{3\epsilon} \left[ \frac{\tilde{R}^2}{R} + \frac{R^2}{2} \right]}{k_B T} \right\} \int_R^{\tilde{R}} \exp \left\{ - \frac{\frac{e^2 N_a}{3\epsilon} \left[ \frac{\tilde{R}^2}{r} + \frac{r^2}{2} \right]}{k_B T} \right\} \quad (\text{III.25})$$

La vitesse de recombinaison peut être maintenant exprimée à partir des relations (III.1), (III.20) et (III.24), comme une fonction de  $\Delta(R)$ .

Pour une barrière de potentiel très élevée, la relation se réduit à :

$$n(\tilde{R}) \quad (III.26)$$

A la suite des travaux effectués par Tarento et al [1] et J.Oualid et al [2] sur les dislocations et les joints de grains respectivement, on définit une vitesse effective de recombinaison,  $S_{eff}$ , qui dépend de paramètres physiques liées à l'interface de la sphère de Read comme:

$$S_{eff} = \frac{1}{\ln(\dots)} \quad (III.27)$$

L'équation (III.27) n'est en fait qu'une condition aux limites de l'équation de continuité menant à la détermination des concentrations de porteurs en présence de l'agrégat métallique plongé dans le semi-conducteur. Il apparaît de ce fait que la vitesse effective,  $S_{eff}$ , admet une valeur limite asymptotique, de la forme :

$$S_{eff} \approx \quad (III.28)$$

### 3. Les quasi-niveaux de Fermi des porteurs de charge minoritaires

La prise en considération de la concentration des porteurs minoritaires,  $n(r)$ , aux positions  $R$  et  $\tilde{R}$ , caractérisée par les relations (III.17) et (III.24) respectivement, donne :

$$\frac{n(\tilde{R})}{n(R)} = \exp\left[\frac{E_{Fn}(\tilde{R}) - E_{Fn}(R)}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{E_i(\tilde{R})}{k_B T}\right] \quad (III.29)$$

On déduit que :

$$\Delta_1 = [E_{Fn}(\tilde{R}) - E_{Fn}(R)] - E_b + k_B T \quad (III.30)$$

Les variations du quasi niveau de Fermi associé aux électrons dans la zone quasiment neutre proviennent de la constance de la concentration des porteurs de charge

minoritaires,  $n(r)$  ; cette dernière s'obtient en résolvant l'équation de continuité pour la géométrie du problème étudié, elle s'écrit comme :

$$D_n \nabla^2 n(r) = 0 \quad (\text{III.31})$$

où  $n(r)$  représente la concentration d'électrons en excès dans le volume du semiconducteur, tandis que  $\tau$  et  $D_n$  sont respectivement leur durée de vie et coefficient de diffusion.

Tous calculs faits, on trouve :

$$\Delta n(\tilde{R}) = n(\infty) - n(\tilde{R}) = \frac{K_b S_{eff}}{4\pi D_n \tilde{R}} \quad (\text{III.32})$$

Quant à la valeur du quasi-niveau de Fermi,  $\Delta_2$ , dans la zone quasiment neutre, elle est donnée par :

$$\Delta_2 = K_b T \ln \left( \frac{n(\infty)}{n(E)} \right) = K_b T \ln \left( 1 - \frac{K_b S_{eff}}{4\pi D_n \tilde{R} \left( \frac{\tilde{R}}{L_n} + 1 \right)} \right) \quad (1)$$

(III.33)

Dans le cas d'une forte excitation ( $n(\tilde{R}) \gg n_0$ ),  $\Delta_2$  devient :

$$\Delta_2 = K_b T \ln \left( 1 - \frac{K_b S_{eff}}{4\pi D_n \tilde{R} \left( \frac{\tilde{R}}{L_n} + 1 \right)} \right) \quad (2)$$

(III.34)

Des relations (III.30) et (III.33), il apparait clairement que la connaissance de  $\Delta_2$  et  $\Delta_1$  permet la détermination des paramètres physiques recherchés, à savoir  $E_b$  et  $S_{eff}$ , dans le cadre de la démarche self consistante discutée plus haut.

### c. Résultats de la recombinaison

Cette partie est consacré à la présentation des résultats relatifs au précipité, c'est à dire les principaux paramètres qui le caractérisent (hauteur de barrière, vitesse effective de recombinaison, rayon de Read, charge superficielle au défaut considéré, probabilité d'occupation des niveaux profonds, concentration de porteurs minoritaires et majoritaires sur le précipité et sur la sphère de Read, section efficace de capture électron- trous, ...) Les

influences respectives de la concentration des défauts situés à la surface du précipité et de la taille associée au défaut considéré sont discutés et ce, pour divers excitations extérieures.

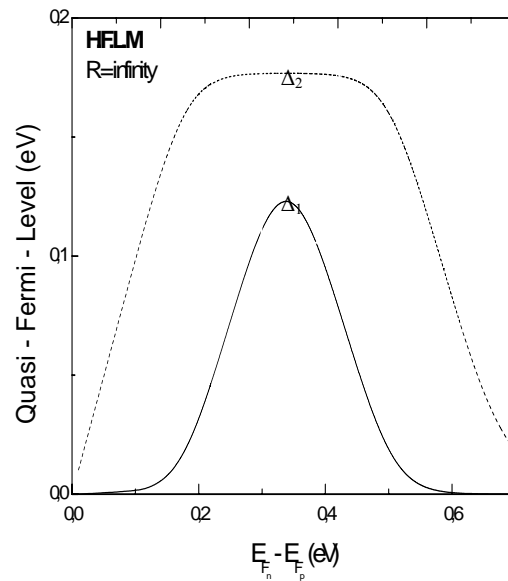
De plus, une partie de notre travail est consacrée à l'effet de la température. Dans cette étude, nous avons émis l'hypothèse d'une forte recombinaison ou l'état monoénergétique associé à l'état du défaut se situe au milieu du gap.

## 1. Evolution des paramètres avec l'excitation extérieure

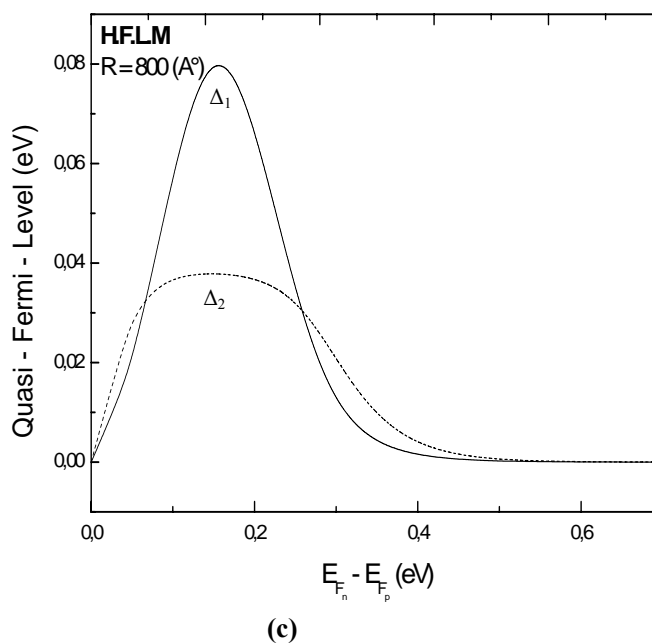
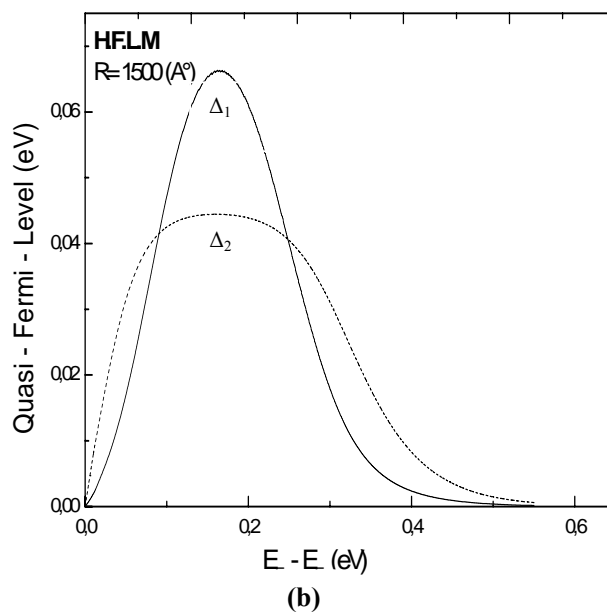
### (Effet de la taille du précipité et de la concentration des états d'interface)

#### i. Evolution des courbes $(\Delta_1, \Delta_2) = f(\Delta)$ et des courbes $(\Delta_1, \Delta_2) = f(E_b)$

La figure (III.9. a, b, c) caractérise l'évolution des quasi-niveaux de Fermi,  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , relatifs aux zones déserte et neutre respectivement et ce, en fonction du niveau d'excitation en volume,  $\Delta$ , pour différentes tailles du précipité.



(a)



**Figure III.9.** Evolution des courbures de bande associées aux quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte,  $\Delta_1$ , et dans la zone quasiment neutre,  $\Delta_2$ , en fonction de l'excitation en volume,  $\Delta$ , et ce, pour différentes tailles de précipité  $R$ . (**a** :  $R = \infty$ , **b** :  $R = 1500$  (Å°), **c** :  $R = 800$  (Å°))  $\sigma = 2 \cdot 10^{-16}$  (cm<sup>-2</sup>),  $L_n = 50$  (μm),  $D_n = 14$  (cm<sup>2</sup>/s) et  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $N_t = 8 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-2</sup>).



L'étude des figures (III.9. a, b et c) suggère d'abord que  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  admettent un comportement symétrique autour de la valeur  $E_{Fn} - E_{Fp} \approx 0.33$  (eV) et ce, pour des tailles de précipité supérieures à 100 ( $\text{\AA}$ ), cette situation étant caractérisée ici par les courbes associées à  $R = \text{infini}$ .

Ce cas a déjà été observé par J.Oualid sur les joints de grains [2], ces derniers pouvant être considérés comme des précipités de rayon infini.

Pour des tailles de précipité *intermédiaires*, situation schématisée par les courbes relatives à  $R = 1500$  ( $\text{\AA}$ ), il apparaît que  $\Delta_1$  a le même comportement que pour le cas  $R = \text{infini}$ , sauf qu'elle atteint son maximum pour une valeur de  $\Delta = E_{Fn} - E_{Fp}$  égale à 0.15 eV, inférieure à celle du cas précédent (0.33 eV).

Concernant  $\Delta_2$ , l'allure symétrique générale n'est plus conservée dans ce cas. Notons que là encore, le maximum de la courbe de  $\Delta_2$  est déplacé vers de plus faibles valeurs de  $\Delta$  que pour le premier cas, mais de manière plus prononcée que pour  $\Delta_1$ .

Par ailleurs et du point de vue de l'extension énergétique des deux courbes, il apparaît que  $\Delta_2$  est plus large que  $\Delta_1$  pour des tailles de précipités élevées, alors que l'effet est inversé pour des rayons inférieurs à 1500 ( $\text{\AA}$ ).

Pour une taille de précipité  $R$  inférieure à 150 ( $\text{\AA}$ ),  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  sont très petits (inférieurs à 0.01 eV), ceci suggère que l'excitation est limitée à l'interface ( $\Delta = \Delta(R)$ ).

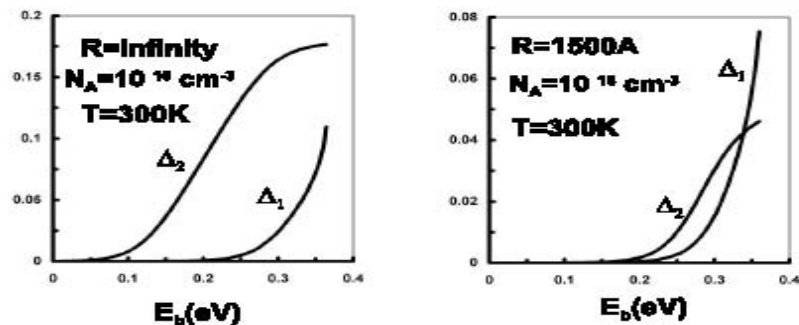
Pour les trois tailles étudiées, il apparaît que  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  sont nulles à très basse et à très haute excitation. Ces deux comportements extrêmes admettent des explications physiques différentes :

à faible excitation, le flux de porteurs de charges minoritaire en excès est faible, les quasi niveaux de Fermi ne sont donc pas affectés, tandis qu'à forte excitation, les porteurs de charge en excès tendent à saturer les états d'interface du précipité.

Quant aux maximums des courbes  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , ils semblent correspondre au début du processus de saturation des niveaux d'énergie associés au précipité ; il apparaît, en effet, qu'à partir de cette valeur particulière de  $\Delta$ , la vitesse de recombinaison effective,  $S_{\text{eff}}$ , amorce sa décroissance.

Les figures (III.11) et (III.12) confirment cette assertion.

Par ailleurs, les figures (III.10.a) et (III.10.b) rapportent les évolutions de  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  en fonction la hauteur de barrière  $E_b$  pour deux tailles de précipité.



**Figure. III.10.** Evolution des courbures de bande associées aux quasi-niveaux de Fermi dans la zone déserte  $\Delta_1$  et dans la zone quasiment neutre  $\Delta_2$  en fonction de la hauteur de barrière de potentiel,  $E_b$ , pour différentes tailles de précipité  $R$ . (a :  $R = \infty$ , b :  $R = 1500 \text{ (\AA)}$ ).  $\sigma = 2 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ,  $L_n = 50 \text{ (\mu m)}$ ,  $D_n = 14 \text{ (cm}^2\text{/s)}$  et  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ .

On constate d'abord que  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  admettent des valeurs négligeables pour des hauteurs de barrière inférieures à 0.2 eV et ce, quel que soit la taille du précipité choisi.

Ce résultat a déjà été obtenu par Tarento et al [1] pour les dislocations et par J.Oualid et al [2] dans le cas des joints de grains.

L'hypothèse de la platitude des quasi niveaux de Fermi n'est donc pertinente que pour des domaines relatifs aux très faibles excitations (voir la figure III.10).

Pour des valeurs de  $E_b$  plus élevées, cette hypothèse n'est plus de mise. Les travaux de Seager [37] et Dugas et al [38] sur les joints de grain confirment ce point.

Pour  $R$  infini,  $\Delta_2$  est toujours supérieure à  $\Delta_1$  dans les domaines étudiés. Il apparait que l'injection des porteurs de charge soit plus notable et effective dans la zone neutre, la zone déserte ne semblant pas jouer un rôle important, puisque sa largeur est d'autant plus faible que la taille du précipité est élevée.

Pour  $R$  égale à  $1500 \text{ \AA}$ ,  $\Delta_1$  commence à devenir plus élevée que  $\Delta_2$  à partir d'une valeur de  $E_b$  égale à  $0.33 \text{ eV}$ , ce qui correspond à  $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.04 \text{ eV}$ .

Si on se réfère à la figure 3.b, il apparaît qu'à ce point particulier sont associées deux valeurs de  $\Delta$  caractéristiques de l'égalité entre  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , à savoir  $0.08 \text{ eV}$  et  $0.25 \text{ eV}$ .

L'analyse de l'évolution de la hauteur de barrière,  $E_b$ , en fonction de l'excitation en volume,  $\Delta$ , montre que seule la valeur de  $\Delta = 0.25 \text{ eV}$  correspond à  $E_b = 0.33 \text{ eV}$ , pour  $N_t = 8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , et pas  $\Delta = 0.008 \text{ eV}$ .

Comme cette valeur de  $\Delta = 0.25 \text{ eV}$  est liée à la partie de la courbe dont l'évolution est expliquée par le phénomène de saturation des états d'interface, il apparaît donc que notre modèle n'est pas très sensible au phénomène de recombinaison, plutôt caractéristique de la partie ascendante des courbes  $E_b$  en fonction de  $\Delta$ .

Remarquons enfin que les valeurs des courbes de bandes,  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , décroissent avec le rayon du précipité, ce qui est dû en fait à la diminution de la hauteur de barrière de potentiel  $E_b$ .

On peut mentionner que pour un niveau d'excitation à l'interface donné ( $\Delta = 0.01 \text{ (eV)}$ ), on peut obtenir diverses hauteurs de barrière,  $E_b$ , tout en faisant varier les densités d'état d'interface,  $N_t$ .

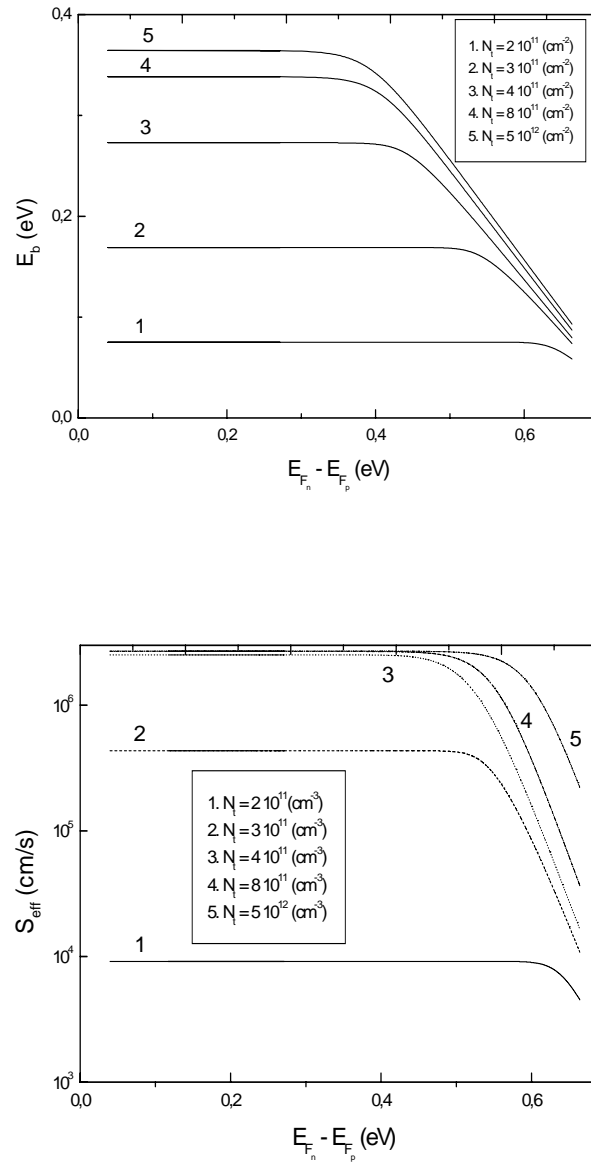
Ainsi, le changement de l'excitation extérieure,  $\Delta$ , permet d'aboutir aux évolutions présentées dans ce qui suit.

