

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE DES FRERES MENTOURI-CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :

Série :

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme de doctorat en sciences en physique

SPECIALITE : Sciences des matériaux

OPTION : Semiconducteurs

THEME

**Etude théorique et pratique de la cathodoluminescence en
vue de la détermination de l'influence des défauts dans les
semiconducteurs II-VI**

Par :

KENIECHE DAOUD

Soutenue le : 02/02/2016

Devant le jury :

Président :	M. S. Aida	Prof.	Université des Frères Mentouri Constantine
Directeur de thèse :	K. Guergouri	Prof.	Université Larbi Ben M'Hidi Oum El Bouaghi
Examineurs :	B. Boudine	Prof.	Université des Frères Mentouri Constantine
	M. S. Ferah	Prof.	Université des Frères Mentouri Constantine
	N. Brihi	Prof.	Université de Jijel
	Z. Takkouk	Prof.	Université de Jijel

Dédicace

A la mémoire de mon cher père

A ma mère

A mes frères et sœurs

A ma femme

A ma petite fille

Je dédie ce modeste travail.

Daoud...

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au laboratoire de Physique-Chimie des Semiconducteurs à l'université des Frères Mentouri de Constantine.

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur **K. Guergouri**, Professeur à l'université Larbi Ben M'Hidi d'Oum El Bouaghi, d'avoir bien voulu proposer et diriger ce travail, qu'il a suivi ensuite avec beaucoup d'intérêt à tout instant et tout au long des années qui nous ont réunis. Son savoir faire, sa compétence scientifique, ses conseils et encouragements ont été un paramètre clé dans l'aboutissement de ce travail.

Monsieur **M. S. Aida**, Professeur à l'université des Frères Mentouri de Constantine, m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de soutenance, qu'il trouve ici mes vifs remerciements et ma grande reconnaissance.

Je tiens à remercier, également, Messieurs **B. Boudine** et **M. S. Ferah**, professeurs à l'université des Frères Mentouri de Constantine ainsi que Messieurs **N. Brihi** et **Z. Takkouk**, professeurs à l'université de Jijel, pour avoir accepté de juger mon travail et de faire partie de du jury de thèse.

Un remerciement particulier est adressé à tous mes amis de la faculté des sciences de Boumerdès, plus particulièrement Noureddine Karboua et Mohamed Ali Lahmer.

Table des Matières

Table des matières

Introduction générale	01
------------------------------------	----

Chapitre I: Rappels bibliographiques sur CdTe

Introduction	04
I.1. Les semiconducteurs II-VI	04
I.2. Le matériau tellurure de cadmium CdTe	05
I.3. Propriétés physico-chimiques du tellurure de cadmium	05
I.3.1. Structure cristalline.....	05
I.3.1.1. Structure cubique de type sphalérite.....	05
I.3.1.2. Structure hexagonale de type wurtzite	06
I.3.2. Structure des bandes d'énergie	07
I.3.2.1. Masses effectives.....	08
I.3.3. Propriétés électriques	09
I.3.4. Propriétés optiques	10
I.3.5. Propriétés thermiques	12
I.4. Applications et intérêts technologiques	12
I.4.1. Applications du CdTe massif	13
I.4.2. Applications du CdTe en couches minces	15
Conclusion	16

Chapitre II : Interaction électron-matière

Introduction	17
II.1. Phénomènes d'interaction électron-matière	17
II.2. Processus de perte d'énergie des électrons	18
II.2.1. La diffusion élastique	19
II.2.2. La diffusion inélastique.....	19
II.2.2.1. Emission électronique.....	19

a- Electrons secondaires.....	19
b- Electrons rétrodiffusés.....	19
c- Emission d'électrons Auger.....	20
II.2.2.2 Emission de photons	20
a- Emission de photons X	20
b- Rayonnement de freinage.....	20
c- Cathodoluminescence	20
II.3. Volume d'interaction.....	21
II.4. Parcours (Trajectoire) des électrons dans la matière.....	21
II.5. Perte d'énergie de l'électron incident (due aux collisions).....	23
II.6. Cathodoluminescence dans les semiconducteurs.....	24
II.6.1. Définition de la cathodoluminescence.....	24
II.6.2. Techniques de la cathodoluminescence.....	24
II.6.3. Principe de la cathodoluminescence	25
II.6.4. Applications de la cathodoluminescence	25
II.6.5. Les différents modes d'acquisition de cathodoluminescence	26
II.6.6. Comparaison de la CL avec quelques techniques de caractérisation	28
II.7. Phénomènes de génération de charges.....	28
II.7.1. Energie de création d'une paire électron-trou	28
II.7.2. La fonction de génération de paires électron-trou	29
II.7.3. Fonction de dissipation d'énergie normalisée	31
II.7.3.1. Fonction de dissipation de Wittry-Kyser	33
II.7.3.2. Fonction de dissipation de Modèle de Kanaya - Okayama.....	33
Conclusion.....	35

Chapitre III : Les défauts dans CdTe

Introduction.....	36
III.1. Notions de génération et recombinaison.....	36
III.2. Mécanismes de recombinaison des porteurs.....	37
III.2.1. Recombinaisons volumiques	37
III.2.1.1. Recombinaisons radiatives.....	37
III.2.1.2. Recombinaisons Shockley-Read-Hall.....	38

III.2.1.3. Recombinaisons Auger.....	39
III.2.2. Recombinaisons surfaciques	40
III.2.2.1. Les états de surface.....	40
III.2.2.2. Notion de la vitesse de recombinaison en surface	41
III.3. Taux de recombinaison total des porteurs minoritaires.....	42
III.4. Présentation des défauts et impuretés dans CdTe.....	42
III.4.1. Introduction sur les défauts cristallins.....	42
III.4.2. Les techniques de caractérisation des niveaux pièges.....	43
III.5. Classification des défauts structuraux dans un cristal.....	44
III.5.1. Défauts de surface.....	44
III.5.2. Défauts de volume.....	44
III.5.2.1. Défauts Ponctuels.....	44
III.5.2.2. Défauts étendus.....	45
III.6. Niveaux d'énergie associés aux défauts	45
III.6.1. Niveaux superficiels	45
III.6.2. Niveaux profonds	45
III.7. Caractéristiques des défauts profonds.....	46
III.7.1. Mécanismes d'émission et de capture des porteurs.....	46
III.7.2. Pièges à électrons et pièges à trous.....	49
III.8. Défauts électriquement actifs dans le CdTe.....	49
III.8.1. Défauts natifs.....	49
III.8.1.1. Le Dopage résiduel.....	50
III.8.1.2. Les lacunes.....	50
III.8.1.3. Les antisites.....	51
III.8.1.4. Les interstitiels.....	51
III.8.2. Les impuretés.....	51
III.8.2.1. Niveaux peu profonds.....	51
III.8.2.2. Les éléments de la colonne IV	52
III.8.2.3. Les métaux de transition	52
Conclusion.....	53