## ii. Evolution des courbes $E_b$ et $S_{\text{eff}} = f(\Delta)$

Les figures (III.11) et (III.12) caractérisent les évolutions respectives de  $E_b$  et  $S_{\text{eff}}$ , en fonction de l'excitation en volume,  $\Delta$ , pour divers états d'interface.

Deux tailles de précipités ont été envisagées.

Seuls les résultats relatifs au cas du niveau à demi plein, matérialisé par l'équation (III.9.b), sont présentés.

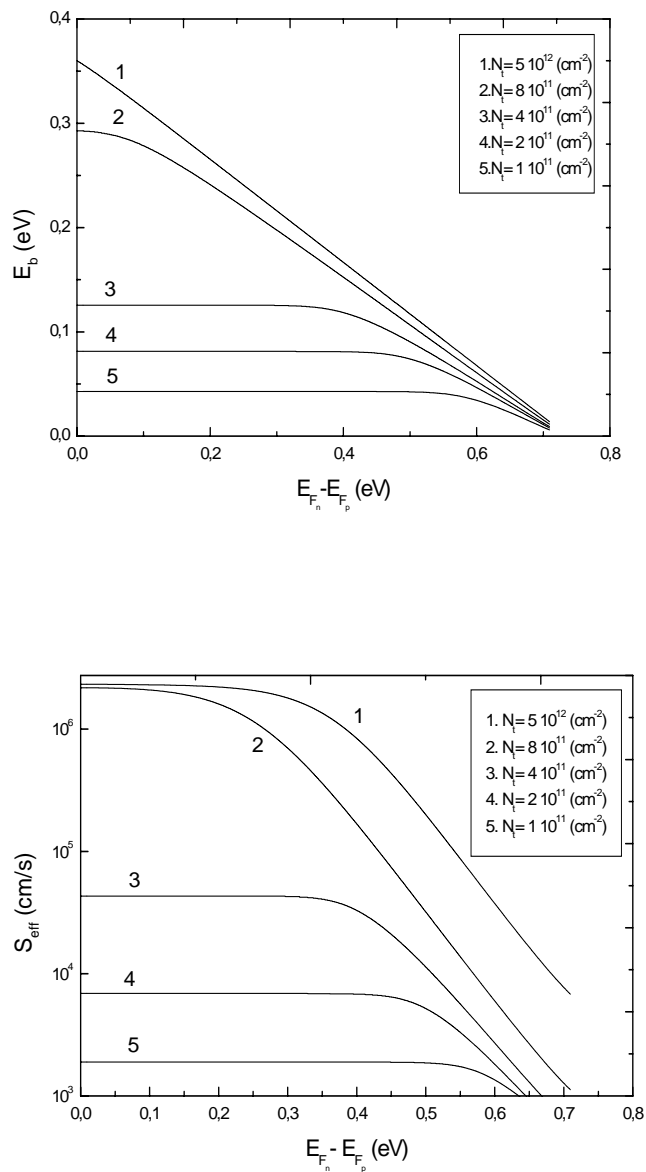
1.  $R = \text{infini}$ 

**Figure.III. 11.** Evolution de la hauteur de barrière,  $E_b$ , et de la vitesse effective de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , en fonction de l'excitation en volume  $\Delta$ , pour divers états d'interface  $N_t$  :

$R = \text{infini}$ ,  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ ,  $L_n = 50 \text{ (}\mu\text{m)}$ ,  $D_n = 14 \text{ (cm}^2\text{/s)}$ ,  $T = 300 \text{ (K}^\circ\text{)}$ .

1.  $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 2.  $N_t = 8 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 3.  $N_t = 4 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 4.  $N_t = 3 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 5.  $N_t = 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$

## 2. R= 1500 (A°)



**Figure.III. 12.** Evolution de la hauteur de barrière,  $E_b$ , et de la vitesse effective de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , en fonction de l'excitation en volume,  $\Delta$ , pour divers états d'interface  $N_t$  :

R = 1500 (A°),  $N_a = 10^{16}$  (cm<sup>-3</sup>),  $L_n = 50$  (μm),  $D_n = 14$  (cm<sup>2</sup>/s), T = 300 (K°)

1.  $N_t = 5 \cdot 10^{12}$  (cm<sup>-2</sup>), 2.  $N_t = 8 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-2</sup>), 3.  $N_t = 4 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-2</sup>), 4.  $N_t = 3 \cdot 10^{11}$  (cm<sup>-2</sup>), 5.  $N_t = 10^{11}$  (cm<sup>-2</sup>)

Concernant les évolutions de la hauteur de barrière avec le niveau d'excitation, elles ne sont pas en concordance avec celles obtenues par J. Oualid sur les joints de grains [2] ; cette différence provient vraisemblablement du fait qu'un précipité de rayon infini conduit à l'émergence d'une seule zone de charge d'espace, contrairement au cas du joint de grains qui, lui, en admet deux, de part et d'autre du joint de grains. Ceci a pour conséquence d'obtenir, dans notre cas, des valeurs de barrières plus élevées.

Pour les deux tailles ( $R = \text{infini}$  et  $R = 1500 \text{ (Å)}$ ), on peut noter la similitude des résultats que nous avons obtenus avec ceux trouvés par d'autres auteurs pour la dislocation et le joint de grains : à faible excitation,  $E_b$  et  $S_{\text{eff}}$  sont constants, tandis qu'à forte excitation, les deux grandeurs physiques diminuent fortement.

Cette situation s'explique par le fait qu'à faible excitation, ( $E_{F_n} - E_{F_p} \approx 0$ ), c'est-à-dire près du défaut, il existe une quantité de charge élémentaire à l'interface du précipité suffisamment importante pour avoir une recombinaison significative.

Quand l'excitation augmente ( $E_{F_n} - E_{F_p} \gg 0$ ), c'est-à-dire lorsqu'on s'éloigne de plus en plus du précipité, l'excès de porteurs de charges minoritaires remplit progressivement les niveaux d'interface du précipité jusqu'à saturation, provoquant ainsi la diminution de la hauteur de barrière  $E_b$ , donc de la vitesse effective de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ .

Concernant l'effet de la densité de défauts,  $N_t$ , on constate que les deux grandeurs physiques, hauteur de barrière,  $E_b$ , et vitesse effective de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , augmentent avec  $N_t$ ; cet état est probablement dû à l'augmentation de la quantité de charge qui existe à l'interface.

De plus, pour une excitation donnée,  $E_b$  et  $S_{\text{eff}}$  augmentent avec la taille.

A faible excitation,  $S_{\text{eff}}$  atteint une valeur limite asymptotique,  $S_{\text{eff}}^{\text{lim}}$ , pour une densité de surface  $N_t$  assez grande, dépendant de la taille.

$S_{\text{eff}}$  n'est pas insignifiante, elle semble être de l'ordre de  $V_{\text{th}}/3$ , où  $V_{\text{th}}$  est la vitesse thermique.

Pour les petites densités de défaut  $N_t$ , les hauteurs de barrière commencent à décroître à partir d'une excitation  $\Delta^{\text{dec}}$  ( $\Delta^{\text{dec}} = 0.4 \text{ (eV)}$ ) qui ne dépend pas " trop " de la taille.

Pour les grandes valeurs de  $N_t$ ,  $\Delta^{\text{dec}}$  est décalée vers de plus petites valeurs de l'excitation en volume  $\Delta$ .

La variation de  $E_b$  a un comportement presque linéaire à forte excitation, la pente diminue avec l'augmentation de  $N_t$  (-0.85 pour  $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$  et -0.3 pour  $N_t = 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ) et ce, pour les grandes tailles de précipité.

Pour  $R = 1500 \text{ (Å)}$ , la pente change de -0.50 pour  $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$  à -0.21 pour  $N_t = 2 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ .

Notre modèle aboutit au fait que la vitesse de recombinaison admet une valeur limite et ce, à faible excitation, matérialisée par la relation (III.28) ; elle a été trouvée égale à  $1/3 V_{th}$  et a été déterminée par les calculs.

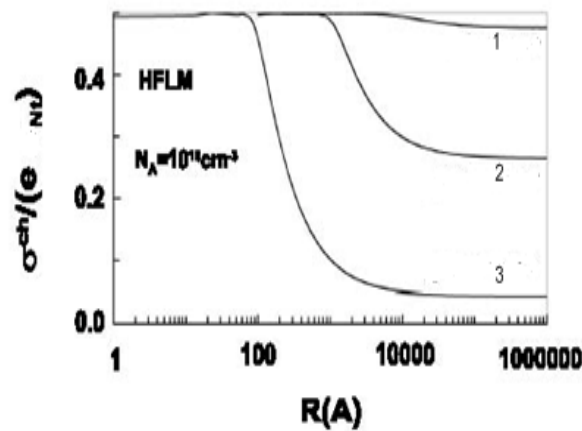
## 2. Evolution des paramètres avec la taille

(Evolution de la densité de charge  $\sigma^{ch}$  et de la hauteur de barrière  $E_b$  en fonction de la taille  $R$  pour différentes densités d'état d'interface)

La densité de charge superficielle,  $\sigma^{ch}$ , est définie comme étant une charge par unité de surface :

$$\sigma^{ch} = Q / (4\pi R^2) \quad \text{(III.38)}$$

La figure(III.13) rapporte l'évolution de  $\sigma^{ch} / e N_t$  en fonction de la taille du précipité, pour différentes valeurs de densités d'état,  $N_t$ .



**Figure III.13.** Variation de la densité de charge interfaciale  $\sigma^{ch}$  avec la taille du précipité, pour différentes densités d'état  $N_t$ .

$\sigma = 2 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ,  $L_n = 50 \text{ (}\mu\text{m)}$ ,  $D_n = 14 \text{ (cm}^{-2}\text{)}$  et  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ .

1.  $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 2.  $N_t = 8 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 3.  $N_t = 4 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ .

Le comportement général de  $\sigma^{\text{ch}} / e N_t = f(R)$  est globalement le même, quelque soit la valeur de  $N_t$  considérée :

La courbe commence par être quasi constante jusqu' à une valeur critique  $R_c$ , à partir de laquelle elle décroît d' autant plus vite que  $N_t$  est faible.

Il apparait de plus que plus la densité d'états d'interface,  $N_t$ , est élevée, plus  $R_c$  est décalé vers les fortes tailles de précipité.

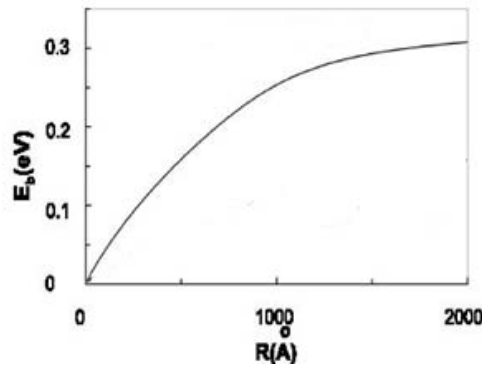
Pour  $R \leq R_c$ , la constance de  $\sigma^{\text{ch}} / e N_t$  implique, à partir de la relation (III.9.b), que la probabilité d'occupation,  $f$ , des niveaux  $E_t$  est quasiment nulle.

Pour les grandes valeurs de  $R$  et aux très faibles densités  $N_t$ ,  $\sigma^{\text{ch}} / e N_t$  tend vers zéro, ce qui implique une valeur de  $f$  maximale, égale à  $1/2$ .

L'allure du graphe (III.13) suggère donc que le centre de recombinaison des porteurs ne devient actif qu' à partir d'une taille critique,  $R_c$ , des précipités, probablement à cause de la faiblesse, toute relative, de la concentration des porteurs de charge qui ne font pas varier, de manière sensible, le taux d'occupation de ces dits centres.

Dans une seconde étape, l'effet du remplissage se fait sentir, particulièrement pour les faibles densités d'états,  $N_t$ , jusqu' à saturation.

Ces différentes situations trouvent leur confirmation dans la figure (III.14), qui caractérise l'évolution de la hauteur de barrière,  $E_b$ , en fonction de la taille  $R$  du précipité.



**Figure III.14.** Variation de la hauteur de barrière,  $E_b$ , en fonction de la taille,  $R$ , du précipité.  $\sigma = 2 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ,  $L_n = 50 \text{ (}\mu\text{m)}$ ,  $D_n = 14 \text{ (cm}^{-2}\text{)}$  et  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ .



Pour  $R$  faible, il existe un faible flux de porteurs en excès, ceci engendre une variation très modérée des quasi niveaux de Fermi, une recombinaison de porteurs négligeable et donc une probabilité d'occupation nulle ( $f = 0$ ).

Aux fortes valeurs de  $R$  et de  $N_t$  (courbe 1 de la figure III.12), la quantité  $\sigma^{ch} / e N_t$  reste quasi constante ; ceci est probablement dû au fait que  $E_b$  atteint une valeur asymptotique.

Pour les autres graphes,  $\sigma^{ch} / e N_t$  décroît d'abord et devient ensuite constante, renvoyant à une augmentation continue de la hauteur de barrière,  $E_b$ , donc de  $S_{eff}$  et donc de  $f$ , jusqu'à la valeur  $1/2$ .

Les variations de  $\sigma^{ch}$  avec la taille du précipité peuvent être exprimées par la relation empirique suivante :

$$\sigma^{ch}(R) = \sigma_{inf}^{ch} + \frac{A}{R^\alpha} \quad (\text{III.39})$$

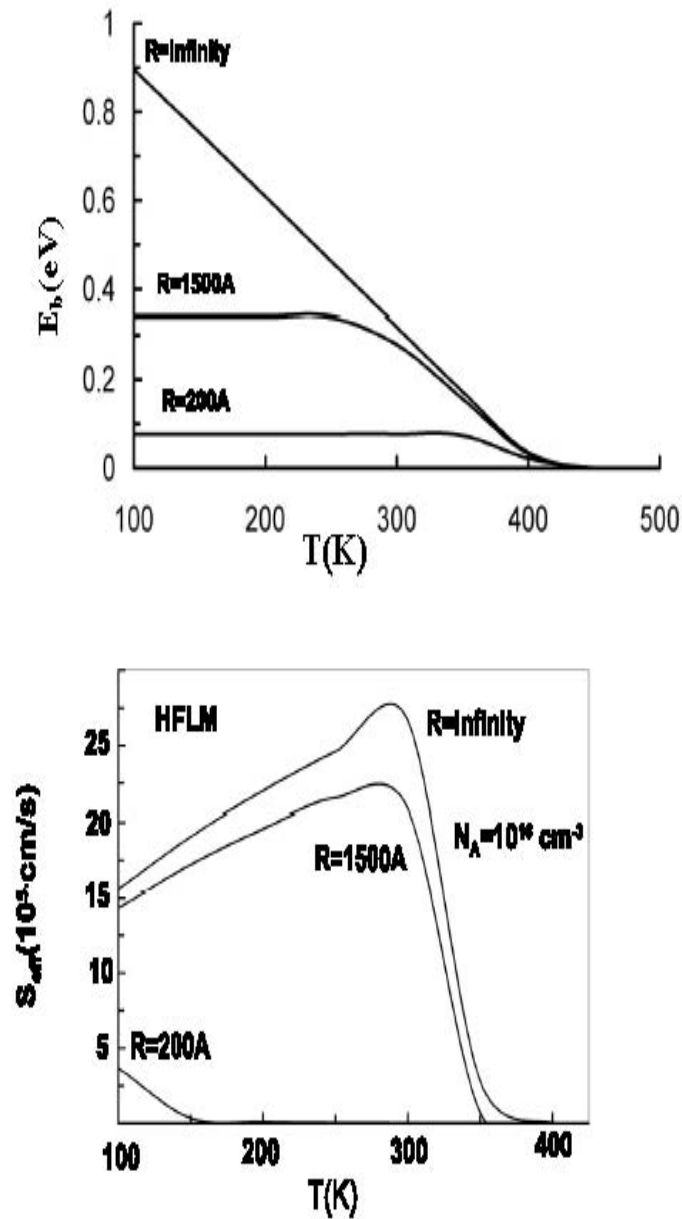
où  $\alpha$  dépend du dopage ; dans le modèle H.F.L.M, on l'a trouvé égal à 0.78 pour  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ .

### 3. Evolution de la hauteur de barrière de potentiel $E_b$ et de la vitesse effective de recombinaison $S_{eff}$ en fonction de la température $T$ .

Les variations de la hauteur de barrière  $E_b$  et de la vitesse effective de recombinaison  $S_{eff}$  en fonction de la température, pour tous les types de défauts ayant fait l'objet d'études (joints de grains, dislocations, précipités et défauts ponctuels) sont, jusqu'à ce jour, inexistantes dans la littérature.

Il était donc intéressant d'avoir des informations précises sur ce sujet, c'est l'objet du présent travail et ce, dans le cas du modèle (H. F. L. M).

Les figures (III.15. a, b) représentent l'évolution de  $E_b$  et  $S_{eff}$  en fonction de la température  $T$ , pour diverses valeurs de tailles de précipité  $R$ .



**Figure III.15.** Evolution de la hauteur de barrière  $E_b$  et de la vitesse effective de recombinaison  $S_{eff}$  avec la température  $T$ , pour trois tailles de précipité  $R$ .  $N_t = 8 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ ,  $\sigma = 2 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^2\text{)}$ ,  $L_n = 50 \text{ (\mu m)}$ , et  $N_a = 10^{16} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ .

Il apparaît que  $E_b$  reste constante à basse température puis diminue quand cette dernière augmente ; cette situation s'explique par le fait que la durée de vie des électrons augmente avec la température, impliquant une recombinaison importante, donc une hauteur de barrière plus élevée.

De plus, la probabilité d'occupation des niveaux profonds dans le gap du semiconducteur augmente avec la température ; on aura donc plus d'états occupés, donc moins de charges superficielles, ce qui fait diminuer la hauteur de barrière de potentiel  $E_b$  ; par conséquent,  $S_{eff}$  diminue.

La connaissance de l'évolution des paramètres de recombinaison à savoir, la hauteur de barrière,  $E_b$ , la vitesse de recombinaison,  $S_{eff}$ , en fonction de l'excitation extérieure et ce, sous l'influence de plusieurs paramètres tels que la taille du précipité  $R$ , les concentrations de défauts  $N_t$ , ou encore la température  $T$ , rend le défaut considéré (précipité sphérique) bien identifié.

Par ailleurs, l'étude bibliographique montre que la hauteur de barrière,  $E_b$ , et la vitesse de recombinaison,  $S_{eff}$ , ne sont pas obtenues directement des expériences, mais sont déduites des mesures de contraste (EBIC) et de cathodoluminescence (CL).

Pour ce qui nous concerne, la problématique sera abordée de manière opposée à ce qui est rapporté jusqu'à présent par la littérature ; en effet, forts des résultats obtenus au chapitre III et relatifs à la connaissance de l'évolution de quelques paramètres caractéristiques de la recombinaison (entre autres  $E_b$  et  $S_{eff}$ ) et sachant que le contraste EBIC est intimement lié à ces paramètres, nous avons privilégié une démarche qui intègre tous ces aspects dans son calcul. C'est l'objet de la deuxième partie de notre travail.

Nous commencerons par présenter le mode EBIC et les différents problèmes physiques y afférant, tels que les mécanismes associés à l'interaction électron-matière, avant de passer à l'étude du contraste EBIC proprement dit.

# **Le mode EBIC**

## **IV. Introduction**

Le développement technologique de la microélectronique, allié aux possibilités nouvelles d'utilisation de nanostructures, rend les composants de plus en plus sensibles à la présence de défauts de structure et aux hétérogénéités de défauts ponctuels et d'impuretés. La plupart des techniques expérimentales classiques (DLTS, absorption optique ...) ont été développées afin d'étudier les propriétés physiques des défauts présents. Elles sont macroscopiques car elles ne donnent qu'une description globale des matériaux. Elles sont fréquemment utilisées dans la caractérisation " en routine " de la qualité des matériaux, mais elles ne peuvent, à elles seules, résoudre les problèmes de « science des matériaux », qui existent à l'échelle des composants actuels.

Ceci explique pourquoi il y a eu, ces dernières années, une utilisation accrue des sondes locales de lumière et d'électrons. Ces techniques de caractérisation des propriétés locales des semi-conducteurs, principalement les méthodes LBIC ( Light Beam Induced Current), EBIC ( Electron Beam Induced Current ), PL (Photoluminescence), CL ( Cathodoluminescence ), ont vu de nombreux progrès accomplis dans la compréhension des interactions électron-matière et des mécanismes de transport et de recombinaison des porteurs en excès ; en particulier, elles permettent une évaluation quantitative des propriétés locales, comme celles associées à la présence de défauts ( dislocations, joints de grains,...).

## IV.2. Présentation du mode EBIC

L'**EBIC** (**E**lectron **B**eam **I**nduced **C**urrent) est l'une des techniques d'étude des propriétés électriques de recombinaison de porteurs dans les semi-conducteurs.

Elle consiste à induire dans un échantillon un courant qui module la brillance de l'écran d'observation dont le balayage s'effectue en synchronisme avec celui du faisceau d'électrons.

Nous allons dans un premier temps, exposer brièvement son principe de fonctionnement ainsi que les phénomènes physiques qui apparaissent lors de l'application de cette technique et décrire dans un second temps l'approche expérimentale qui lui est associée.

### IV.2.1. Principe

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons primaires se traduit par l'ionisation des atomes du solide, créant ainsi un grand nombre de paires électron - trou dans un volume dit de génération dont les dimensions sont fonction de la tension d'accélération.

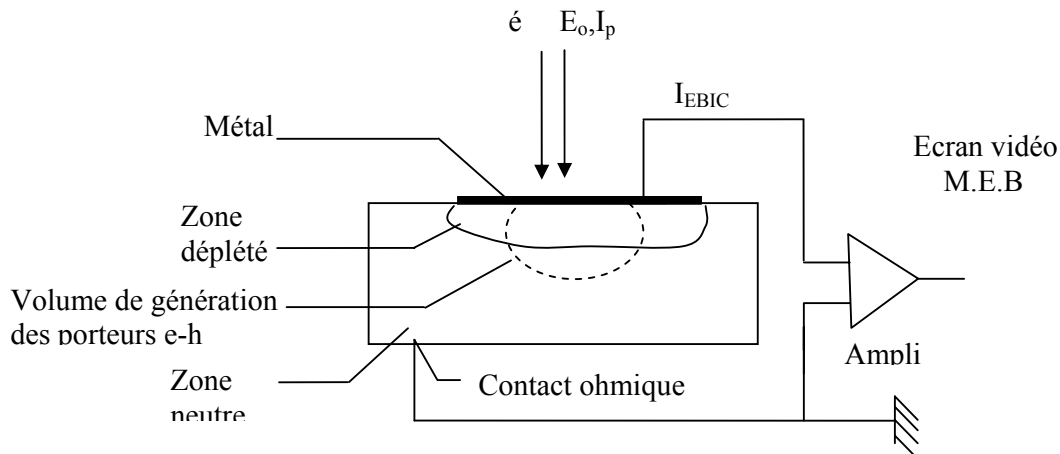
Ces porteurs en excès, dont les densités sont respectivement  $\Delta p(\vec{r})$  et  $\Delta n(\vec{r})$  où  $\vec{r}$  est le vecteur position, sont soumis à un régime diffusionnel pur sous l'effet du gradient de leur concentration et à un régime d'entraînement sous l'effet du champ électrique  $\vec{E}$  dû au contact métal - semiconducteur.

Les porteurs composant ces paires diffusent dans toutes les directions et seuls ceux qui atteignent la zone de charge d'espace pourront contribuer au courant collecté ; cette région dont la profondeur est inversement proportionnelle à  $(N_d)^{1/2}$ ,  $N_d$  étant la concentration de dopants, est le siège d'une accélération des porteurs de charge minoritaires (trous dans le cas d'un semi-conducteur de type p) et d'une répulsion des porteurs de charges majoritaires.

### IV.2.2. Montage expérimental

L'observation en mode EBIC est l'une des techniques associées à la microscopie électronique à balayage (MEB) ; elle permet de former des images d'un échantillon en utilisant les variations du signal produit par interaction entre un faisceau d'électrons et les atomes d'un échantillon. Ce dernier peut être une diode Schottky ou encore une jonction de type n-p.

La figure (IV.1), schématise le montage expérimental et la géométrie utilisée.



**Figure. IV.1.** Illustration de la génération et de la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semi-conducteur de type n.

Pour fermer le circuit, un contact ohmique est réalisé au niveau de la face arrière de l'échantillon.

Les deux contacts, ohmique et Schottky, sont connectés à un amplificateur permettant la transformation du courant collecté par la jonction en tension, laquelle sert à moduler la tension du wehnelt de l'écran de visualisation du MEB [39].

L'amplificateur est de faible impédance d'entrée et de bande passante supérieure ou égale à 10 KHz, tandis que sa tension de sortie  $V_{out}$  est reliée au courant collecté par la relation :

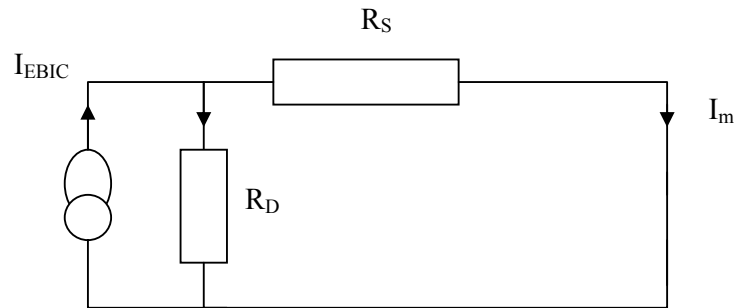
$$V_{out} = -G_a \cdot I_{EBIC}$$

où  $G_a$  est le gain utilisé et  $I_{EBIC}$  l'intensité du courant collecté. Le signe (-) est attribué au caractère inverseur de l'amplificateur.

Notons que les câbles de raccordement doivent être courts, pour limiter le bruit de fond.

L'échantillon, de caractère non idéal, est assimilé à une source de courant; ce dernier ainsi généré, se partage entre les deux résistances  $R_d$  et  $R_s$  ; elles sont dues

respectivement à la jonction de collection du courant EBIC, à l'échantillon lui-même et aux résistances du circuit extérieur utilisé comme détecteur, ainsi qu'aux contacts ohmiques, fig. (IV.2).



**Figure. IV.2.** Schéma du circuit équivalent de la mesure EBIC.

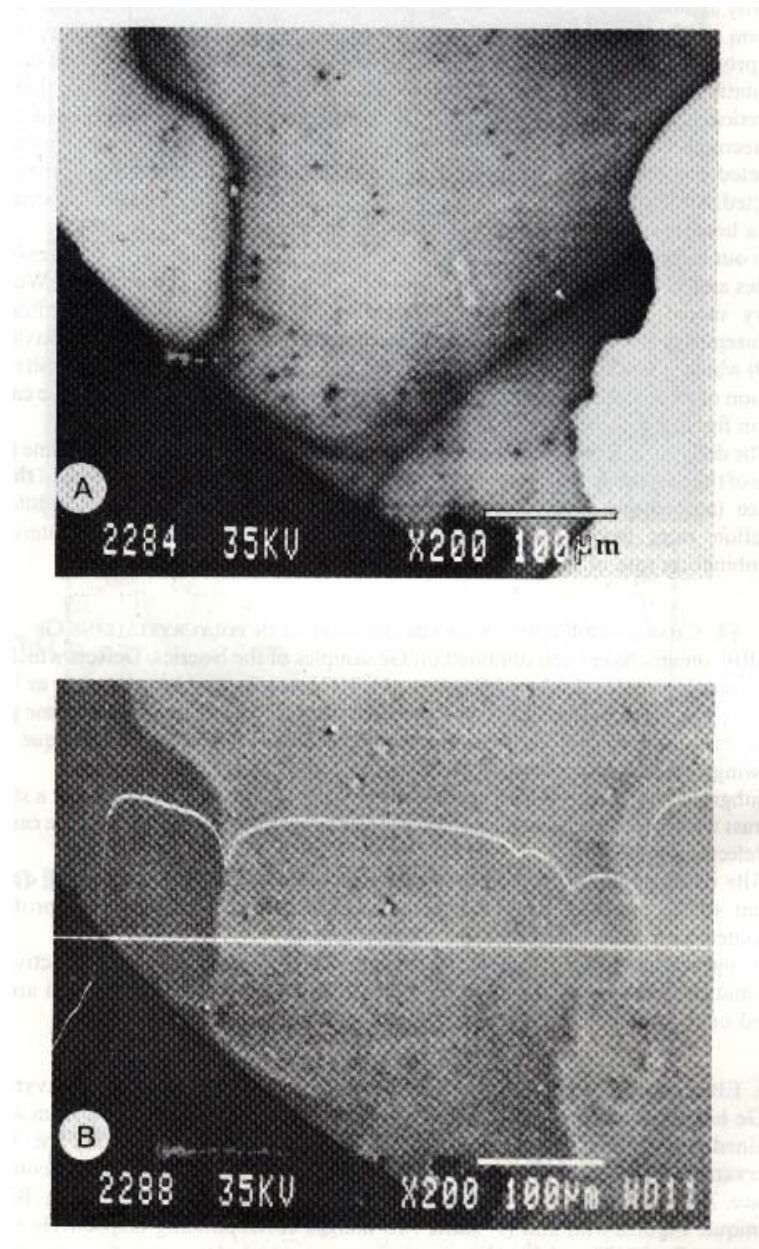
Notons que le courant mesuré  $I_m$  est égal au courant généré,  $I_{EBIC}$ , quand la résistance  $R_S$  est faible.

### IV.3. Applications du mode EBIC

#### IV.3.1. Applications qualitatives

Le mode EBIC a d'abord fait objet d'études qualitatives ; la synchronisation du balayage du faisceau incident et de celui du de l'écran de visualisation du MEB permet la formation d'une image qui est révélatrice de la répartition d'impuretés, de précipités, de défauts (dislocations, joints de grains,...) [40-55], ces derniers agissant comme des centres de recombinaison de porteurs; ceci se traduit par l'obtention d'une image parsemée de zones sombres (caractéristiques de défauts électriquement actifs) sur fond clair et entraînent une diminution locale du courant EBIC.

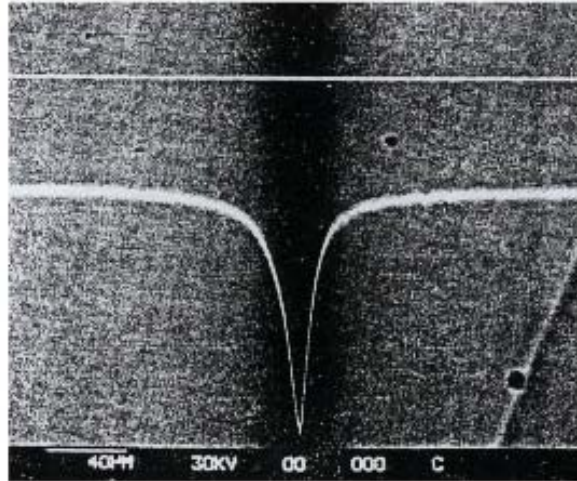
Les figures (IV.3) (a) et b) caractérisent cette situation tandis que la figure (IV-4) schématise l'évolution de la courbe d'intensité EBIC au voisinage d'un défaut.



**Figure.IV.3** [56] (a): Image EBIC pour un sous-joint de grains (Ge).

(b): Image en électron secondaire de la même surface.





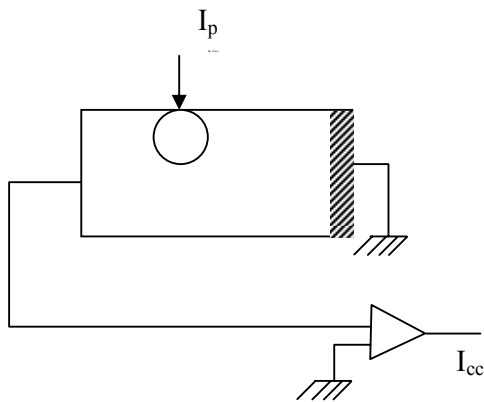
**Figure. VI.4.** Courbe d'intensité EBIC lorsque le faisceau d'électrons balaye une ligne à travers un défaut électriquement actif.

## IV.3.2. Application quantitative

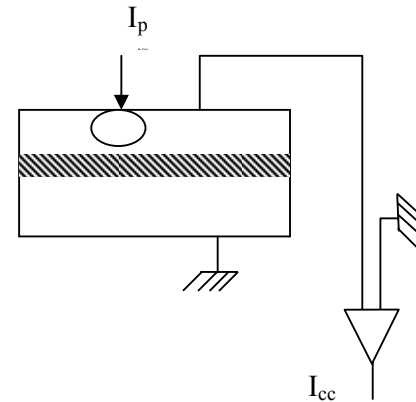
### IV .3.2.1.Introduction

L'intérêt majeur d'une étude quantitative de courant EBIC réside dans la détermination directe des paramètres physique tels que le niveau de dopage, la vitesse de recombinaison superficielle aux niveaux de joints de grains, la longueur de diffusion, ...

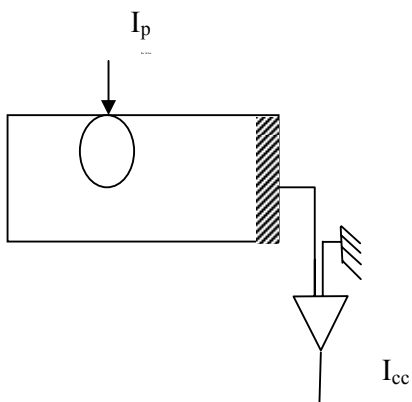
Il est à noter que l'analyse quantitative des mesures du courant EBIC dépend fortement de la géométrie du problème auquel on s'intéresse. La figure (IV-5) donne un aperçu sur les différentes variantes étudiées: faisceau perpendiculaire à la jonction, (Figure. (IV.5.b) et (Figure. (IV.5.d)) ; parallèle à la jonction, (Figure. (IV.5.a) et Figure. (IV.5.c)).