Chapitre IV : Modélisation et simulation de la cathodoluminescence

Introduction	54
IV.1. Présentation du modèle	54
IV.1.1. Hypothèses de base.....	55
IV.1.2. Surface libre d'un semiconducteur.....	56
IV.1.3. Etablissement des équations de continuité.....	58
IV.1.3.1. Equations générales.....	58
IV.1.3.2. Résolution de l'équation de continuité dans la zone de déplétion	60
IV.1.3.3. Résolution de l'équation de continuité dans la zone neutre.....	62
IV.1.4. Conditions aux limites	63
IV.2. Calcul auto-cohérent (self-consistent)	65
IV.3. Intensité de cathodoluminescence	66
IV.4. Organigramme de calcul de la cathodoluminescence à T=300K	69
IV.5. Effet de la température sur les propriétés du CdTe	71
IV.5.1. Largeur de la bande interdite.....	71
IV.5.2. La concentration de porteurs libres intrinsèques.....	72
IV.5.3. Longueur de diffusion.....	73
IV.5.4. La mobilité des porteurs.....	75
IV.5.4.1. Processus de diffusion des porteurs.....	75
IV.5.4.2. Mobilité globale des porteurs.....	77
IV.5.5. Coefficient d'absorption optique.....	79
IV.5.5.1. Variation du coefficient d'absorption avec la température.....	80
IV.5.5.2. Variation du coefficient d'absorption avec l'énergie de la radiation incident.....	80
IV.5.6. Les durées de vie des porteurs.....	81
IV.5.7. Sections efficaces de capture des défauts.....	82
IV.6. Vitesse de recombinaison en surface	84
IV.7. Diamètre du faisceau d'électrons	86
IV.8. Echauffement dû au faisceau d'électrons incidents	89
IV.8.1. Etude de l'échauffement en fonction de la puissance excitatrice.....	89
IV.8.2. Etude de l'échauffement en fonction du diamètre du faisceau électronique.....	91
IV.9. Organigramme d'algorithme de simulation de l'intensité cathodoluminescence	91

Conclusion	93
-------------------------	----

Chapitre V: Résultats et discussion

Introduction	94
V.1. Etude des effets de différents facteurs externes sur l'intensité I_{CL}	94
V.1.1. Effet de la température.....	94
V.1.1.1. Influence de la température du matériau.....	94
V.1.1.2. Etude de I_{CL} en fonction de la température.....	95
V.1.1.3. Etude de l'échauffement thermique induit par le faisceau d'électrons.....	97
V.1.1.4. Variation de la température en fonction de la profondeur.....	99
V.1.2. Effet du diamètre de la sonde électronique.....	100
V.1.2.1. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction du diamètre de la sonde électronique..	100
a) Effet de l'intensité du courant de la sonde.....	100
b) Effet de l'énergie d'accélération de faisceau d'électrons incidents.....	101
V.2. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction des paramètres de surface	103
V.2.1. Influence des propriétés physiques des défauts.....	103
V.2.1.1. Influence de la position énergétique du défaut.....	103
V.2.1.2. Influence de la densité des défauts de surface.....	104
V.2.1.3. Influence de la section efficace de capture des défauts.....	105
V.2.2. Influence de la vitesse de recombinaison en surface.....	106
V.2.3. Influence de la largeur de la zone de déplétion	107
V.3. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction des propriétés physiques du matériau	108
V.3.1. Influence de la longueur de diffusion.....	109
V.3.2. Influence du coefficient d'absorption	110
V.3.3. Influence de la concentration du dopage	111
V.4. Etude de la dépendance de la hauteur de barrière avec les paramètres du faisceau et les paramètres physiques du matériau	112
V.4.1. Influence de l'énergie du faisceau incident	112
V.4.2. Influence des paramètres du défaut (N_t , E_t et σ).....	113
V.4.2.1. Influence de N_t	113
V.4.2.2. Influence de E_t	114

V.4.2.3. Influence de σ	116
V.4.3. Influence de Zd.....	116
V.4.4. Influence des paramètres du Volume (Ln et Na).....	117
V.4.4.1. Influence de Ln.....	117
V.4.4.2. Influence de Na.....	118
V.5. Etude expérimentale	119
V.5.1. Présentation des échantillons étudiés.....	119
V.5.1.1. Echantillons de CdTe.....	119
V.5.1.2. Echantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$	120
V.5.2. Résultats expérimentaux.....	120
V.5.2.1. Etude de la cathodoluminescence dans les échantillons $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$	121
a) Etude de l'effet d'indentation (déformation plastique).....	121
b) Etude de l'effet de l'hydrogène.....	123
V.5.2.2. Etude de la cathodoluminescence dans les échantillons CdTe.....	125
a) Etude de l'effet du recuit.....	125
b) Etude de l'effet de la polarité.....	126
c) Etude de l'effet du zinc.....	127
V.6. Validation du modèle	128
V.6.1. Confrontation avec un modèle mathématique.....	128
V.6.2. Validations expérimentales des résultats.....	129
V.6.3. Comparaison et discussion entre résultats simulés et expérimentaux.....	129
V.6.3.1. Cas des échantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{T}$	130
V.6.3.2. Cas des échantillons de CdTe.....	131
Conclusion	133
Conclusion générale et perspectives	135
Références	138
Annexes	
Annexe A: Principales propriétés des semiconducteurs: CdTe, ZnTe et CdS.....	147
Annexe B: Calcul des constantes aux limites.....	149

Introduction générale

L'interaction électron-matière est un moyen d'investigation utilisé depuis plusieurs décennies dans les semiconducteurs. C'est ce phénomène qui était à l'origine d'innombrables formes adaptées pour une grande variété de matériaux solides, dont l'injection de porteurs de charges à l'aide d'un faisceau électronique qui a permis l'étude des propriétés physiques des semiconducteurs à l'équilibre ou hors équilibre thermodynamique.

L'interaction des électrons du faisceau avec l'échantillon produit divers signaux pouvant être captés et analysés par le microscope électronique à balayage (MEB). Dans certains matériaux tels que les semiconducteurs et isolants, le faisceau d'électrons peut produire des photons qui sont émis par l'échantillon, c'est l'analyse de ces photons qui est à l'origine du phénomène de cathodoluminescence (CL). Celle-ci permet à la fois une étude qualitative du matériau quand elle est utilisée en imagerie, mais également une étude quantitative, car elle permet de déterminer les paramètres physiques du matériau tels que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, leur durée de vie, la vitesse de recombinaison en surface, etc..., paramètres très utiles pour la compréhension des effets des défauts sur les propriétés électriques et luminescentes du matériau.

La cathodoluminescence, comme accessoire dans un microscope électronique à balayage, est une technique de caractérisation non destructive, largement répandue de nos jours, et bien adaptée à la caractérisation des matériaux semiconducteurs, en particulier les composés II-VI.

Le tellure de cadmium est reconnu depuis un certain nombre d'années comme étant un semiconducteur d'un intérêt indéniable technologiquement ; ses propriétés ont déjà été largement utilisées dans le domaine de détection des rayonnements ionisants, en particulier en spectrométrie γ ainsi que celui des dispositifs optoélectroniques. Ceci grâce d'une part à son numéro atomique sa densité élevés, sa haute résistivité et d'autre part le gap fondamental direct qui autorise les recombinaisons radiatives.

L'objectif principal tracé pour cette thèse est d'étudier, d'une façon plus ou moins exhaustive, le phénomène de la cathodoluminescence dans les semiconducteurs II-VI, et plus particulièrement le tellure de cadmium (CdTe).

Le manuscrit est organisé en cinq chapitres :

Dans le chapitre I, nous avons fait un rappel des propriétés physiques caractérisant le matériau de tellure de cadmium ainsi que ses applications et intérêt technologiques.

Le chapitre II a été consacré à la présentation des principes de base des phénomènes de l'interaction électron matière appliqués au cas des semiconducteurs. Comme notre étude porte

sur la cathodoluminescence, nous nous sommes concentrés sur la présentation d'une description détaillée des principes de cette technique.

Dans le chapitre III, nous avons exposé les divers mécanismes de recombinaison des porteurs de charges. Nous avons présenté ensuite les différents types de défauts présents dans les semiconducteurs, et en particulier CdTe, l'objectif étant de pouvoir lier les caractéristiques physiques des défauts aux principaux paramètres influençant la cathodoluminescence.

Dans le chapitre IV nous avons développé, d'une manière détaillée, notre modèle physique qui permettra de calculer l'intensité totale du signal de cathodoluminescence (I_{CL}), et sur la base de simulation numérique on a analysé l'influence des paramètres les plus significatifs. Ce chapitre est complété ensuite par une étude des variations des propriétés physiques propres au tellure de cadmium en fonction de la température. Nous avons rajouté à cela une étude des effets thermiques dus à l'impact du faisceau électronique incident à la surface du matériau étudié.

Le chapitre V regroupe l'ensemble des résultats de simulation et de mesures de cathodoluminescence réalisés sur des échantillons de CdTe et $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ massifs, qui ont été analysés et discutés en détail.

La première partie de ce chapitre a été consacrée aux résultats de simulation réalisés sur CdTe à partir du modèle établi.

L'étude de I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents, est basé sur l'étude de l'effet des divers paramètres responsables de façon significative sur la variation de I_{CL} , que nous avons jugé comme étant les plus importants. L'ensemble de ces paramètres a été classé en trois catégories principales. La première concerne les paramètres liés à l'injection électronique: l'énergie, le courant et le diamètre du faisceau électronique primaire. La deuxième concerne l'influence des paramètres qualifiés de caractéristiques du matériau: paramètres de volume: longueur de diffusion des porteurs minoritaires, coefficient d'absorption, et concentration du dopage et paramètres de surface: vitesse de recombinaison en surface, densité de défauts, niveau énergétique et section efficace de capture. Dans la troisième catégorie de paramètres nous avons inclus les effets de la température. Dans la suite nous avons focalisé notre attention sur les effets thermiques (l'échauffement thermique et l'évolution de la température de surface irradiée) induits par le faisceau électronique sur l'intensité de cathodoluminescence. Ces effets pris en compte et ont été étudiés et discutés.

Une attention particulière a également été portée sur l'étude de l'évolution de la hauteur de barrière créée à la surface du semiconducteur soumis à une irradiation électronique. Nous avons mis en évidence les effets des variations de nombreux paramètres, qui affectent

différemment cette hauteur, qui sont non seulement liés à la surface du semiconducteur, mais également à son environnement et aux caractéristiques de l'irradiation.

Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons présenté les résultats expérimentaux obtenus à partir des mesures de cathodoluminescence effectuées sur deux types d'échantillons, il s'agit de CdTe et $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$, en prenant en compte les conditions dans lesquelles ont été réalisées. Dans cette partie, nous avons inclus une étude comparative relative aux résultats de mesure pour donner une vue aussi complète que possible des différentes conditions expérimentales.

La troisième partie de ce dernier chapitre a été consacrée à la confirmation des résultats théoriques et la validation de notre modèle. Une confrontation entre les résultats expérimentaux et résultats théoriques a permis de vérifier le bien-fondé de ces derniers.

A la fin, nous présentons notre conclusion générale, en insistant sur les points primordiaux à étudier. On présentera, également, quelques idées d'améliorations du modèle et proposerons quelques perspectives associées à ce travail.

Chapitre I

Rappels bibliographiques sur CdTe

Introduction

Dans ce chapitre nous allons décrire brièvement les semiconducteurs composés II-VI en mettant l'accent particulièrement sur le matériau CdTe : tellure de cadmium monocristallin, qui est au centre de ce travail. Nous présenterons l'ensemble de ses principales propriétés physiques qui seront utilisées au cours de notre étude. Enfin nous donnerons un résumé de ses principales applications technologiques.

Avant cela, un bref aperçu sur les semiconducteurs II-VI aidera à mieux situer notre matériau d'étude.

I.1. Les semiconducteurs II-VI

Les semiconducteurs, en général, sont des matériaux dont la conductivité électrique ($\sigma = 10^{-6}$ à $10^2 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) est intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sigma = 10^2$ à $10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et celle des isolants ($\sigma = 10^{-16}$ à $10^{-8} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). On peut classer les matériaux en conducteurs, semi-conducteurs et isolants par rapport à la largeur de leur bande interdite.