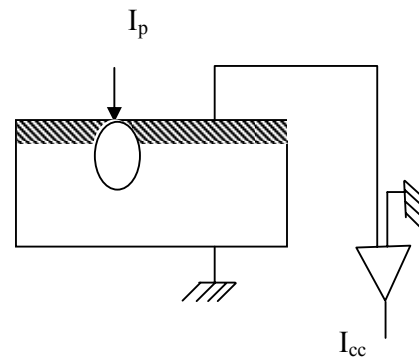
**Fig. (IV.5.a)**  
Jonction p-n parallèle au  
faisceau incident  $I_p$



**Fig. (IV.5.b)**  
Jonction p-n perpendiculaire  
au faisceau incident  $I_p$



**Fig. (IV-5.c)**  
Géométrie équivalente du  
schéma (a) avec une diode  
Schottky



**Fig. (IV.5.d)**  
Géométrie équivalente du  
schéma (b) avec une diode  
Schottky

**Figure. IV.5.** [57] Schéma illustrant les différentes géométries  
utilisées dans la technique EBIC.

Pour accéder à des informations quantitatives, la procédure adoptée est en général plus lourde que l'obtention de la mesure elle-même; on donnera dans le paragraphe qui suit un bref aperçu sur les principales approches pour chaque géométrie en utilisant un paramètre critique pour la caractérisation des matériaux qui est la longueur de diffusion.

#### **IV.3.2.2. Détermination de la longueur de diffusion**

##### **a- Cas d'une jonction parallèle à la surface de l'échantillon, [58], [59].**

Les figures (IV.5.b) et (IV.5.d) illustrent le cas de jonctions p-n et de Schottky qui sont parallèles à la surface de l'échantillon.

La détermination de la longueur de diffusion,  $L$ , se produit en ajustant les courbes théoriques et expérimentales de l'efficacité de collecte. Notons que pour des raisons pratiques, la structure représentée par la figure (IV.5.d) (diode de Schottky) est préférable à celle matérialisée par la figure (IV.5.b) (jonction p-n)

La diode de Schottky, aujourd'hui largement utilisée, a été proposée pour la première fois par Kamm [59] (1976) et utilisée par Wu-Wittry [59] (1978).

##### **b- Cas d'une jonction normale à la surface de l'échantillon**

Les figures (IV.5.a) et (IV.5c) illustrent le cas d'une jonction p - n et d'une diode de Schottky qui sont perpendiculaires à la surface de l'échantillon.

Ces structures, ont fait l'objet de nombreuses théoriques pour déterminer une relation traduisant l'évolution du courant EBIC recueilli en fonction du parcours électronique.

On peut citer quelques contributions à ce sujet, résumées comme suit :

<b>Auteur</b>	<b>Contribution</b>
Van Roosbroeck [60]	Donne un calcul analytique de profil courant - parcours pour une source ponctuelle de génération située en surface.
Bresse et Laffeuile [61]	Considèrent une source située à une certaine profondeur de la surface de l'échantillon mais seulement pour des vitesses de recombinaisons en surface nulles ou infinies.
Berz et Kuiken [62]	Leur travail est une généralisation des résultats de Bresse et Laffeuile.
Donolato [63]	A développé des calculs pour l'équation du courant en fonction du parcours, en utilisant des fonctions mathématiques élémentaires.

L'analyse des nombreuses contributions relatives au mode EBIC, tant du point de vue qualitatif que quantitatif, permet d'aboutir aux conclusions suivantes :

- L'exploitation des informations contenues dans le mode EBIC nécessite une modélisation aussi réaliste que possible pour une meilleure fiabilité dans la détermination des paramètres mesurés.
- Pour la modélisation la plus réaliste possible, une compréhension des processus physiques est indispensable (processus de recombinaison, interaction électron-semiconducteur, ...).

C'est pour cela que le paragraphe suivant sera consacré à cette partie.

## IV.4. Interaction électron - matière

La description des phénomènes accompagnant la pénétration des électrons dans un solide fait l'objet de plusieurs études, les premières remontant au dix-neuvième siècle (Lenard en 1895).

Nous nous proposons, dans ce qui suit, de discuter des mécanismes d'interaction électron - matière qui se présentent sous la forme de deux types : interactions élastique et inélastique.

### IV.4.1.Types d'interaction

#### a- Interaction élastique

Elle provient de l'interaction associée à l'action intense du champ coulombien des noyaux ; par analogie aux chocs élastiques en mécanique classique, on aboutit à une expression de l'énergie transférée à l'atome sous la forme [64]:

$$\frac{\Delta E}{E_0} = 4 \frac{m}{M} \sin^2(2\theta) \quad (\text{IV.1})$$

avec:

$m$ , la masse de l'électron incident

$M$ , la masse de l'atome

$2\theta$ , l'angle de diffusion de l'électron incident ; il est proportionnel à  $\left(\frac{Z}{E_0}\right)^2$ ,  $Z$  étant le numéro atomique. Il dépend donc du matériau irradié, ainsi que de l'énergie du faisceau incident,  $E_0$ .

#### b- Interaction inélastique

Elle correspond à une interaction de type électron -électron au cours de laquelle il y a perte d'énergie. L'énergie transférée,  $\Delta E$ , est de l'ordre de quelques eV et se retrouve après excitation sous deux formes, selon que les électrons impliqués proviennent des niveaux de cœur ou de valence.

Dans le premier cas, la transition d'un électron d'une couche supérieure vers le niveau ionisé provoque l'émission d'un photon, elle peut également servir à éjecter un autre électron d'une couche supérieure, c'est le processus Auger.

Au cours des collisions avec les électrons de valence, l'énergie peut être cédée à l'atome avec libération d'électrons, ceux qui ont une énergie voisine de celle du faisceau

primaire sont appelées électrons «rétrodiffusées » tandis que les électrons «secondaires» sont ceux qui ont de plus faibles énergies cinétiques ( $\leq 50$  eV), ce qui ne permet que la collection de ceux qui sont près de la surface.

Signalons enfin, qu'à haute énergie, une émission continue de rayons X se manifeste pour matérialiser l'interaction avec le champ coulombien du matériau, ce qui induit une perte d'énergie significative et provoque un freinage brutal et continu des électrons par les forces électromagnétiques qui proviennent essentiellement des noyaux.

De nombreuses études ont été effectuées pour contribuer à la compréhension des phénomènes physiques intervenant dans ces processus, telles que la génération des paires électrons-trous, la dissipation d'énergie, la profondeur de pénétration des électrons, ... ; dans ce qui suit, nous allons essayer de présenter quelques résultats essentiels relatifs à ces différents sujets.

## IV.4.2. Parcours électronique et fonction de dissipation d'énergie

### a -Parcours électronique

Le parcours électronique  $R$  d'un électron dans un matériau est déterminé en fonction de l'énergie  $E_0$  du faisceau primaire sous la forme générale [65]:

$$\rho R = K E_0^\alpha \quad (\text{IV.2})$$

où  $\rho$  est la densité du matériau (en  $\text{g/cm}^3$ ) et  $K$  est une constante, tandis que  $\alpha$  varie entre 1,2 et 1,8 et dépend principalement de  $E_0$ , du numéro atomique  $Z$  et de la définition de  $R$ . De manière générale, la distance parcourue par un électron dans un solide est définie par :

$$R_B(\text{cm}) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/dz} \quad (\text{IV.3})$$

$dE/dz$  est appelé pouvoir d'arrêt et a fait objet de plusieurs études [66] dont une des premières a conduit à l'expression suivante [67]:

$$dE/dz = \frac{2\pi e^4 N Z \rho}{E_0 A} \log\left(1,66 \frac{E_0}{j}\right) \quad (\text{IV.4})$$

où  $N$  est le nombre d'Avogadro,  $Z$  le numéro atomique,  $\rho$  La masse volumique de la cible,  $A$  sa masse atomique,  $E_0$  l'énergie du faisceau incident,  $z$  la distance parcourue par l'électron en ignorant les déviations causés par la diffusion élastique et  $J$  le potentiel moyen d'ionisation, il caractérise l'ensemble des interactions inélastiques.

On peut citer l'expression due à Berger et Seltzer (1964) [66] qui s'écrit sous la forme :

$$J(\text{keV}) = (9,76Z + 58,5Z^{-0,19})10^{-3} \quad (\text{IV.5})$$

Notons que l'expression (IV- 4) peut être généralisée à beaucoup de matériaux, cela est rendu possible grâce à sa dépendance avec le numéro atomique,  $Z$  ; de plus, le rapport  $Z/A$  est quasiment constant pour beaucoup d'éléments ; ainsi, Kyser cité par Wu et Wittry (1978) [59] propose :

$$\rho R_B(\text{g/cm}^2) = 2,56 \cdot 10^{-3} \left( \frac{E_0}{30} \right)^{1,68} \quad (\text{IV.6})$$

$E_0$  est exprimé en keV.

Par ailleurs, Gruen [68] suggère une loi de dépendance du parcours des électrons dans l'air en fonction de l'énergie primaire de la forme :

$$R_G(\text{g/cm}^2) = 4,5710^{-6} E_0^{1,75} \quad (\text{IV.7})$$

D'autre part, Everhart et Hoff (1971) [69] proposent une expression du parcours de **Bethe**,  $R_B$ , obtenue dans le cadre d'une étude expérimentale effectuée sur le silicium ; ils la notent sous la forme:

$$R_B(\text{cm}) = 1/\rho \cdot c \cdot A \cdot J^2 \cdot (a E_0/J)^b / Z \quad (\text{IV.8})$$

$\rho$  et  $A$  sont respectivement la densité et la masse atomique du matériau considéré,  $a$  est une constante égale à 1,1668, tandis que les constantes  $c$  et  $b$  sont consignées sur le tableau (IV-1) :

$aE_0/I$	$c$	$b$
5-50	$8,9 \cdot 10^{-12}$	1,51
10-100	$6,4 \cdot 10^{-12}$	1,62
50-500	$3,2 \cdot 10^{-12}$	1,78

Tableau: (IV-1)  
Coefficients permettant la connaissance de  $R_B$

Il s'ensuit que l'équation (VI.8) appliqué au silicium s'écrit :

$$R(\text{cm}) = 1/\rho_{\text{Si}} 4,57 \cdot 10^{-6} E_0^{1,75} \quad (\text{IV.9})$$

Elle admet des valeurs supérieures de 20 % à celles que l'on trouve en utilisant la relation de Gruen.

En 1972, Kanaya et Okayama [70] proposent une loi de ralentissement continu pour le parcours électronique sous la forme :

$$\frac{dE}{dZ} = 8,388 \cdot 10^2 \lambda_s a_A^{1/3} N_v Z E^{-2/3} \quad (\text{IV.10})$$

où  $\lambda_s$  est un paramètre empirique égal à 0,182,  $N_v$  le nombre d'atomes par unité de volume et  $a_A$  le rayon atomique d'écrantage ( $a_A = 0,8853 a_H Z^{-1/3}$ ,  $a_H$  étant le rayon de Bohr).

Le parcours entier, obtenu par intégration de la relation (III-10) s'écrit sous la forme :

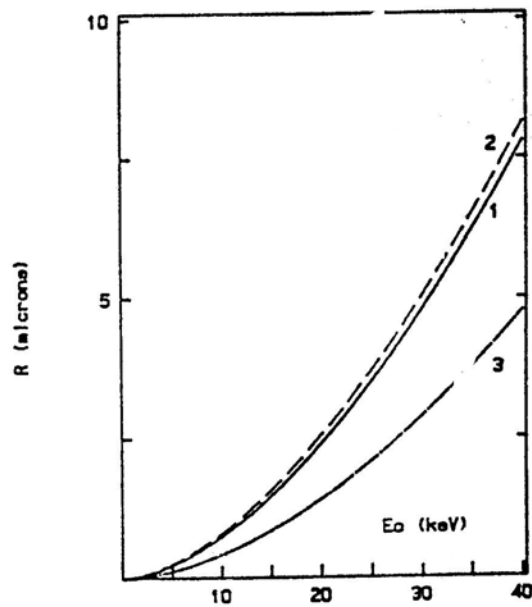
$$\rho R = 2,76 \cdot 10^{-6} (A/Z^{8/9}) E_0^{5/3} (\text{keV}) \quad (\text{IV.11})$$

Goldstein [71] a montré que les valeurs de parcours obtenues à partir du modèle de Kanaya et Okayama étaient en bon accord avec celles mesurées par lui et a conclu que le modèle pouvait être largement utilisé en pratique. Des calculs de détermination des trajectoires électroniques par la méthode de Monte-Carlo, effectués par Murata et al [72] et Matsukaya et al [73] confirment cette assertion.

La figure (IV-6) montre les courbes représentatives des différentes expressions du parcours électronique R en fonction de l'énergie du faisceau incident  $E_0$ .

Il apparaît que le graphe caractéristique de l'équation d'Everhart et Hoff [69] s'écarte des autres, à cause du fait que l'expression qu'ils proposent n'est valable que pour les matériaux à faibles numéros atomiques ( $Z < 15$ ).





**Figure .IV.6.** Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie du faisceau incident 1-Kyser (1972) ; 2-Kanaya et Okayama (1972) ; 3- Everhart et Hoff(1971).

### b- Fonction de dissipation d'énergie

De manière générale, la perte d'énergie est définie comme étant la fraction d'énergie perdue par unité de profondeur ; elle est matérialisée par une fonction dite de dissipation d'énergie, notée  $\phi(z/r)$  et qu'on définit comme :

$$\phi(z/R) = \frac{d(dE_A/dE_0)}{d(dz/R)} \quad (\text{IV.12})$$

$E_A$  est l'énergie absorbée à la fin du parcours normalisé et  $u$  un paramètre sans dimension, égal à  $u = \frac{\rho z}{R}$ ,  $\rho$  étant la densité du semi-conducteur considéré ( $\text{g/cm}^3$ ),  $z$  la profondeur de pénétration (cm) et  $R$  le parcours électronique ( $\text{g/cm}^2$ ).

Plusieurs modèles ont été élaborés pour la détermination de la fonction de dissipation d'énergie.

Kanaya et Okayama (1972) [70] ont proposé d'exprimer la fonction de dissipation  $\phi(u)$  sous la forme suivante :

$$\phi(u) = \frac{1}{(1-u)^{2/5}} \left( \frac{\gamma}{1-u} + 3/5 \right) \exp\left(\frac{-\gamma u}{1-u}\right) + 2,28 \frac{E_B}{E_0} \frac{\gamma}{1-u} \left[ 1/2^{5/6} - (1-z)^{5/6} \right] \exp\left(\frac{-1,9\gamma u}{1-u}\right) \quad (\text{IV.13})$$

où  $\gamma = 0,187z^{2/3}$

Par ailleurs, Everhart et Hoff (1971) [69] ont déterminé des profils de dissipation d'énergie à partir des mesures de conductivité sur des couches de SiO<sub>2</sub> et ont trouvé l'expression d'un polynôme normalisé, donné par :

$$\lambda(u) = 0,60 + 6,21u - 12,40u^2 + 5,69u^3 \quad \text{pour } 0 \leq u \leq 1,1R_G \quad (\text{IV.14})$$

Il faut signaler que  $\lambda(u)$  n'est valable que dans des domaines d'énergie bien limités ( $5\text{keV} \leq E_0 \leq 25\text{keV}$ ) et de numéro atomique ( $10 \leq Z \leq 15$ ) ; de plus,  $\lambda(u)$  s'annule pour  $u=1,1R_G$ .

$\lambda(u)$  peut être reliée à la fonction de dissipation  $\phi(u)$  par :

$$\phi(u) = (1-f)\lambda(u) \quad (\text{IV.15})$$

$f$  est la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion ; elle est définie par :

$$f = \eta_B E_B / E_0 \quad (\text{IV.16})$$

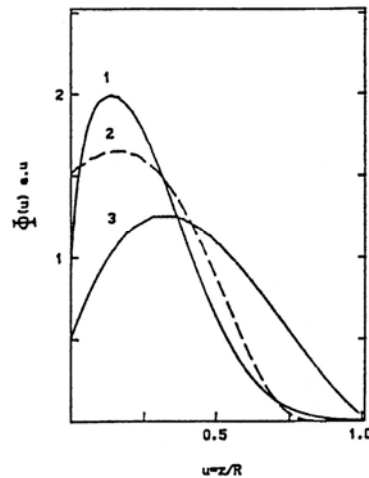
$\eta_B$  est le coefficient de rétrodiffusion des électrons rétrodiffusés, d'énergie  $E_B$ . D'autre part, Wu et Wittry (1978) [59], pour caractériser la perte d'énergie, proposent une forme gaussienne modifiée ; elle est donnée par :

$$\Phi(u) = A \cdot \exp\left[-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \cdot \exp\left[-\left(\frac{bu}{u_0}\right)\right] \quad (\text{IV.17})$$

Notons que c'est à partir d'une étude de dépendance du signal de cathodoluminescence en fonction de l'énergie  $E_0$  du faisceau incident dans le GaAs que tous les paramètres qui interviennent dans l'expression (IV-18), ont été déterminées par Kyser et Wittry (1967) [74].

Les constantes A et B sont obtenues par la condition de normalisation de  $\Phi(u)$  et de la relation  $B/A = 0,4$ . D'autre part, les constantes,  $b$ ,  $\Delta u$  et  $u_0$  ont été trouvées égales à :  $b=4,0$  ;  $\Delta u = 0,35$  et  $u_0=0,125$ . La confirmation des valeurs obtenues a fait l'objet d'une étude d'émission de rayon X provenant d'une cible de cuivre, cité par Kyser (1972) [75] .