Les propriétés des semiconducteurs, dépendent fortement de leur pureté, de l'orientation et des irrégularités de leur structure, de la température et d'autres entités physiques et chimiques. Ces propriétés représentent leur avantage principal, puisqu'elles à l'origine de la fabrication de la plupart des composants électroniques et optoélectroniques ayant des caractéristiques très diversifiées.

Il y a plusieurs familles de composés semiconducteurs, dont trois d'entre elles sont les plus étudiées et les plus utilisées, à savoir les familles de semiconducteurs II-VI (CdTe, ZnS, CdSe,...), III-V (GaAs, InP, InSb,...) et IV-IV (SiGe, SiC,...).

Les semiconducteurs II-VI sont composés, d'un élément de la colonne II (Zn, Cd, ou Hg) et d'un élément de la colonne VI (O, S, Se ou Te) de la table périodique des éléments.

Les semiconducteurs II-VI ont été étudiés d'une façon intensive depuis le début des années 1980, l'importance de ces composés étant la possibilité de les utiliser dans les domaines de l'optoélectronique, de la conversion photovoltaïque et dans le domaine des détecteurs; CdHgTe pour les détecteurs infrarouge [1,2], CdZnTe et CdTe pour les détecteurs de rayon X et γ [3,4].

I.2. Le matériau tellurure de cadmium CdTe

Le tellurure de cadmium est un composé binaire, appartenant au groupe II B-VI A, avec un gap direct et un numéro atomique moyen élevé ($Z=50$). Ce semiconducteur est connu pour ses propriétés très importantes, on s'intéressera pour notre part, spécialement aux propriétés de luminescence, qui ne peuvent être comprises que dans un contexte global d'une compréhension de propriétés telles que : la structure cristalline du CdTe massif, ses caractéristiques électriques, optiques et thermiques.

I.3. Propriétés physico-chimiques du tellurure de cadmium

I.3.1. Structure cristalline

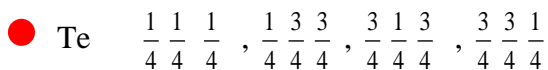
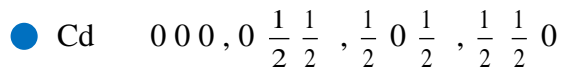
CdTe est un composé cristallin constitué de cadmium et de tellure. L'atome de cadmium étant de type II : cation possédant deux électrons de valence sur une orbitale s : $[\text{Cd}] = [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$. L'atome de tellure étant de type VI : anion possédant six électrons de valence sur des orbitales s et p : $[\text{Te}] = [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^4$.

CdTe massif existe sous deux formes cristallines:

I.3.1.1. Structure cubique de type sphalérite

La structure sphalérite (du type blende de zinc), la plus répandue, est la plus stable à la pression atmosphérique normale [5], est constituée par deux mailles cubiques à faces centrées, décalées l'une par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale du cube.

La maille élémentaire est constituée de quatre molécules de CdTe, les positions des atomes sont définies par les coordonnées suivantes (Figure I.1) :



Chaque atome possède un entourage de quatre atomes de l'autre constituant (espèce), placés aux sommets d'un tétraèdre régulier à une distance de $\sqrt{3}/4.a$, (a est le paramètre de la maille cubique, égale à 6.481Å à la température ambiante [6]).

Chaque atome de Te (respectivement Cd) disposé au centre d'un tétraèdre, a pour premiers voisins à 2.81Å les atomes de Cd (respectivement Te) situés aux sommets du tétraèdre.

La structure sphalérite n'a pas de centre de symétrie, ce qui confère au matériau une polarité cristallographique le long de l'axe $\langle 111 \rangle$ et entraîne, de ce fait, une variation des propriétés physiques et chimiques des faces (111) et $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ [5].

- Les plans (110) sont les plans de clivage privilégiés.
- Le groupe spatial de ce composé est $F\bar{4}3m$.
- Le caractère ionique des liaisons de CdTe, et le plus élevé des composés II-VI, de l'ordre de 0.717 sur l'échelle de Phillips [7].

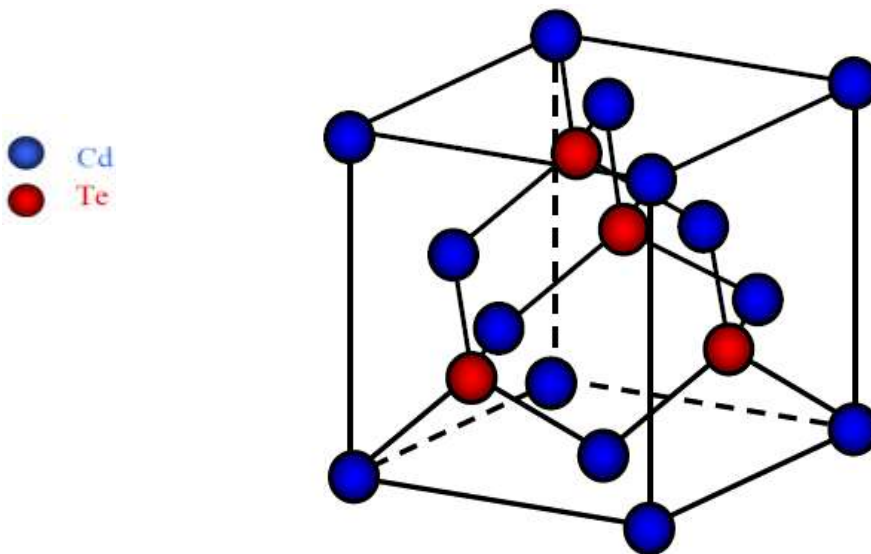


Figure I.1: Structure de la blende de zinc de CdTe.

I.3.1.2. Structure hexagonale de type würtzite

Le CdTe peut former des cristaux ayant la structure hexagonale de type würtzite, dans laquelle les deux sous-réseaux de Cd et Te composant le cristal sont hexagonaux compacts.

En effet cette structure a été observée dans des films minces de CdTe obtenus par plusieurs techniques [8].

La structure de la maille WZ n'est pas centrosymétrique et appartient au groupe d'espace $P6_3mc$. Dans cette structure les paramètres de maille du CdTe sont [9] :

$$a = 4.56 \text{ \AA}$$

$$c = 7.46 \text{ \AA}$$

Une des caractéristiques principales de la structure WZ est qu'elle ne possède pas de centre d'inversion. Les directions $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ ne sont donc pas équivalentes.