La figure (IV-7) compare les trois distributions exprimées par les relations (IV-6), (IV-8) et (IV-10), pour une cible de germanium (Ge) :



**Figure. IV.7.** Fonction de dissipation d'énergie.

1-**Kyser** (1972) ; 2- **Kanaya et Okayama** (1972) 3- **Everhart et Hoff** (1971)

### IV.4.3- Phénomène de génération de porteurs

#### a - Production de porteurs (électrons – trous).

La création de paires électrons-trous est l'un des processus inélastiques accompagnant la pénétration des électrons dans les semi-conducteurs. L'énergie moyenne caractérisant la création des paires est définie par le rapport :

$$Q = \frac{E_A}{\varepsilon_{e-h}} \quad (\text{IV.18})$$

où  $Q$  est le nombre de paires créées par électron incident et  $E_A$  l'énergie absorbée dans le semi-conducteur, elle est la somme de trois contributions [70] :

$$E_A = E_O - \eta_T E_T - \eta_B E_B \quad (\text{IV.19})$$

•  $E_B$  est l'énergie des électrons rétrodiffusés, ceux qui ne participent pas à la création de paires électrons- trous ; en utilisant l'expression de Sternglass [76],  $E_B$  est donnée sous la forme :

$$E_B = (0,45 + 2 \cdot 10^{-3}) E_0 \quad (\text{IV.20})$$

•  $\eta_T$  et  $\eta_B$  sont respectivement les fractions d'électrons transmis et rétrodiffusés ; ils ont fait l'objet de nombreux travaux [70].

•  $E_T$  est l'énergie effectivement transmise au matériau semiconducteur.

Quant à  $\varepsilon_{e-h}$ , c'est l'énergie moyenne caractérisant la création de paires é-h ; pour l'apprécier, Vanroosbroek [77] a proposé un modèle, dont le principe est le suivant : quand un électron du faisceau primaire interagit avec le matériau semiconducteur et génère des paires électrons – trous, qui à leur tour, provoquent la production de nouvelles paires, l'énergie initiale, déduite de celle qui a permis la formation de l'électron et du trou,  $E_G$  en l'occurrence, est distribuée de manière aléatoire entre les trois acteurs du modèle : le porteur de charge primaire, le trou et l'électron ; si l'un des trois possède une énergie supérieure à  $E_G$ , le processus de création de paires é-h se répètera car cela est favorable énergiquement. Ce modèle inclut également un mécanisme associé à la création de phonons.

Par ailleurs, Klein (1968) [78], [79], a développé un modèle phénoménologique et a abouti à une formulation de  $\varepsilon_{e-h}$  sous la forme :

$$\varepsilon_{e-h} = E_G + \langle E_R \rangle + \langle E_K \rangle \quad (\text{IV.21})$$

$E_G$  est l'énergie du gap et  $\langle E_R \rangle$  la perte d'énergie associée à la création de phonons optiques ; elle a été évaluée à  $r\hbar\omega$  où  $r$  est le nombre moyen de phonons optiques générés et  $\hbar\omega$  l'énergie associée à un phonon.

$\langle E_K \rangle$  est l'énergie cinétique résiduelle dissipée au cours du processus de thermalisation des porteurs générés. Klein (1968) a proposé la relation :

$$\langle E_K \rangle = \frac{9}{5} E_G \quad (\text{IV.22})$$

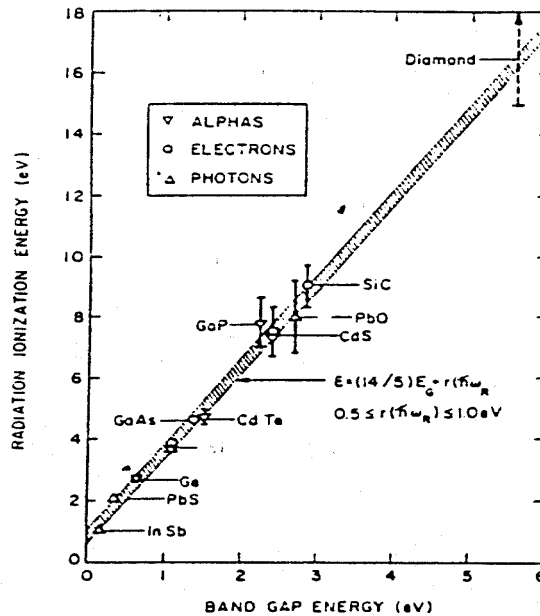
Finalement, on obtient :

$$\varepsilon_{e-h} = \frac{14}{5} E_G + r\hbar\omega \quad (\text{IV.23})$$

ou encore :

$$\varepsilon_{e-h} = 2,8E_G + \text{constante} \quad (\text{IV.24})$$

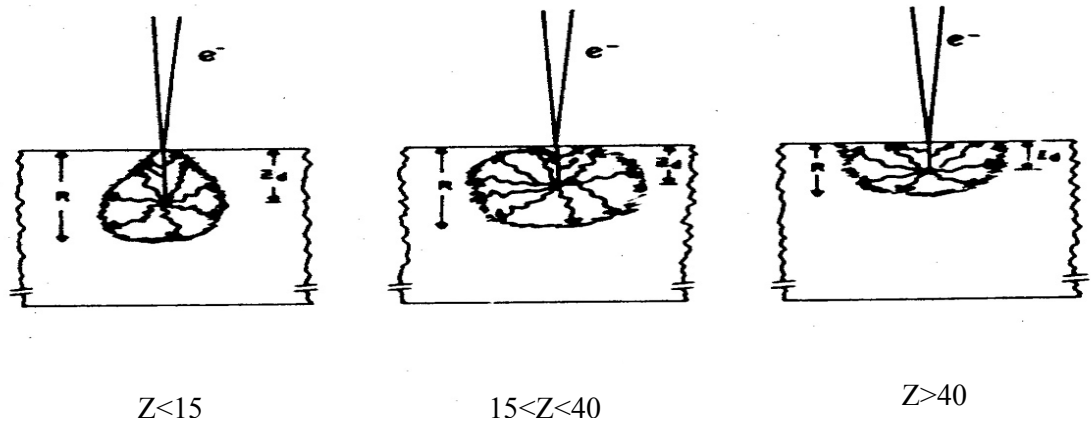
La constante est comprise entre 0 et 1 eV et dépend du matériau auquel on s'intéresse. La figure (IV.8) montre une dépendance quasi-linéaire de l'énergie de formation de paires électrons-trous en fonction de l'énergie du gap et ce, pour différents semi-conducteurs.



**Figure.IV.8.** Variation de l'énergie de formation de paires é-h en fonction de l'énergie du gap, pour différents semi-conducteurs d'après **Klein** (1968).

La création des paires é-h s'effectue tout au long du parcours électronique, dans un volume dit de génération, ce dernier ayant une géométrie qui dépend du numéro atomique  $Z$  : il a la forme d'une poire pour les faibles numéros atomiques ( $Z < 15$ ), d'une sphère pour ( $15 < Z < 40$ ) et d'une hémisphère pour les numéros atomiques élevés ( $Z > 40$ ).

La figure (IV-9) illustre ce propos :



**Figure. IV.9.** Illustration de l'effet du numéro atomique sur le volume de génération.

$Z$  : numéro atomique,  $R$  : profondeur de pénétration,  $Z_d$  : profondeur de diffusion.

Pour traduire d'une manière quantitative la réaction d'un semi-conducteur soumis à un bombardement par des électrons accélérés, cette dernière étant accompagnée par une perte d'énergie des électrons incidents qui sert à produire des paires é-h, il est nécessaire d'introduire un paramètre appelé fonction de génération ; ce dernier va faire l'objet d'une analyse dans le paragraphe suivant.

### b- La fonction de génération

La fonction de génération  $g(\vec{r})$  décrit la distribution de paires é-h créées dans le volume et correspond au nombre de paires créées par unité de temps et unité de volume ( $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ ), en un point  $r(x,y,z)$ .

La connaissance de  $g(\vec{r})$  est fondamentale pour apprécier quantitativement les propriétés du matériau ; cependant, elle est souvent source d'erreurs et de tracas mathématiques, c'est pour cela que beaucoup d'auteurs ont conjugué leur efforts pour se placer dans des conditions de simplification de  $g(\vec{r})$ . Par exemple, quand le faisceau d'électrons est normal à la surface de l'échantillon,  $g(\vec{r})$  possède une symétrie de révolution autour de la direction du faisceau et s'écrit :

$$g(r,z) \text{ où } r=(x^{1/2}+y^{1/2})^{1/2}$$

Cette approche est souvent utilisée pour la compréhension des résultats de contraste EBIC en présence de défauts.

Ainsi, pour étudier le contraste aux dislocations, plusieurs expressions de  $g(r, z, R)$  ont été proposées pour son analyse, parmi lesquelles celle de Donolato (1981) [80] qui a utilisé une expression semi empirique de **Possin**, cette dernière s'écrivant comme :

$$g_p(z, r, R) = \frac{A(z, R)}{2\pi\sigma^2(z, R)} \exp\left[-\frac{r^2}{2\sigma^2(z, R)}\right] \quad (\text{IV.23})$$

avec  $\sigma^2 = 0.36d^2 + 0.11z^3/R^3$

$d$  est le diamètre du faisceau électronique,  $R$  la profondeur de pénétration.

$A(z, r)$  est donnée par :

$$\int_0^{\infty} 2\pi g_p(z, r, R).dr = A(z, R) \quad (\text{IV.24})$$

On peut montrer [73] que  $A(z/R)$  s'écrit :

$$A(z, R) = \frac{G_0}{R} \lambda(z/R) \quad (\text{IV.25})$$

où  $\lambda(z, R)$  est une fonction universelle, indépendante de l'énergie du faisceau, mais a les caractéristiques d'une fonction de dissipation d'énergie.

Par ailleurs, B.Sieber [81] a emprunté à Akamatsu et al [82] une fonction de génération obtenue par la méthode de Monte Carlo et s'exprime par une triple exponentielle :

$$g(z, r, R) = B(r, z) \left(1 + 7,13 \frac{z}{r/z}\right) \left[ \begin{array}{l} \exp\left(-\frac{z^2}{2(R/3)^2}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2(R/3)^2}\right) + 3,4 \exp\left(-\frac{z^2}{2(R/6)^2}\right) \\ \exp\left(-\frac{r^2}{2(R/9)^2}\right) + 96 \exp\left(-\frac{z^2}{2(R/12)^2}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2(R/27)^2}\right) \end{array} \right] \quad (\text{IV.26})$$

Le terme  $B(r, z)$  est tel que :

$$\int_0^{\infty} g(z, r, R) 2\pi r dr = G_0 \quad (\text{IV.27})$$

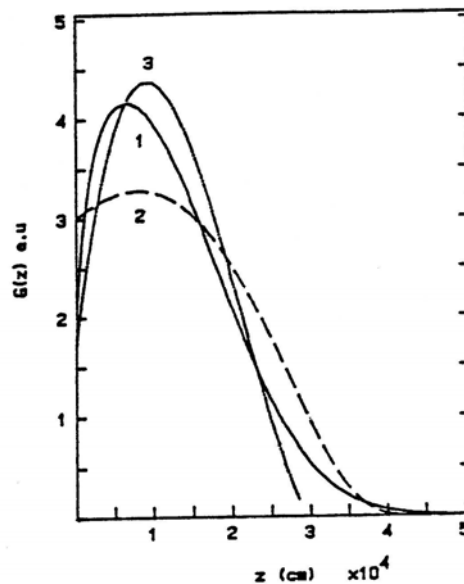
où  $G_0$  est le taux de génération totale et  $R$ , le parcours de **Gruen**. (Équation (VI-7)).

En pratique, la connaissance de la distribution latérale des paires dans le volume n'est pas nécessaire dans la majorité des cas où il y a symétrie de révolution autour de  $z$  (absence ou distribution homogène de défauts étendus) ; seule la projection de  $g(z,r,R)$  sur le plan suffit [83] :

$$g(z) = \int_0^{\infty} g_0(r,z,R) 2\pi r dr \quad (\text{IV.28})$$

La figure (IV.10) montre la variation de  $g(z)$  pour le Germanium (Ge), en fonction de la profondeur  $z$  et ce, pour une tension d'accélération donnée qui est de 30 KeV .

Les fonctions de dissipation d'énergie,  $\Phi(z, R)$ , les plus couramment utilisées ont été prises en considération.



**Figure. IV.10.** Fonction de génération,  $g(z)$ , dans le Germanium à  $E_0=30$  KeV. 1-Kyser (1972) ; Kanaya et Okayama (1972) ; 3- Everhart et Hoff (1971) .

On peut envisager, en théorie, le fait que si l'on continue à exciter le semi-conducteur, le nombre de porteurs ainsi créés devrait augmenter indéfiniment, ce qui est en contradiction avec la réalité.

En effet, un phénomène inverse à celui de la génération se produit simultanément : c'est le processus de recombinaison qui a fait l'objet chapitre II.



Après avoir apprécié l'évolution des paramètres de recombinaison associés au précipité sphérique (chapitre III) et après avoir présenté les différents processus physiques entrant en jeu dans cette technique, (chapitres II pour les phénomènes de recombinaison et IV pour le mode EBIC, ainsi que l'interaction électron-matière et ses conséquences ), il est maintenant opportun de proposer une contribution quantitative à l'étude du contraste EBIC, d'abord de manière générale et ensuite en présence d'un précipité sphérique. C'est l'objet du prochain chapitre.

# Etude du contraste EBIC

## V.1. Introduction

La présence de défauts dans un semiconducteur affecte localement la valeur du courant collecté à l'interface métal-semiconducteur, il en résulte un contraste qui est défini par la relation suivante :

$$C = \frac{\Delta I}{I_o} = \frac{-I + I_o}{I_o} = \frac{I^*}{I_o}$$

$I_o$  est le courant mesuré loin de défaut et  $I$ , le courant collecté.

Les études faites consistent à déterminer expérimentalement ce contraste et à le relier à des paramètres caractérisant son existence et sa grandeur, permettant ainsi d'établir des critères d'identification de ces défauts dans les semiconducteurs.

Le nombre de modèles théoriques associés à la tentative de compréhension de ce problème est impressionnant [1-5, 23-32].

Le contraste EBIC a été déterminé par plusieurs contributions sur divers types de défauts, à savoir les dislocations [1], les joints de grains [2], le défaut quelconque [4] ou sphérique [5].

Nous nous intéressons dans ce chapitre, tout d'abord à la présentation des principaux modèles historiques qui ont servi plus spécifiquement à la formalisation de notre travail.

Il s'agit du modèle de Donolato pour un défaut quelconque [4], de celui de R.J.Tarento et al pour la dislocation [1] et enfin, celui de N.Tabet pour un défaut sphérique [5].

## V. 2. Modèles de contraste EBIC

### V.2.1. Modèle de Donolato (78/79) pour un défaut quelconque

Donolato [4] a analysé le contraste d'un défaut de forme arbitraire ; dans ce modèle, le défaut est décrit comme étant une région au sein de laquelle le temps de vie de porteurs

minoritaires est différent de celui associé au semi-conducteur « sain », tandis que les coefficients de diffusion y sont supposés identiques.

Il suppose de plus une vitesse de recombinaison en surface infinie, pour un semi-conducteur homogène et semi-infini ; la présence de la zone déserte associée au contact Schottky a été également négligée.

La figure (V.1) illustre la géométrie décrite :

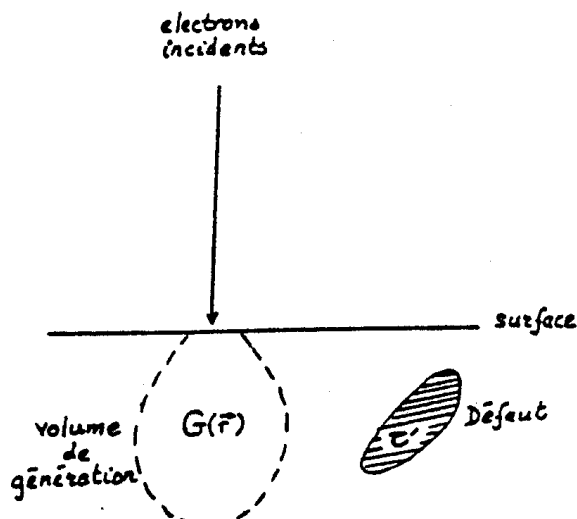


Figure. V.1. Génération de porteurs en présence d'un défaut.

L'équation de continuité devient alors :

$$D^2 \Delta p(\vec{r}) - \frac{\Delta p}{L_p^2} = -\frac{1}{D_p} \cdot g(\vec{r}) + \gamma(\vec{r}) e(\vec{r}) \Delta p(\vec{r}) \quad (\text{V.1})$$

où

$$e(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } r \in \text{défaut} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{V.2})$$

La densité  $\Delta p(\vec{r})$  est obtenue par la méthode des fonctions de **Green**, sous la forme :

$$\Delta p(\vec{r}) = \frac{1}{D_p} \int g(\vec{r}') \cdot G(\vec{r}, \vec{r}') dV - \int_{\Omega} \gamma(\vec{r}') \Delta p(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') dV \quad (\text{V.3})$$

V est le volume du cristal considéré,  $\Omega$  celui occupé par le défaut.

$G(\vec{r}, \vec{r}')$  est la fonction de **Green**, c'est à dire la contribution à  $\Delta p(\vec{r})$  d'une source ponctuelle situé au point  $r'(x', y', z')$  ; elle peut être décrite en utilisant la méthode des images sous la forme :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{L_p}\right)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}''|}{L_p}\right)}{|\vec{r} - \vec{r}''|} \right] \quad (\text{V.4})$$

$\vec{r}''$  est le point image du point source  $\vec{r}'$  par rapport au plan de la surface ;  $\gamma(\vec{r})$  est appelée « Force du défaut », elle est donnée par la relation :

$$\gamma(\vec{r}) = \frac{1}{D} \left( \frac{1}{\tau(\vec{r}')} - \frac{1}{\tau} \right) = \frac{1}{L^2} - \frac{1}{L'^2} \quad (\text{V.5})$$

$L$  et  $L'$  sont respectivement les longueurs de diffusion à l'intérieur et à l'extérieur du défaut.