I.3.2. Structure des bandes d'énergie

Plusieurs méthodes, qui sont à la base de nombreux calculs, ont été réalisées pour la détermination de la structure de bandes d'énergie des semiconducteurs. Trois méthodes sont utilisées fréquemment : la méthode d'ondes planes orthogonalisées [10], la méthode du pseudopotentiel [11] et la méthode k.p [12]. La figure I.2 montre la structure des bandes d'énergie, la plus connue, du CdTe.

Les états 5p du tellure forment la bande de valence, les états 5s de cadmium constituent la bande de conduction. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent au centre de la zone de Brillouin (point Γ sur la figure I.2). L'absorption et l'émission de lumière peuvent alors se faire avec conservation du vecteur d'onde sans impliquer des interactions avec d'autres quasi particules comme les phonons.

La structure électronique de bande montre que CdTe est un semiconducteur à gap direct, avec une largeur de la bande interdite E_g qui dépend de la température. Selon les auteurs, elle peut être exprimée par :

- ❖ Soit par la formule [13] : $E_g = 1.6063 - 1.64 \times 10^{-6} T^2$
- ❖ Soit par la formule empirique [14]: $dE_g/dT = -3.0, -3.5$ ou $-5.6 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$.

A température ambiante et sous pression atmosphérique normale, la valeur du gap est de 1.52 eV.

à 2 K, $E_g = 1.606 \text{ eV}$ [15,16].

à 300 K, $E_g = 1.520 \text{ eV}$ [17].

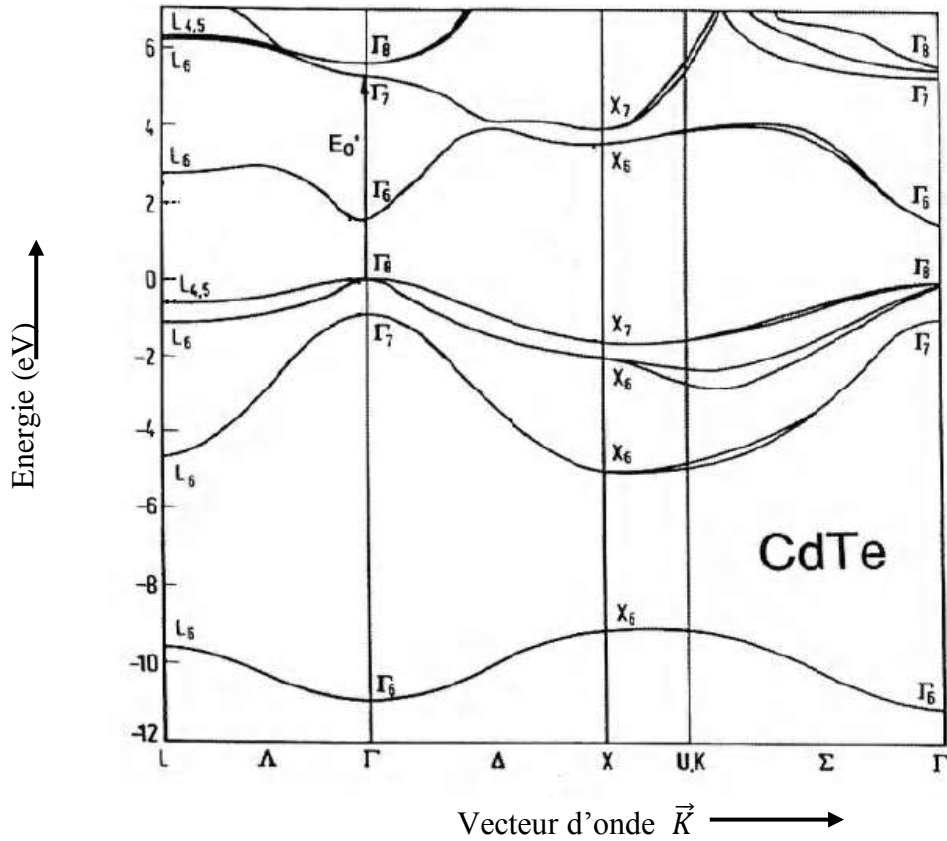


Figure I.2 : Structure électronique de bande d'énergie de CdTe déterminée par calcul du pseudo potentiel empirique [18].

I.3.2.1. Masses effectives

On introduit la notion de masse effective m^* , afin de tenir compte de la courbure de bande que voit chaque porteur de charge. Dans l'approximation du potentiel parabolique, chaque bande i possède, au voisinage de $\vec{k} = 0$, une énergie :

$$E(K) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (I.1)$$

où \hbar représente la constante de Planck réduite. On définit m^* par rapport à la masse de l'électron au repos m_0 . Par exemple, les électrons dans la bande de conduction de CdTe ont une masse effective : $m_e^* = 0,0909 m_0$ [19].

Le tableau I.1 regroupe les différentes valeurs des masses effectives des trous qui ont été déterminé par la méthode de résonance cyclotronique [20] selon les directions cristallographiques: [100], [110] et [111].

Directions	$\frac{m_{lh}^*}{m_0}$	$\frac{m_{hh}^*}{m_0}$	Références
[100]	0.12±0.01	0.6±0.01	[20]
[110]	0.12±0.02	0.81±0.05	[21]
[111]	0.11±0.01	0.69±0.02	[20]

Tableau I.1 : Masses effectives des trous dans CdTe. Trous légers (lh, pour light-holes) et trous lourds (hh, pour heavy-holes).