La distribution  $\Delta p(\vec{r})$ , suite à l'adoption d'une procédure itérative, s'écrit :

$$\Delta p(\vec{r}) = \Delta p_0(\vec{r}') - \int_V \gamma(\vec{r}') \Delta p_0(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') dV \quad (\text{V.6})$$

où  $\Delta p_0(\vec{r})$  est la densité de porteurs de charge en absence de défauts ; c'est la première itération (Approximation de Born).

Donolato (78/79) montre que le contraste s'écrit sous la forme intégrale suivante :

$$C = \frac{\Delta I}{I_0} = \frac{I^* - I_0}{I_0} = D_p \frac{\int_V \gamma(\vec{r}') \Delta p_0(\vec{r}') e^{-z'/L_p} dV}{\int_V e^{-z'/L_p} g(\vec{r}') dr} \quad (\text{V.7})$$

où  $I_0$  est le courant collecté en absence de défauts, tandis que  $I^*$  est le courant perdu par recombinaison à l'intérieur du défaut.

L'analyse des résultats obtenus par Donolato laisse penser que les images de contraste obtenues ne sont pas limitées par un processus de diffusion des porteurs, mais sont principalement liées au volume de génération.

**Pour un défaut ponctuel :**

Partant de son formalisme général, Donolato [4] écrit la force du défaut sous la forme :

$$\gamma(\vec{r}) = \gamma \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (\text{V.8})$$

où  $\delta$  a la dimension d'une longueur.

Le défaut pouvant être actif, de symétrie sphérique avec une génération uniforme, Donolato écrit le contraste sous la forme suivante :

$$C(x, R) = \frac{\gamma}{4\pi} \exp[k(R_s - a)] F \quad (\text{V.9})$$

où F est un facteur qui vaut :

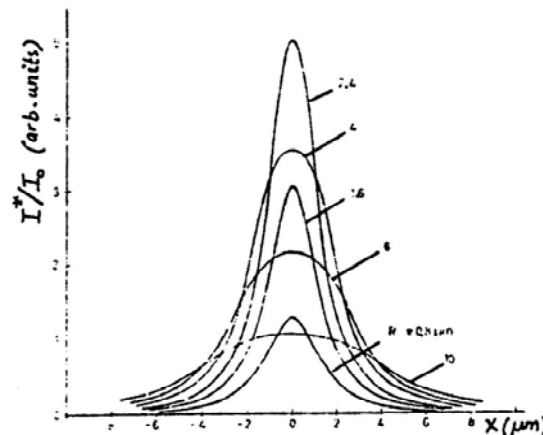
$$\begin{aligned} \frac{1}{d} \exp(-kd) - \frac{1}{l} \exp(-kl) & \quad \text{si } d > R \\ \frac{k - (1 + kR_s) \left[ \exp(-kR_s) \right] \left( \frac{1}{d} \right) \sinh(kd)}{kR \cosh(kR_s) - \sinh(kR_s)} - \frac{\exp(-kl)}{l} & \quad \text{si } d < R \end{aligned} \quad (\text{V.10})$$

k, d et p sont respectivement égaux à :

$$k = \frac{1}{L}, d = \left[ x^2 + (R_s - a)^2 \right] \text{ et } l = \left[ x^2 + (R_s - a)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{V.11})$$

La figure (V-2) illustre le profil de contraste calculé pour différentes valeurs de profondeur de pénétration R.

Pour exprimer l'influence de la longueur de diffusion sur la qualité de l'image, Donolato a déterminé les variations de  $C(x=0, R)$  qui est représentative du contraste maximum ; on peut noter une situation de saturation pour des valeurs de  $L > 10 \mu m$ .



**Figure.V. 2.** Contraste EBIC théorique pour différents parcours électroniques pour un défaut ponctuel situé à une profondeur  $a = 2 (\mu m)$ ,  $L = 10 (\mu m)$ .

### V.2.2. Modèle de R.J. Tarento et Y. Marfaing pour un défaut linéaire

Dans les études de contraste EBIC en présence de joints de grains, Zook [84] a pu mettre en évidence une relation directe entre la vitesse de recombinaison,  $S_{eff}$ , qui n'est pas un paramètre déterminable par l'expérience et le contraste. Il n'a pas été possible de faire de même dans le cas du contraste EBIC en présence d'une dislocation, d'où la première approche de Tarento et al [1].

Les auteurs, dans ce modèle, ont émis les hypothèses suivantes :

1. La ligne de dislocation est perpendiculaire à la surface de collecte de la charge.
2. Le contraste EBIC est déterminé pour des conditions de faible injection.

En pratique, l'injection s'étend en dehors de la zone déserte, ce qui permet de résoudre l'équation de continuité en dehors du cylindre de Read.

Les conditions aux limites appropriées au problème peuvent être notées comme suit :

(1) : La concentration des porteurs de charges minoritaires est nulle à la surface de collecte :

$$\Delta n(r) \Big|_{z=0} = 0 \quad (\text{V.12})$$

(2) : Sur le cylindre de Read, la concentration des porteurs de charge minoritaires est reliée à la vitesse de recombinaison par l'équation (III.27).

De ce fait, de la fonction de Green, en coordonnées cylindriques, prend la forme suivante :

$$G(x, x') = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \int_0^\infty dK e^{im(\phi-\phi')} [\cos K(z-z') - \cos K(z+z')] g_m(k, p') \quad (\text{V.13})$$

La résolution de l'équation de continuité permet d'écrire la concentration des porteurs de charge minoritaires  $n(r)$  comme :

$$n(r) = \frac{1}{4\pi D_n} \int_V g(r) \left( \frac{1}{|r-r'|} - \frac{1}{|r-r''|} \right) dr' + \frac{1}{2\pi^2} \int_V g(r') dr' \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} B_m \int_0^\infty dK e^{im(\phi-\phi')} [\cos K(z+z')] K_m(\tilde{K}r) K_m(\tilde{K}r') \quad (\text{V.14})$$

où  $V$  est le volume de génération et  $r''$  l'image de  $r'$  par rapport à la surface.

R. J. Tarento et al [1] ont utilisé une fonction de génération  $g(r)$  de type Everhart et Hoff [69] et le parcours électronique de Gruen [68].

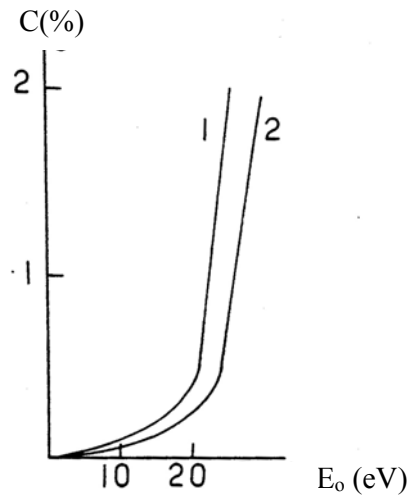
Ainsi, le contraste EBIC est défini comme suit :

$$C = \frac{I_\infty - I(d)}{I_\infty} \quad (\text{V.15})$$

où  $I_\infty$  est l'intensité du signal EBIC détecté loin du défaut et  $I(d)$  celle détecté à une distance  $d$ , de la dislocation.

Les variations du contraste EBIC en présence d'une dislocation normale à la surface, située à une distance  $d=0,8$  ( $\mu m$ ), sont caractérisées par deux quantités : la vitesse de recombinaison et le rayon du cylindre de Read.

Les résultats montrent une augmentation des valeurs du contraste, en bon accord avec les résultats expérimentaux [85].



**Figure. V. 3.** Evolution du contraste EBIC d'une ligne de dislocation en fonction de l'énergie du faisceau incident  $E_o$ .

- (1)  $S_{\text{eff}} = 10^6$  cm/s,  $R = 0.4\mu\text{m}$ .
- (2)  $S_{\text{eff}} = 10^5$  cm/s,  $R = 0.36\mu\text{m}$ .

### V.2.3. Modèle de N.Tabet (98) pour un défaut sphérique

Dans ce modèle, N.Tabet [5] a utilisé la méthode Monté Carlo pour étudier le contraste d'un défaut sphérique plongé dans un semi conducteur de type p (GaAs) en mode EBIC et s'affranchir de l'approximation de Born utilisée par Donolato [4] sur un défaut quelconque.

Le faisceau incident est pris juste au dessus du défaut considéré.

En considérant une sphère de génération uniforme (UGS) de rayon  $R$ , le contraste maximum est calculé pour deux cas différents :



### a. cas d'un défaut sphérique de petite taille

Dans ce cas, l'auteur utilise l'expression du contraste (8) de [86] et les relations (3.6) et (3.8) de [87] ; ainsi, il trouve :

$$C_{\max} = \Gamma D \left\{ \exp\left(-\frac{a-R}{L_B}\right) \right\} \left\{ \frac{\exp\left(-\frac{a-R}{L_B}\right)}{a-R} - \frac{\exp\left(-\frac{a+R}{L_B}\right)}{a+R} \right\} \quad (\text{V.16})$$

où  $a$  est la position du défaut sphérique par rapport à la surface.

Le coefficient  $\Gamma$  est donné par

$$\Gamma = \frac{\gamma_p}{4 \pi D^2 \left(1 + \frac{\gamma_p}{L_B}\right)} \quad (\text{V.17})$$

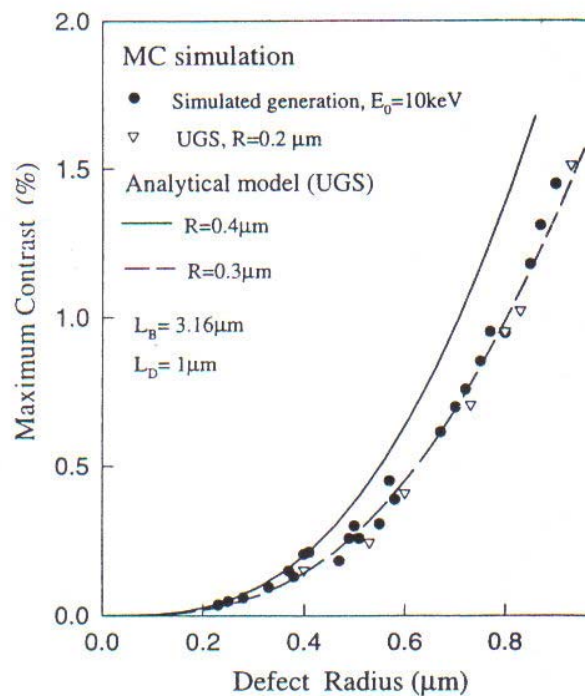
tandis que  $\delta_p$  est la force associée au défaut, elle donnée par :

$$\gamma_p = \left( \frac{1}{\tau_D} - \frac{1}{\tau_B} \right) \frac{4 \pi}{3} r_D^3 \quad (\text{V.18})$$

Le coefficient  $G$  est exprimé comme suit :

$$G = \frac{1}{4 \pi} \left\{ \frac{3}{2 r_D} - \frac{\exp\left(-\frac{2a}{L_B}\right)}{2a} \right\} \quad (\text{V.19})$$

La figure (V.4), montre l'évolution de  $C_{\max}$  en fonction de la taille  $R$ .



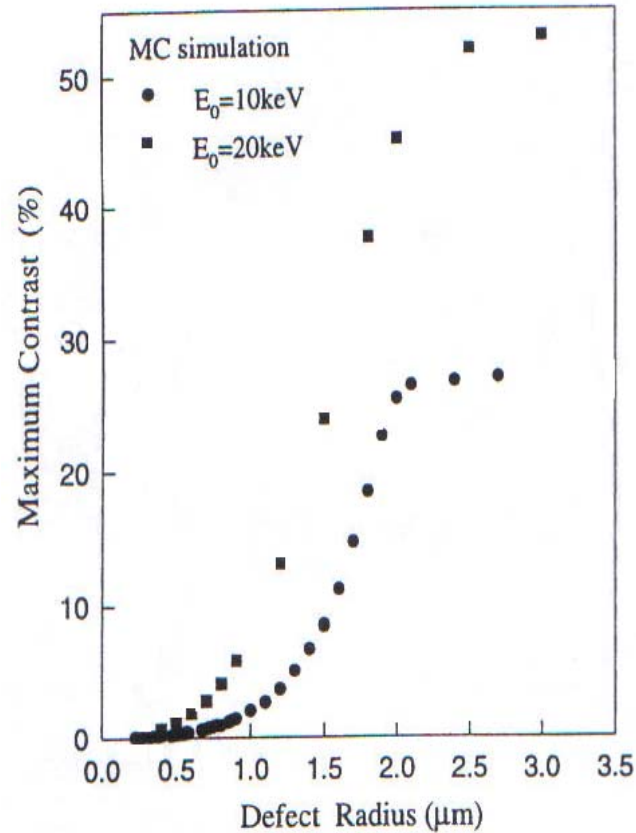
**Figure.V.4.** Evolution du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des grandes tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.

On peut noter que la dépendance du contraste avec la taille du défaut sphérique par la méthode Monte Carlo est comparable à celle obtenue par la procédure analytique.

### b. cas d'un défaut sphérique de grande taille

La figure (V.5) présente la même évolution et ce, pour deux énergies incidentes (10 KeV) et (20KeV).

On note un état de saturation quand le défaut atteint une taille égale à  $2\ \mu\text{m}$ . dans cette situation, le rayon vaut  $0.4\ \mu\text{m}$  pour le germanium (Ge).



**Figure.V.5.** Evolution du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des grandes tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.

Là encore, les résultats sont en bon accord avec ceux trouvés en utilisant une approche analytique [5].

## V.3. Notre modèle

### V.3.1. Introduction

Cette partie est consacrée à la présentation de *la deuxième partie* de notre travail. Il s'agit du *calcul du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique*, dans le cadre d'une géométrie particulière. Après avoir apprécié les variations de paramètres physiques microscopiques, associés au précipité, tels que la hauteur de l'énergie de barrière  $E_b$  ou encore la vitesse de recombinaison,  $S_{eff}$ , il était judicieux et naturel de contribuer à la connaissance

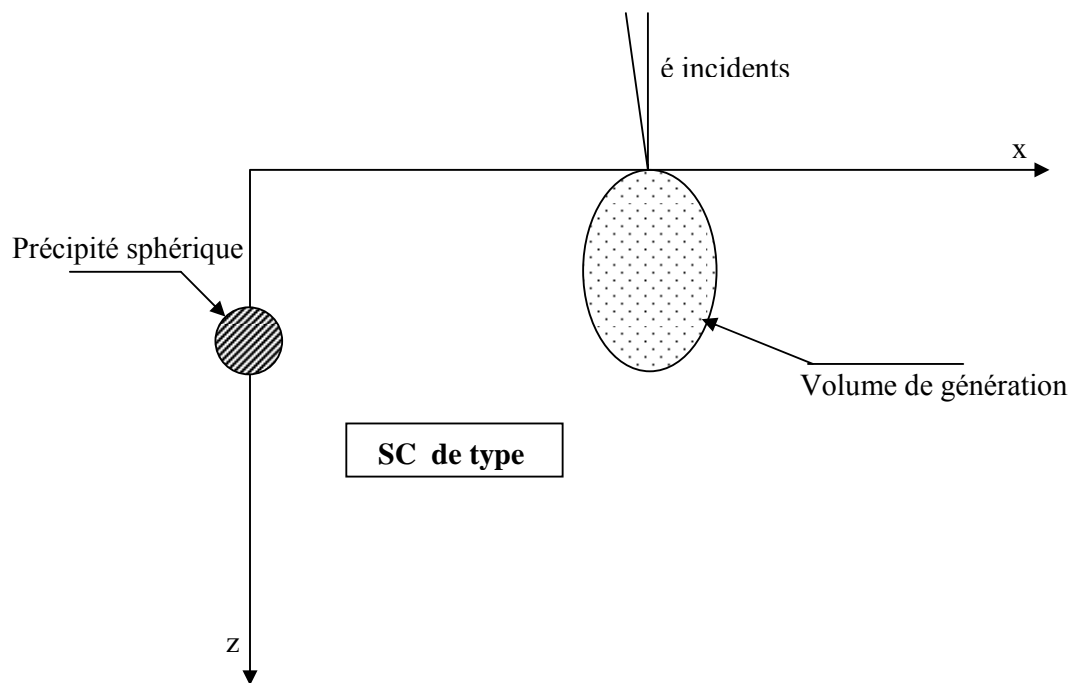
d'un paramètre déterminable macroscopiquement, le contraste EBIC, et de le relier aux paramètres microscopiques sus-cités.

Notre démarche générale a pour substratum théorique le modèle historique de Donolato (78/79) relatif au contraste EBIC d'un défaut quelconque.

Néanmoins, contrairement à cet auteur, une approche numérique de résolution du problème a été privilégiée au regard de la complexité des calculs, avec, en particulier, la prise en compte de l'existence d'une zone de charge d'espace à travers la vitesse effective de recombinaison à l'interface précipité métallique / matrice semiconductrice.

### V. 3.2. Géométrie et bases du Modèle

La figure (V.6) caractérise la géométrie du problème étudié.



**Figure. V.6.** Géométrie utilisée pour l'étude du contraste EBIC

Le faisceau d'électrons primaires, normal à la surface du contact redresseur, bombarde une diode Schottky de type métal - pSi, dans laquelle la zone neutre du semi-conducteur est considérée comme semi - infinie.

Le précipité sphérique est positionné sur l'axe z et la fonction de génération des porteurs électron - trou est caractérisé par une relation phénoménologique, attribuée à Possin [88] ;

De plus, les porteurs de charge minoritaires générés dans la zone de charge d'espace sont collectés avec une probabilité unité ; cela se traduit par :

$$\frac{\partial}{\partial z} \Delta n(\vec{r}) \Big|_{z=0} = 0 \quad (\text{V.20})$$

Enfin, et dans le but de simplifier les calculs dans une première étape, seule la zone neutre a été prise en considération.