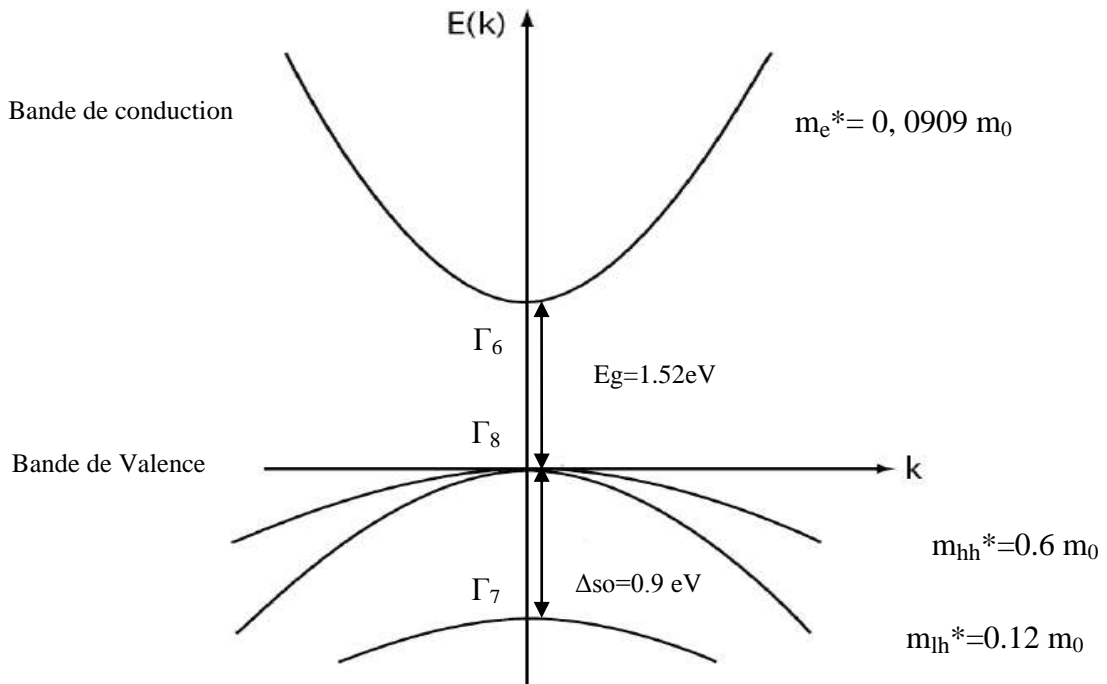


Figure I.3 : Représentation simple de la structure de bande du CdTe au voisinage du centre Γ de la zone de Brillouin (Les valeurs du gap E_g , du couplage spin-orbite Δ_{SO} et des masses effectives m^* sont indiquées).

I.3.3. Propriétés électriques

CdTe est le seul matériau II-VI, avec HgTe, qui présente les deux types de conductivité n ou p suivant les conditions de croissance, le traitement après croissance et le dopant incorporé. Le changement de type est aussi possible lors des recuits thermiques, notamment sous atmosphère de Cd [22].

D'après Nobel [23], le comportement de type p est dû à des défauts accepteurs associés à des lacunes de cadmium, alors que le comportement de type n est dû à des

défauts donneurs associés à un excès de cadmium. Les accepteurs sont soit des atomes de tellure interstitiels ou des lacunes de cadmium, les donneurs sont soit des atomes de cadmium interstitiels ou des lacunes de tellure.

Selon une recherche bibliographique on trouve des résistivités à la température ambiante comprise entre 10^{-2} et $10^7 \Omega.cm$, avec des concentrations en porteurs entre 10^{15} et $10^{17} cm^{-3}$.

Les mobilités des trous sont de l'ordre de 50 à 100 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$, et celles des électrons de 500 à 1050 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$ [24], les paramètres qui influencent le plus la mobilité des porteurs de charges sont la température et la densité des impuretés [25].

La diffusion des porteurs de charge par les imperfections du réseau cristallin, les impuretés et les défauts étendus entraînent une réduction de la mobilité de ces derniers.

La longueur de diffusion des trous dans le matériau CdTe de type n diminue de 5 à 0.18 μm lorsque la concentration n des porteurs augmente de 2×10^{13} à $8 \times 10^{17} cm^{-3}$ [26,27], selon la loi : $\text{Log}(L_h) \approx 4.9 - 0.315 \log(n)$ [28].

Où : L_h est exprimé en μm et n en cm^{-3} .

En revanche, la longueur de diffusion des électrons dans CdTe de type p est de 0.4 à 2.0 μm pour des concentrations variant de 1×10^{15} à $8 \times 10^{16} cm^{-3}$ [29,30].

Les durées de vie (τ), des porteurs de charge minoritaires ont les mêmes variations que les longueurs des diffusion en raison de la relation qui les lie ($L=(D\tau)^{1/2}$), où D est la constante de diffusion.

La durée de vie des trous montre une diminution allant de 20 à 0.5ns en fonction de l'augmentation de la concentration n des électrons dans n-CdTe [31,32].

La durée de vie des électrons augmente de 10 à 30 ns en fonction de l'augmentation de la concentration p des trous dans p-CdTe [33].

I.3.4. Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semiconducteurs sont fortement liées à leurs structures électroniques. Les propriétés optiques d'un matériau recouvrent principalement son indice de réfraction et son coefficient d'absorption. Remarquons que ces propriétés sont primordiales pour les composants optoélectroniques, puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant.

D'après la largeur du gap direct du CdTe, $E_g=1.52 eV$ à $T=300K$ et la longueur d'onde à laquelle les photons devraient être émis, égale à $\approx 816 nm$, le seuil d'absorption optique de ce matériau se trouve dans le domaine infrarouge.

La structure de bande qui permet des transitions verticales radiatives très important entre la bande de valence et la bande de conduction lui confère une efficacité d'absorption optique et de luminescence remarquable.

Différentes applications utilisent les propriétés optiques de ce matériau, à savoir la fabrication des détecteurs de rayons γ , et des cellules solaires.

Les photons arrivant à la surface d'un matériau sont réfléchis ou transmis. Une fois qu'ils ont pénétré dans celui-ci, des phénomènes de diffusion peuvent avoir lieu avec plus ou moins d'efficacité selon leur énergie. Dans le cas d'un matériau semiconducteur, le matériau sera transparent pour les photons d'énergie inférieure à E_g , tandis que ceux d'énergie supérieure pourront être absorbés et engendrer une paire électron-trou. Les coefficients d'absorption α et de réflexion R sont calculés en fonction de la longueur d'onde λ à partir de l'indice de réfraction complexe donné par :

$$\tilde{n} = n - ik(\lambda) \quad (I.2)$$

Où k est le coefficient d'extinction, ou d'atténuation.

❖ Le coefficient d'absorption α est défini par :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (I.3)$$

❖ L'indice de réfraction n , de CdTe, varie en fonction de la longueur d'onde λ selon la formule suivante [34]:

$$n^2 = 5.68 + \left[\frac{1.53\lambda^2}{\lambda^2 - 0.366} \right] \quad (I.4)$$

où λ est exprimé en μm .

On obtient : $n = 2.82$ pour $1.06 \mu\text{m}$, $n = 2.75$ pour $1.40 \mu\text{m}$ et $n = 2.67$ pour $10.6 \mu\text{m}$.

❖ Le coefficient de réflexion R à 10.6μ est égal à 20.7%

❖ Le coefficient d'absorption optique α est égal à 10^4cm^{-1}

❖ Constantes diélectriques :

A $T=300 \text{K}$, les valeurs des constants diélectriques optiques ϵ_∞ et statique ϵ_s sont égales à [35] :

$$\epsilon_\infty = 7.1$$

$$\epsilon_s = 10.7$$

I.3.5. Propriétés thermiques

Les principales propriétés thermiques sont données par les coefficients suivants [34]:

- ❖ Conductivité thermique à 300K: $\lambda = 0.075 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- ❖ Coefficient linéaire d'expansion thermique à 300K : $\alpha = 4.67 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
- ❖ Température de fusion : $T_f = 1092 \text{ }^\circ\text{C}$
- ❖ Chaleur spécifique à 300K : $C = 0.2082 \text{ J. g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

Les principales caractéristiques physico-chimiques des composés CdTe [36-40], ZnTe [41-43] et CdS [44-47] sont présentées dans le tableau de l'annexe A.

I.4. Applications et intérêts technologiques

Le CdTe n'est pas un matériau nouveau, il a connu déjà d'innombrables applications. Les domaines d'applications de CdTe sont extrêmement variés.

Le CdTe est un matériau présentant un intérêt considérable pour beaucoup d'applications dû à ses propriétés structurales, optiques et électriques. Les applications du CdTe sont donc nombreuses et la littérature est abondante sur le sujet.

Le CdTe a d'abord été utilisé en détection infrarouge grâce à ses propriétés optiques : il est transparent au rayonnement infrarouge entre 1 et $40 \mu\text{m}$. Il permet de réaliser des fenêtres d'entrée filtrant très efficacement les rayonnements de longueurs d'ondes indésirables.

Le CdTe a déjà donné lieu à des applications dans le domaine de l'optique infrarouge [48], de la détection des rayons X et γ [49-51] ainsi que dans la réalisation de cellules photovoltaïques [52-54].

Mais, plus récemment, des applications en optoélectronique ont été également visées avec ce matériau, principalement à cause de ses propriétés électriques et optiques, car il s'agit d'un semiconducteur à bande interdite directe ($E_g = 1.5 \text{ eV}$) et que sa résistivité peut être ajustée par dopage intrinsèque (par des lacunes de cadmium ou du tellure en position interstitiel ou inversement des lacune de tellure ou du cadmium en position interstitiel) ou extrinsèque (avec des dopants comme Cl, V, Sn ou Ge) [55-57].

Les potentialités majeures du CdTe pour ces applications résident, en outre, dans sa disponibilité d'être utilisé comme substrat massif de grand diamètre ainsi que la possibilité de réaliser des croissances épitaxiales de très bonne qualité en couches minces.

I.4.1. Applications du CdTe massif

Le tellurure de cadmium et ses composés ternaires, CdZnTe et HgCdTe, sont des matériaux prometteurs pour de nombreuses applications. Ils sont particulièrement utilisés pour le développement de détecteurs à :

1) Rayonnement X (La tomographie X médicale : techniques de caractérisation d'imagerie tridimensionnelle (3D) qui consiste à réaliser des images donnant l'intérieur d'objets (vivants,...) à partir de mesures effectuées depuis l'extérieur.

2) Rayonnement gamma (imagerie cardio-vasculaire et thyroïdienne) et appareils photoréfractifs pour l'interférométrie ultrasonique et holographique (inspection non-destructive dans l'aviation). Sato et al. [58] ont publié une revue des différentes applications du CdTe. De plus, le CdTe phoréfractif [59,60] est utilisé comme support d'enregistrement holographique (photo tridimensionnelle) en temps réel [61], dans le domaine proche infra rouge (1.06-1.55 μm). Cette dernière longueur d'onde est bien appropriée aux télécommunications (fibres optiques).

Depuis de nombreuses années, le choix s'est porté sur le CdTe et le CdZnTe comme matériaux de détection. Actuellement, et essentiellement au niveau de la recherche, ces deux matériaux constituent les matériaux de référence pour les détections X et γ .

Les détecteurs à rayonnement X à base de CdTe, utilisés pour la médecine nucléaire présentent de nombreux avantages [62] :

- ✓ l'amélioration de la qualité des images à rayons X.
- ✓ la diminution des doses de rayons X sans perte de contraste.

Dans le domaine de l'imagerie médicale (mammographie X, radiographie X et scintigraphie γ), de nombreuses études ont porté sur le CdTe et le CdZnTe comme matériaux de base [63,64]. Tous deux possèdent les paramètres physiques nécessaires pour leur utilisation en médical.

En effet, le matériau semiconducteur utilisé est choisi en fonction de ses performances de détection qui sont :

- ❖ Sa densité et son numéro atomique doivent être élevés. Ces deux propriétés confèrent au semiconducteur un bon pouvoir d'arrêt des photons incidents et permettent d'améliorer l'efficacité quantique du détecteur (85% du rayonnement, pour une énergie maximum de 125keV, est arrêté par 1 mm d'épaisseur de CdTe).
- ❖ La largeur de sa bande interdite, qui doit être importante, comme c'est le cas de CdTe et CdZnTe, pour lui permettre d'être utilisé à température ambiante pour limiter la génération thermique de porteurs de charge [65].
- ❖ Une résistivité élevée pour lui permettre de limiter le bruit dû aux fluctuations du courant d'obscurité. (la résistivité de CdTe est supérieure à $10^9 \Omega\cdot\text{cm}$) [66].

❖ Ses propriétés de transport : mobilité et durée de vie des électrons doivent être suffisantes pour une meilleure efficacité de collecte et donc une meilleure sensibilité.

Ces détecteurs à base de semiconducteurs ont une bonne efficacité d'absorption des photons incidents, pour la radiographie X ont pour objectif de fonctionner en mode comptage de photons.

De plus, les détecteurs à rayonnement X (application visée : scanner et radiographie numérique X avec une énergie moyenne de 50keV sont très couramment utilisés pour le diagnostic médical, le CdTe ou le CdZnTe, semiconducteurs les plus étudiés pour l'imagerie, montrent qu'une nouvelle génération de détecteurs à base de semiconducteurs pour l'imagerie médicale tend à se développer pour remplacer les systèmes actuels à base de cristaux scintillateurs (NaI (Tl), CsI (Tl) ou CsI (Na)).