### V.3.3. Equation de continuité

La densité du courant des électrons,  $\vec{J}_n$ , satisfait à l'équation de continuité tridimensionnelle qui s'écrit, pour un régime stationnaire et dans des conditions de faible injection, sous la forme :

$$\text{div} \vec{J} = g(\vec{r}) - r(\vec{r}) \quad (\text{V.21})$$

$g(\vec{r})$  représente la fonction de génération, tandis que  $r(\vec{r})$  est le taux de recombinaison.

Comme le flux,  $\vec{J}_n$ , est donné par :

$$\vec{J} = q D_n \text{grad} \bar{d}(\Delta n(\vec{r})) \quad (\text{V.22})$$

Il vient que:

$$D_n \nabla^2 \Delta n(\vec{r}) - \frac{\Delta n(\vec{r})}{\tau} = g(\vec{r}) \quad (\text{V.23})$$

La concentration des porteurs de charges minoritaires,  $\Delta n(\vec{r})$ , est obtenue en utilisant la méthode des fonctions de Green, dans le cas tridimensionnel.

Nous nous proposons dans ce qui suit de préciser la forme de la fonction de Green utilisée, ainsi que quelques unes de ses propriétés.

### V.3.4. La fonction de Green

#### a. définition de la fonction de Green

La fonction de Green,  $G(\vec{r}, \vec{r}')$ , est définie comme étant la contribution en un point  $\vec{r}$  d'une source ponctuelle située au point  $\vec{r}'$ .

si  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  est le champ d'un point d'observation situé au point  $\vec{r}$  causé par une source unité situé au point  $\vec{r}'$  alors le champ en  $\vec{r}$  causé par une distribution de source  $\rho$  est une intégrale de  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  sur tout l'intervalle de  $\vec{r}'$  occupé par la source [89].

## b. analyse de la fonction de Green

Cette partie est consacrée à la détermination de la fonction de Green, ainsi qu'à quelques unes de ses propriétés [90].

Notons que toute équation aux dérivées partielles peut s'écrire sous la forme :

$$\ell Y(\mathbf{r}) = -f(\mathbf{r}) \quad (\text{V.24})$$

où  $\ell$  désigne un opérateur différentiel.

La solution de l'équation (V.24) peut être représentée ainsi :

$$Y(\mathbf{r}) = -\ell^{-1} f(\mathbf{r}) \quad (\text{V.25})$$

On définit la fonction de Green  $G$  correspondant à l'opérateur différentiel  $\ell$  comme la source ponctuelle d'une équation différentielle non homogène :

$$\ell G(\mathbf{r}, \vec{r}') = -\delta(\mathbf{r}, \vec{r}') \quad (\text{V.26})$$

où  $\delta(\vec{r}, \vec{r}')$  désigne la masse de Dirac en  $Y$ , c'est à dire la représentation mathématique d'une impulsion unité [90].

Pour une équation de type diffusion, s'écrivant comme suit :

$$\nabla^2 Y - k^2 Y = f \quad (\text{V.27})$$

la résolution de l'équation (IV.25) intègre un opérateur différentiel,  $\ell$ , décrit ainsi :

$$\ell = \nabla^2 - k^2 \quad (\text{V.28})$$

La solution de l'équation (IV.25), d'après [89] et [91], dépend des conditions aux limites appropriées du problème posé.

Notons de plus qu'en langage mathématique, on a pu [89] séparer la fonction de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  en deux parties, l'une entièrement régulière et continue à l'intérieur du domaine considéré, dépendant des conditions aux limites imposées et l'autre régulière à l'intérieur du même domaine, sauf en un point dit singulier, en  $r = r'$ , qui est seulement une fonction de  $(r - r')$ .

Cette approche peut être décrite sous la forme globale suivante :

$$\tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}, \mathbf{x}'') = G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \quad (\text{V.29})$$

### 1- Détermination de $G_0$

La résolution de l'équation (V.27), en adoptant un opérateur,  $\ell$ , décrit dans l'équation (V.29), passe tout d'abord par l'adoption d'une condition aux limites, cette dernière s'écrivant comme suit :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = 0 \quad \text{si } r \rightarrow \infty \quad (\text{V.30})$$

Il a été montré [76] que  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  s'écrit :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\exp(-k|r-r'|)}{4\pi|r-r'|} \quad (\text{V.31})$$

Par ailleurs, en utilisant la méthode des images, on a pu réécrire l'équation (V.31) sous la forme suivante [89] :

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\exp(-k|r-r'|)}{|r-r'|} - \frac{\exp(k|r-r''|)}{|r-r''|} \quad (\text{V.32})$$

où  $r$  dénote la position où se fait l'observation,  $r'$  celle de la source, tandis que  $r''$  représente son point image par rapport à la surface du domaine étudié.

Les études effectuées pour la détermination de la fonction de **Green**, d'un opérateur d'Helmholtz modifié, permettent d'écrire  $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$  sous la forme d'une série d'harmoniques sphériques sous la forme [91]:

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = k \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m} Y_{l,m}^* i_l(kr<) K_l(kr>) \quad (\text{V.33})$$

où  $i_l$ ,  $K_l$  sont respectivement les fonctions de Bessel sphériques modifiées de première et seconde espèce.

Les symboles ( $<$  et  $>$ ) représentent respectivement l'adoption d'une variable minimum et maximum.

$Y_{l,m}$  et  $Y_{l,m}^*$  expriment les fonctions harmoniques sphériques et harmoniques sphériques conjugués respectivement.

Les vecteurs  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  ont, respectivement, pour composantes :  $\vec{r}(r, \vartheta, \phi)$ ,  $\vec{r}'(r', \vartheta', \phi')$  où  $\vartheta$  et  $\phi$  sont les angles sphériques.

$l, m$  sont respectivement les nombres quantiques orbital et magnétique.

## 2- Détermination de G

La résolution de l'équation (V.26), a permis d'exprimer la fonction de Dirac  $\delta(\vec{r}, \vec{r}')$  comme suit [91] :

$$\delta(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r, r') \delta(\vartheta, \vartheta') \delta(\phi, \phi') \quad (\text{V.34})$$

où encore :

$$\delta(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{r^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}(\vartheta, \phi) Y_{l,m}^*(\vartheta', \phi') \quad (\text{V.35})$$

Ainsi, en utilisant l'orthogonalité des harmoniques sphériques, on a pu obtenir une équation radiale du type [91] :

$$r \frac{d^2}{dr^2} [r g_l(r, r')] - l(l+1) g_l(r, r') = -\delta(r, r') \quad (\text{V.36})$$

ce problème, unidimensionnel, permet d'exprimer la partie radiale de la fonction de Green,  $g_l(r, r')$ , donc de la fonction Green.

$$G_1(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_l^m(\vartheta, \vartheta') Y_l^m(\phi, \phi') g_l(r, r') \quad (\text{V.37})$$

### • Remarque

L'adoption du théorème d'addition du polynôme de Legendre permet d'exprimer la partie angulaire de la fonction de Green sous une forme en expansion, comme suit :

$$P_l(\cos w) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_l^m(\vartheta, \vartheta') Y_l^m(\phi, \phi') \quad (\text{V.38})$$



- $P_1(\cos w)$  est le polynôme de Legendre.
- $\cos w$  est l'angle spatial entre les deux vecteurs  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$ , il s'écrit :

$$\cos w = \cos \vartheta \cos \vartheta' - \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(m(\phi - \phi')) \quad (\text{V.39})$$

ainsi, l'équation (V.37) devient :

$$G_o(\vec{r}, \vec{r}') = k \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{l=+m} P_l(\cos w) i_l(kr<) K_l(kr>) \quad (\text{V.40})$$

où  $k$  est une constante.

En posant :

$$g_{l0}(r, r') = \sum_{l=0}^{\infty} k i_l(kr<) K_l(kr>) \quad (\text{V.41})$$

L'équation (V.40) devient :

$$G_o(\vec{r}, \vec{r}') = k \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{l=+m} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos w) g_{l0}(r, r') \quad (\text{V.42})$$

De même, l'équation (V.37) devient :

$$G_o(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{l=+m} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos w) g_l(r, r') \quad (\text{V.43})$$

On note que le polynôme de Legendre est relié aux fonctions de Legendre ( $P_l(\cos \vartheta)$  et

$P_l(\cos \vartheta')$ ) et aux fonctions de Legendre associées ( $P_l^m(\cos \vartheta)$  et  $P_l^m(\cos \vartheta')$ ), par

l'expression suivante :

$$P_l(\cos w) = P_l(\cos \vartheta) P_l(\cos \vartheta') + 2 \sum_{m=-1}^{m=+1} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta') \cos(m(\phi - \phi')) \quad (\text{V.44})$$

## c- Application de la fonction de Green à notre modèle

### 1- Détermination de $G_0$

Grâce à la symétrie de la fonction de Green ( $G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r}', \vec{r})$ ), on a pu constater que la fonction de Green,  $G_0$ , décrite par l'équation (V.42) et vérifiant la condition aux limites matérialisée par l'équation (V.30), correspond à une situation où la source ponctuelle est placée à l'infini ( $r' \rightarrow \infty$ ).

de ce fait, on écrit la fonction de Green décrite ainsi comme suit :

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\exp(-|r-r'|/L_n)}{|r-r'|} - \frac{\exp(|r-r''|/L_n)}{|r-r''|} \quad (\text{V.45})$$

où  $L_n$  est la longueur de diffusion.

### 2- Détermination de $G$

Les conditions aux limites appropriées à notre problème sont les suivantes :

- 1) les porteurs de charge générés dans la zone de charge d'espace sont collectés avec une probabilité unité ; cela se traduit par :

$$\frac{\partial}{\partial z} \Delta n(\vec{r}) \Big|_{z=0} = 0 \quad (\text{V.46})$$

- 2) la vitesse de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , est reliée à la concentration des porteurs de charge minoritaires,  $\Delta n(r)$ , par la relation (V.26).

La partie radiale de la fonction de Green,  $g_l(r, r')$ , peut être exprimée sous la forme :

si  $r < r'$

$$g_l(r, r') = \frac{A_l j_l(r/L_n) + B_l y_l(r/L_n)}{r} \quad (\text{V.47})$$

si  $r > r'$

$$g_l(r, r') = \frac{C_l}{r} (j_l(r/L_n) + y_l(r/L_n)) \quad (\text{V.48})$$

Les fonctions A, B et C sont reliées entre elles par les relations suivantes :

où  $\alpha$  est égale à:

1.

$$A = B \alpha$$

$$\alpha = \frac{\left[ V_s \frac{y_l(\tilde{R}/L_n)}{\tilde{R}} - 4\pi R^2 \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{y_l(r/L_n)}{r} \right) \right)_{r=\tilde{R}} \right]}{\left[ V_s \frac{j_l(r/L_n)}{\tilde{R}} - 4\pi R^2 \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{y_l(r/L_n)}{r} \right) \right)_{r=\tilde{R}} \right]} \quad (\text{V.49})$$

où  $\gamma$  est caractérisé par :

$$2. \quad B = \gamma C$$

$$\gamma = \frac{\left[ j_l(r'/L_n) + y_l(r'/L_n) \right]}{\left[ y_l(r'/L_n) - \alpha j_l(r'/L_n) \right]} \quad (\text{V.50})$$

$$3. C = -\frac{4\pi}{r'D}$$

où D vaut :

$$D = \gamma \left( \frac{\partial}{\partial r} y_l(r/L_n) \right)_{r=r'} - \gamma \alpha \left( \frac{\partial}{\partial r} j_l(r/L_n) \right)_{r=r'} - \left( \frac{\partial}{\partial r} j_l(r/L_n) \right)_{r=r'} - \left( \frac{\partial}{\partial r} y_l(r/L_n) \right)_{r=r'} \quad (\text{V.51})$$

$j_l, y_l$  sont respectivement les fonctions de Bessel sphériques de première et seconde espèce. la fonction de Green  $G$ , dont la forme générale est décrite par l'équation (V.24), est déduite immédiatement, une fois  $g_l(r, r')$  connue.

### 3 - Détermination de la fonction $\tilde{G}$

La fonction de Green du problème posé,  $\tilde{G}$ , est recherchée sous la forme suivante (en coordonnées sphériques) :

$$\tilde{G}(x, x', x, x'') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} Y_{l,m}(\theta, \phi) (Y_{l,m}^*(\theta', \phi') g(r, r') - Y_{l,m}^*(\theta'', \phi'') g(r, r'')) \quad (\text{V.52})$$

Sur la base des coordonnées sphériques,  $(r'', \theta'', \phi'')$  est l'image de  $x'$  en respectant la surface de collecte.

### V.3.5 . Calcul de la concentration des électrons en excès

#### a. Loin du défaut

La résolution de l'équation de continuité (V.23) est obtenue en utilisant la fonction de Green,  $G_o$ , relative a une situation exempte de défauts, décrite par la relation ( V.45)

$$\Delta n_o(\vec{r}) = \frac{1}{D_n} \int_V g(\vec{r}) G(\vec{r}, \vec{r}') dV \quad (\text{V.53})$$

La solution obtenue est de la forme [4] :

$$\Delta n_o(\vec{r}) = \frac{1}{D_n} \int_V g(\vec{r}) \left[ \frac{\exp(-|r-r'|/L_n)}{|r-r'|} - \frac{\exp(-|r-r''|/L_n)}{|r-r''|} \right] dV \quad (\text{V.54})$$

où V représente le volume du cristal semi infini.

#### b. Près du défaut

La présence d'un défaut modifie la forme de la fonction de Green relative au problème. La relation (V.52) est celle qui doit être utilisée pour rendre compte de la nouvelle situation. La solution  $\Delta n(\vec{r})$  de l'équation aux dérivées partielles (V.23) peut être décomposée en deux termes, l'un relatif à une situation sans défaut et l'autre prenant en compte sa présence.

il s'ensuit que  $\Delta n(\vec{r})$  peut s'écrire comme :

$$\Delta n(\vec{r}) = \Delta n_o(\vec{r}) + \Delta n^*(\vec{r}) \quad (\text{V.55})$$

$\Delta n_o(\vec{r})$  caractérise la concentration de porteurs minoritaires dans une situation « parfaite », donnée par la relation ( V.54 ), tandis que  $\Delta n^*(\vec{r})$ , partie perdue au défaut, est exprimée de la manière suivante :

$$\Delta n^*(\vec{r}) = \Delta n(\vec{r}) - \Delta n_o(\vec{r}) \quad (\text{V.56})$$

où  $\Delta n(\vec{r})$  est la densité d'électrons en excès que l'on collecte en présence d'un défaut.

Cet artifice de calcul permet d'exprimer les fonctions de Green correspondant aux deux relations (sans défauts, donc avec  $\Delta n_0(\vec{r})$  et avec défaut, donc avec  $\Delta n(\vec{r})$ ) qui sont données par les relations ( V.54 ) et ( V.55 ) respectivement.

### V.3.6. Calcul du contraste EBIC

De manière générale, le contraste EBIC s'écrit comme le rapport du courant perdu au défaut,  $I^*$ , sur celui qui est collecté à l'infini,  $I_\infty$ .

il est donné par :

$$C = \frac{I^*}{I_\infty} \quad (\text{V.57})$$

Le formalisme général adopté pour la détermination du courant EBIC collecté dans une situation quelconque est donné par cette équation intégrale :

$$I_{\text{EBIC}} = q D_n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial z} \Delta n(\vec{r}) \Big|_{z=0} dx dy \quad (\text{V.58})$$

Cette relation est fondamentale pour la connaissance des courants  $I^*$  et  $I_\infty$ , en ce sens qu'il suffit de la résoudre avec les concentrations de porteurs en excès correspondant à chaque situation.

#### a- cas loin du défaut

Dans ce cas, la relation (V.38) doit être résolue en prenant en compte l'équation (V.34), relative à la densité de porteurs, loin du défaut.

Il s'ensuit que :

$$I_\infty = q D_n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial z} \Delta n_0(\vec{r}) \Big|_{z=0} dx dy \quad (\text{V.59})$$

les travaux effectués par Donolato [4] ont permis de réécrire la relation (V.59) sous une forme plus simple :

$$I_\infty = q \int_V g(\vec{r}') \exp(-z'/L_n) d^3r' \quad (\text{IV.60})$$

où  $V$  représente le volume du cristal semi infini.

### b- cas près du défaut

Cette situation est caractérisée par une concentration de porteurs en excès définie par la relation (V.56).

Dans ce cas, l'équation (IV.58) devient :

$$I^* = qD_n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial z} \Delta n^*(\vec{r}) \Big|_{z=0} dx dy \quad (\text{V. 61})$$

En utilisant les fonctions de Green appropriées (équation V.52), on obtient :

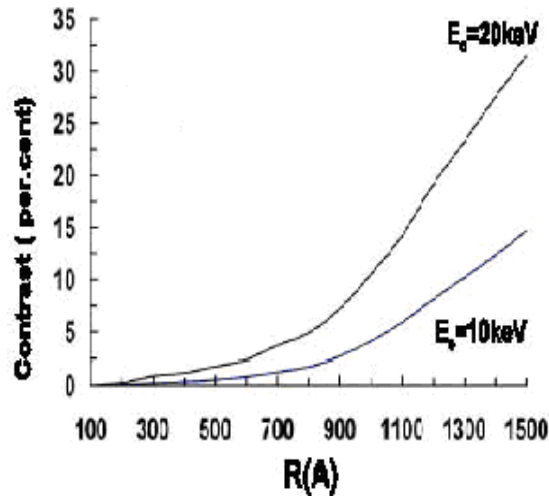
$$I^* = qD_n \int_V d^3r' g(r') \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}(\vec{r}, r') \Big|_{z=0} dx dy \quad (\text{V. 62})$$

## V.4. Résultats du contraste

La figure (IV.7) caractérise l'évolution du contraste EBIC en fonction de la taille du précipité, à l'interface, entre un précipité métallique et du silicium de type p, avec un taux de dopage égal à  $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Le calcul est effectué pour deux valeurs d'énergies incidentes et pour une densité de défauts égale à  $8 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ .

La vitesse effective de recombinaison et le rayon de Read qui contrôlent le contraste sont calculés pour chaque taille de précipité, en utilisant la méthode self consistante développée dans la première partie de notre travail (Chapitre III).

Le précipité est supposé à une profondeur  $d = 2 \mu\text{m}$ , sous la surface de collecte, tandis que le faisceau incident est situé à l'aplomb du précipité.

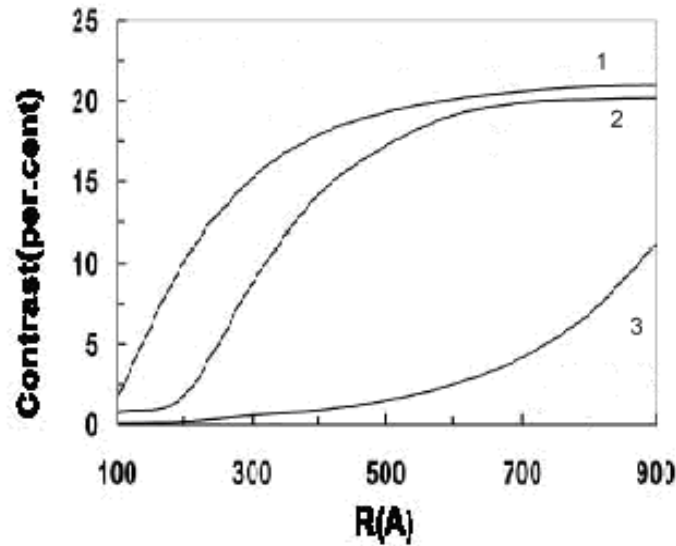


**Figure V.7.** Evolution du contraste EBIC en fonction de la taille du précipité sphérique pour deux énergies incidentes  $E_0$  et  $e_0$ , dans le cadre du modèle H.F.L.M.

Il apparait que le contraste est d'autant plus élevé que l'énergie du faisceau incident est grande. Dans ce dernier cas, les porteurs sont générés à des distances plus profondes, induisant une probabilité de collecte plus faible. Ils ont d'autant plus de chance de se recombiner, augmentant ainsi la valeur du courant perdu.

Le contraste commence à devenir significatif pour des tailles de précipité  $R$  qui dépassent la valeur de  $800 \text{ (Å)} (R > 800(\text{Å}))$ .

Quand à la figure (V.8), elle traduit l'influence de la densité des états d'interface  $N_t$  sur les courbes du contraste en fonction de la taille et  $e_0$ , dans les mêmes conditions opératoires que celles qui ont prévalu pour la figure (V.7).



**Figure V.8.** Evolution du contraste EBIC en fonction de la taille du précipité sphérique, pour trois densités d'états d'interface  $N_t$ .

1.  $N_t = 5 \cdot 10^{12} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 2.  $N_t = 8 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ , 3.  $N_t = 4 \cdot 10^{11} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ .

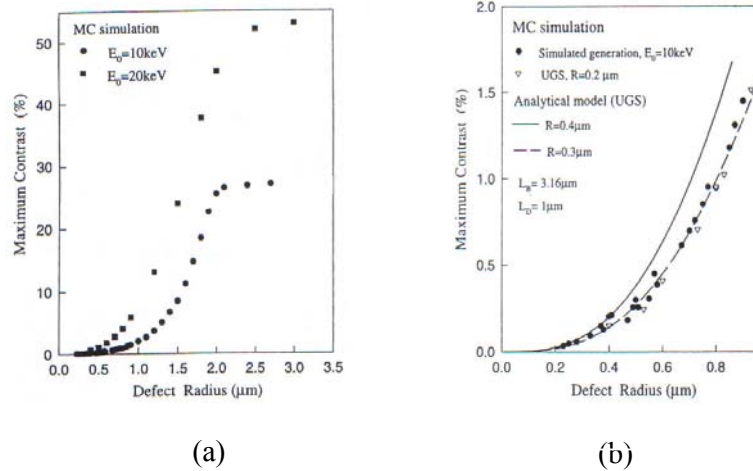
Pour une taille donnée, le contraste est d'autant plus élevé que la densité d'états d'interface est importante. Ce constat est logique en ce sens que la probabilité de « piégeage » des porteurs est renforcée.

Par ailleurs, il apparaît que le comportement asymétrique du contraste survient pour des tailles de précipités d'autant plus grandes que la densité d'états d'interface est faible.

Ce résultat trouve son explication dans le fait que pour des valeurs de  $N_t$  basses, la saturation des niveaux s'opère plus vite, rendant la possibilité de piéger d'autres porteurs de plus en plus difficile.

Notons que le seul travail effectué dans ce domaine, disponible dans la littérature, est l'œuvre de N. Tabet [10]. La figure (V.9) rappelle les principaux résultats qu'il a obtenus.





**Figure V.9.** Evolution du contraste en présence d'un précipité sphérique, dans le domaine des petites (a) et grandes (b) tailles, en adoptant la méthode Monte-Carlo.

Une comparaison rapide entre ses travaux et les nôtres montre que les résultats obtenus ont un comportement qualitativement équivalent.

Il est à noter, toutefois, que notre calcul prend en compte l'effet de la zone de charge d'espace et celui de la vitesse effective de recombinaison, contrairement au modèle de N. Tabet [5] qui néglige la zone déserte et considère une vitesse de recombinaison infinie.

# Conclusion

Le travail que nous nous sommes proposés d'effectuer avait pour objectif une contribution à l'étude du contraste EBIC en présence d'un précipité sphérique contenant des défauts à sa surface. Cette étude originale est la suite naturelle de travaux plus anciens qui ont été effectués pour les cas d'un défaut quelconque, de la dislocation et du joint de grains, en adoptant une démarche comparable.

Nous avons, dans *un premier temps*, utilisé une méthode self-consistante pour apprécier l'évolution de paramètres physiques microscopiques susceptibles de caractériser le précipité, à savoir la hauteur de l'énergie de barrière,  $E_b$ , la vitesse de recombinaison,  $S_{\text{eff}}$ , en fonction du niveau d'injection et des paramètres de recombinaison.

Une distribution mono énergétique des états d'interface est considérée dans deux cas limites :

- Cas du niveau à demi plein (Modèle H.F.L.M), dans lequel le niveau énergétique associé au défaut considéré est à moitié rempli.
- Cas où le précipité sphérique est initialement neutre, c'est à dire avant excitation extérieure. Le modèle associé est noté X.F.L.M.

La théorie **Hall Shockley Read** est l'outil principal de notre analyse dans cette partie.

Les résultats obtenus ont permis de connaître les sens de variation de certains paramètres tels que le quasi-niveau de Fermi, dans les zones déserte et quasiment neutre du matériau, l'extension spatiale de la zone de charge d'espace,  $z_d$ , la fonction de probabilité d'occupation du niveau  $E_t$ ,...

La vitesse de recombinaison à l'interface d'un précipité sphérique métallique en fonction des paramètres de recombinaison et du niveau d'injection, a été déterminée.

L'analyse de la vitesse de recombinaison a été établie en fonction de la taille des précipités, des concentrations de défauts à l'interface et aussi de la température.

Dans *une seconde étape*, nous avons posé les jalons théoriques d'une démarche qui nous a permis d'exprimer le contraste EBIC d'un semi-conducteur en présence d'un précipité sphérique.

Les calculs, au demeurant très compliqués, ont fait appel à des fonctions de **Green** très lourdes d'utilisation et ayant des formes asymptotiques différentes selon la nature du problème posé.

Le contraste EBIC a été étudié avec la taille pour diverses concentrations de défauts et différentes énergies incidentes.

Une comparaison rapide entre le seul modèle existant dans la littérature (celui de N.Tabet, pour le précipité sphérique) et le nôtre montre que les résultats obtenus ont un comportement qualitativement équivalent. Les différences sont dues aux hypothèses de travail adoptées.

## ***Références Bibliographiques***

- [1] R.J. Tarento and Y.Marfaing, J. Appl. Phys., 71,4997 (1992).
- [2] J. Oualid, C.H. Singal, J.Dugas, J.P.Crest and H.Amzil, J. Appl. Phys.55, 1195 (1984).
- [3] J.L. Maurice, Revue Phys. Appl.22, 613 (1987).
- [4] C. Donolato, Optik 52: 19-36 (1978/79).
- [5] N. Tabet, Semicond. Sci.Technol, 13 1392-1395 (1998).
- [6] D. B. Holt and D.C. Joy, Microcharacterisation of Semiconductors (Academic, London, 1989).
- [7] P. Branski, V. Koltchkov and I. Polykevitch, "Electronique des Semiconducteurs", tome1 Edition Mir, 396 (1975).
- [8] W. Shockley, Phys. Rev.56, 317 (1939).
- [9] I. Koutcky, J.Phys. Chem.Sol.14, 207 (1960).
- [10] I. Koutcky and M.Tomasek, Phys. Rev 120, 1212 (1960).
- [11] I. Koutcky and M.Tomasek, Surf. Sci. 3, 331 (1965).
- [12] M.Tomasek, Surf. Sci. 2,8 (1964), 4, 471 (1966).
- [13] B. Saporel and C.Hermann, "Physique des Semiconducteurs", Edition Marketing, Paris, 186 (1990).
- [14] W. Shockley, Electron and Holes in Semiconductors, R. E. Krieger Pub. Co (1976)
- [15] D. T. Stevenson and R. J. Keyes, Physica 20, 1041 (1954).
- [16] J. Bardeen, Phys. Rev. 71, 717(1947).
- [17] W. Shockley, Electrons and Holes in Semiconductors, D. Van. Nost.Reinhold, New York (1950).

- [18] H. Mathieu, Physique des Semiconducteurs et des Composants Électroniques, 5<sup>ème</sup> édition (2004).
- [19] A. Nouiri, Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Constantine (2000).
- [20] C.T. Sah, R.N. Noyce and W.Shockley, " Carrier Generation and Recombination in p-n junction and p-n junction Characteristics ", Proc. Ire, 45, 1228 (1957).
- [21] B. Boittiaux, Cours d'électronique, les Composants Semiconducteurs, 2<sup>ème</sup> Edition ( 1995).
- [22] J.S. Blakemore, Semiconductor Statistics, Dover Publication, INC, New York (1986).
- [23] C. Donolato, IEEE Trans. Electr. Dev. Ed.31,1121 (1984).
- [24] J . Marek, Appl. Phys, 53, 1454 (1982).
- [25] F. Berz and K. Kuiken, Solid State Electronics, 19,437 (1976).
- [26] D.B . Wittry and D.F . Kyser, J Appl. Phys., 38,375 (1967).
- [27] N. Tabet, Thèse de Doctorat en Sciences, Université Paris Sud (1988).
- [28] D.E. Mekki, R.J.Tarento and N.Tabet, Phys.Stat(a) 130,383 (1992).
- [29] K. Hecht, Phys. 77,235 (1932).
- [30] Biads 88, Rev Phys. Appl., 24, C6 (1989).
- [31] Biads 91, Journal de Physique IV, Vol. I , C6 (1991).
- [32] R. Labush and W. Schroter, Lattice Defect in Semiconductors Vol.23 (1974), The institute of physics, London, p 56 (1975).
- [33] W. Hayes and M. Stroncham, Defects and Defect Process in Nonmetallic Solids , Dover, New York (2004).
- [34] S.M. Sze , Physics of Semi-Conductor Devices 2<sup>nd</sup> Edition, J. Wiley and Sons (1981).
- [35] H.C. Card and E.S. Yang, IEEE Trans. Electron. Devices E.D-24, 397 (1977).
- [36] H. Veth and M.Lannoo, Philos.Mag.B50,93 (1984).
- [37] C.H. Seager, J. Appl. Phys. 52, 3960 (1981).

- [38] J. Dugas, Thèse d'état, Université de Marseille (1985).
- [39] B. Sieber, Stage de Microscopie Electronique à Balayage du 13 AU 17 Novembre, Meudon-CNRS (1989).
- [40] J.M. Titechmarche, G.R. Booker, W. Harding, and D.R. Wight, *J. Mat. Sci.* 12 341, (1977).
- [41] A. Ourmazed, D.B. Darby and G.R. Booker, *Inst. Phys. Stat. Conf. Ser* 36 251 (1977).
- [42] H. Blumtritt and R. Gleichmanne, *Ultramicroscopy* 2 ,405 (1977).
- [43] H. Blumtritt, R. Gleichmanne, J. Heidenreich and H. Johansen, *Phys. Stat. Sol.(a)* 55 (1977).
- [44] A. Ourmazed and G.R. Booker, *Phys.Stat.Sol.(a)* 55, 611 (1979).
- [45] H. Menniger, H. Raidt and R. Gleichmann, *Phys. Stat. Sol.(a)* 58, 173 (1980).
- [46] J. Heidenrich, H. Blumtritt, R. Gleichmann and H. Johansen, *Cryst.Res. and Technol.* 16 ,133 (1981).
- [47] J. Heydenreich, H. Blumtritt, R. Gleichmann and H. Johansen, *Sem I* 351(1981).
- [48] M. Kittler and E. Bugiel, *Crystal Res and Technol.* 17, 79 (1982).
- [49] E. Bugiel, M. Kittler, A. Borchardt and H. Richter, *Phys. Stat. Sol.(a)* 84, 143 (1984).
- [50] Y.M. Chu, D.B. Darby and G.R Booker, *Inst. Phys. Conf. Ser.* 60, 331 (1981).
- [51] F. Battistela, Thèse Toulouse (1985) and F. Battistela and A. Rocher, *Semicond. Sci. Technol.* 2 ,226 (1987).
- [52] A. Rocher, *Revue Phys. Appl.* 22 ,591 (1987).
- [53] S. Pizzini, A. Sandrinelli, M. Beghi, D. Narducci and P.L. Fabbri, *Rev. Phys. Appl.* 22, 631-636 (1987)
- [54] J. Laval, J.L. Maurice and C. Cabnel, *Revue Phys. Appl* 225, 623 (1987).
- [55] A. Bary and G. Nouet, *J. Appl. Phys.* 63, 435 (1988).
- [56] N. Tabet and C.J. Monty, *Phil. Mag.* 57,763 (1988).

- [57] Y. Beggah, Thèse de Magister, Université de Constantine (1992).
- [58] J. D. Kamm, Solid-Stat Electron.19 , 921 (1976).
- [59] D. B. Wittry, Phys.Appl.49, 2827 (1978).
- [60] W.Van Roosbroeck, J.Appl.Phys.26/380.91 (1955).
- [61] J.F. Bress and D. Lafeuil, Proc.25 TH. Anniversary Meeting at Emag, Institute of Physics, 220 (1971).
- [62] F. Berz and H. K. Kuiken, Solid-St.Electron.19,437 (1976)
- [63] C. Donolato, Solid-St. Electron. 251077 (1982).
- [64] J.P. Eberhart., Méthodes Physiques d'études Des Minéraux et des Matériaux Solides, Doin Editeurs (1976).
- [65] J. I . Hanoka and R. O. Bell, Ann. Rev. Mater Sci, p 353 (1981).
- [66] E.T . Berger and S.M. Seltzer, Nat. Acad. Sci. Nat, Rest. Council Pub. 1133,205 (1964).
- [67] H.A. Beth, Handb de Phys.24,519 (1933).
- [68] A.E. Gruen , Z. Natuforsch, 12 A, 89 (1957),cité par [69].
- [69] T.E .Everhart and P.H. Hoff, J. Appl. Phys.42, 13, 5837 (1971).
- [70] K.Kanaya and S.Okayama, J. Phys. D : Appl. Phys, 5,43 (1972).
- [71] J.I. Goldstein, cité par [28].
- [72] K. Murata, T. Matsukawa and R. Shimizu Japan. J. Appl. Phys. 10, p. 678 (1971).
- [73] T. Matsukawa, K. Murata and R. Shimizu, Phys. Status Solidi B 55: 371-83 (1973).
- [74] C. J. Wu and D.B.Wittry, J Appl. Phys. 49(5), 2827 (1978).
- [75] D.F. Kyser, Proc of the Inst. Conf X Ray Optics (1972) and Microanalysis Osaka, University of Tokyo, Press Tokyo P.147 (1971).
- [76] J. Steringlass, Phys Rev. 95,345 (1954).
- [77] W.Van Roosbroeck, Phys Rev. A 139/ 1702-16 (1965).

- [78] C.A. Klein, Phys. Lett.A. 24,513 (1967).
- [79] C. A. Klein, Phys. Lett.A. Appl. Phys.39,412029, 24513 (1968).
- [80] C. Donolato, Phys. Rev. A139: 1702-16 (1981).
- [41] B. Sieber, Phil Mag. B, 55.5587 (1987).
- [82] B. Akamatsu, P. Henoc and R.B.Martins, J. Microsc. Electrosc. Electron.14 ,12 A (1989).
- [83] C. Donolato, J. Appl. Phys.54 (3) (1983).
- [84] D. Zook, Appl.Phys. Lett.37, 223 (1980).
- [85] J. L. Faravaque and B. Sieber, Rev. Phys. Appl.25, 53 (1990).
- [88] G.E. Possin and J.F. Norton, In Sem (1975), IIT Res., p 458, Chicago (1975).
- [89] P. M. Morse and M. Feshbach, Method of Theoretical Physics, chap.7.Me Graw-Hill. Puld.W Newyork (1953).
- [90] H. Reinhard, Equations aux Dérivées Partielles-Introduction – Dunod (1991).
- [91] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, 6<sup>th</sup> Edition, Miami University (2005).