Certains matériaux (Si, Ge...) possèdent des caractéristiques intéressantes, mais seul le CdTe et le CdZnTe donnent le meilleur compromis pour la détection des rayons X de haute énergie : bonne capacité d'absorption, bonne résistivité, bonnes propriétés de transport et une qualité cristalline suffisante. Nous remarquons par exemple que le silicium, dont la maîtrise technologique permet l'obtention d'une très bonne qualité cristalline, possède un faible pouvoir d'arrêt des photons du fait de son faible numéro atomique. D'autre part, le Germanium possède de bonnes propriétés de transport mais en contre partie une faible résistivité, qui l'empêche d'être utilisé à température ambiante, car le courant de fuite serait trop élevé.

La combinaison, pour CdTe, de son numéro atomique moyen élevé ($Z=50$), de sa largeur de bande interdite et du produit mobilité-durée de vie ($\mu\tau$) pour les électrons et les trous et sa résistivité donnent à ce matériau un ensemble de propriétés uniques pour son utilisation comme détecteur nucléaire. En effet son apparition en médecine nucléaire (détection d'infection dentaire, détection de l'infarctus du myocarde, ...) a été d'un secours avoué dans ce domaine. En outre, l'exigence ascendante de la technologie demande une performance plus grande de la qualité cristalline, qui dépend principalement de la réduction de la densité des pièges (concentrations en impuretés résiduelles), des défauts et de la déviation par rapport à la stœchiométrie, qui exige une grande homogénéité de composition [67].

Les détecteurs de tellure de cadmium dopé au chlore (CdTe: Cl) sont de bons candidats pour remplacer les détecteurs à base de scintillateurs pour les applications en imagerie médicale par rayons X pour une énergie comprise entre 20 et 60 keV. Ils offrent à la fois une forte sensibilité et une excellente résolution spatiale et une excellente résolution en énergie [68,69].

Afin de satisfaire le critère d'absorption des photons incidents par le semiconducteur en imagerie médicale, le matériau est fabriqué sous forme de lingots monocristallins.

I.4.2. Applications du CdTe en couches minces

Depuis plusieurs années, un effort de recherche important a été développé dans les domaines des applications des semiconducteurs à large bande interdite, tel que le CdTe, en optoélectroniques et spintronique [28].

Le CdTe est actuellement un matériau plus important pour les fenêtres infrarouges à cause de la forte transparence sur un domaine bien approprié pour les applications IR courantes (0.9 à 30 μ m), et est déjà commercialisé depuis longtemps.

La croissance hétéroépitaxiale de couches de bonne qualité de CdTe sur un substrat de GaAs présente un intérêt considérable à cause des applications visés qui sont :

- L'optoélectronique intégrée et les capteurs.
- Nouveaux composants optiques : détecteurs, commutateurs.
- Conversion de l'énergie solaire.

En effet, CdTe est un matériau très prometteur pour la fabrication des cellules solaires à cause de la bonne adaptation de la bande interdite qui se situe au milieu du spectre solaire. Des efficacités de conversion de l'ordre de 20.4% - 21% [70,71] sont régulièrement atteintes avec les cellules CdS-CdTe, qui concurrencent les autres matériaux prometteurs comme CuInGaSe₂ (20.5%) ou le silicium amorphe (13.4%) [71].

Une couche mince de CdTe avec une épaisseur d'environ de 2 μ m absorbera presque 100% du rayonnement solaire incident [72].

CdTe sert aussi comme substrat [73] pour les couches minces du composé HgCdTe qui joue un rôle capital dans la technologie de la détection infrarouge.

La détection et l'imagerie infrarouge (IR) dans les deux fenêtres optiques de la transmission atmosphérique : 3-5 μ m et 8-12 μ m [74] constitue un axe d'une grande importance dans les applications militaires (dispositif pour imagerie infrarouge, vision nocturne...) et industrielles (vision, sécurité, surveillance,...).

Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les propriétés générales du semiconducteur CdTe, un semiconducteur de la famille II-VI. En raison de ses propriétés variées (structurales, électriques, optiques....) CdTe possède une multitude d'applications technologiques telles que : les détecteurs à rayonnement X et γ , la fabrication des cellules solaires, les détecteurs infrarouges.

Chapitre II

Interaction électron-matière

Introduction

Le but de ce deuxième chapitre est d'introduire, d'une manière qualitative et simple, quelques éléments de base liés à l'interaction électron-matière en général et électron-semiconducteur en particulier. Ces éléments permettent de comprendre certains aspects expérimentaux et théoriques abordés dans les chapitres suivants.

Ce chapitre est divisé en deux principales sections :

La première section est consacrée à une brève description de certains phénomènes qui accompagnent l'irradiation électronique de la matière, telles que l'émission des électrons secondaires, des électrons rétrodiffusés et l'émission de photons X, ainsi que la pénétration des électrons. Dans la suite, nous présenterons plus particulièrement la technique de la cathodoluminescence.

Dans la deuxième section, nous nous intéresserons à une description plus spécifique du comportement d'un semiconducteur vis à vis d'une injection électronique. Cette description inclura la fonction de génération des paires (e-h), ainsi que la fonction de dissipation d'énergie normalisée.

II.1. Phénomènes d'interaction électron-matière

Beaucoup de techniques d'analyse de surfaces font appel à des faisceaux d'électrons comme la microscopie électronique à transmission, la microscopie électronique à balayage, la micro-analyse par faisceau d'électrons, la spectroscopie d'électrons Auger, la spectroscopie de photoélectrons X ou encore la spectroscopie de perte d'énergie des électrons. Tous ces domaines ont besoin d'une connaissance précise de l'interaction des électrons avec la matière pour aboutir à une analyse quantitative.

Le principe du microscope électronique à balayage (MEB) est basé sur le déplacement contrôlé d'un faisceau d'électrons sur un échantillon à caractériser.

Les tensions d'accélération se situent dans la gamme de 0.5 kV à 40 kV pour des instruments commercialement disponibles. Le diamètre du faisceau d'électrons à la surface de l'échantillon (diamètre de la sonde d'électrons) se situe typiquement dans la gamme de 10 nm à 100 nm et il varie en fonction de l'énergie et du courant du faisceau.

Pour la détection des signaux, plusieurs types de détecteurs peuvent être disposés à l'intérieur de la chambre contenant l'échantillon. Ceux-ci incluent le détecteur d'électrons secondaires, le détecteur d'électrons rétrodiffusés, le détecteur de rayons-X et l'appareillage de mesure de cathodoluminescence.

Les interactions électrons-matière peuvent donner de l'information sur la nature de la topologie, la composition, la cristallographie, les propriétés électriques et beaucoup d'autres caractéristiques de l'échantillon.

L'interaction des électrons du faisceau avec l'échantillon produit divers signaux pouvant être captés et analysés par le microscope (figure II.1).

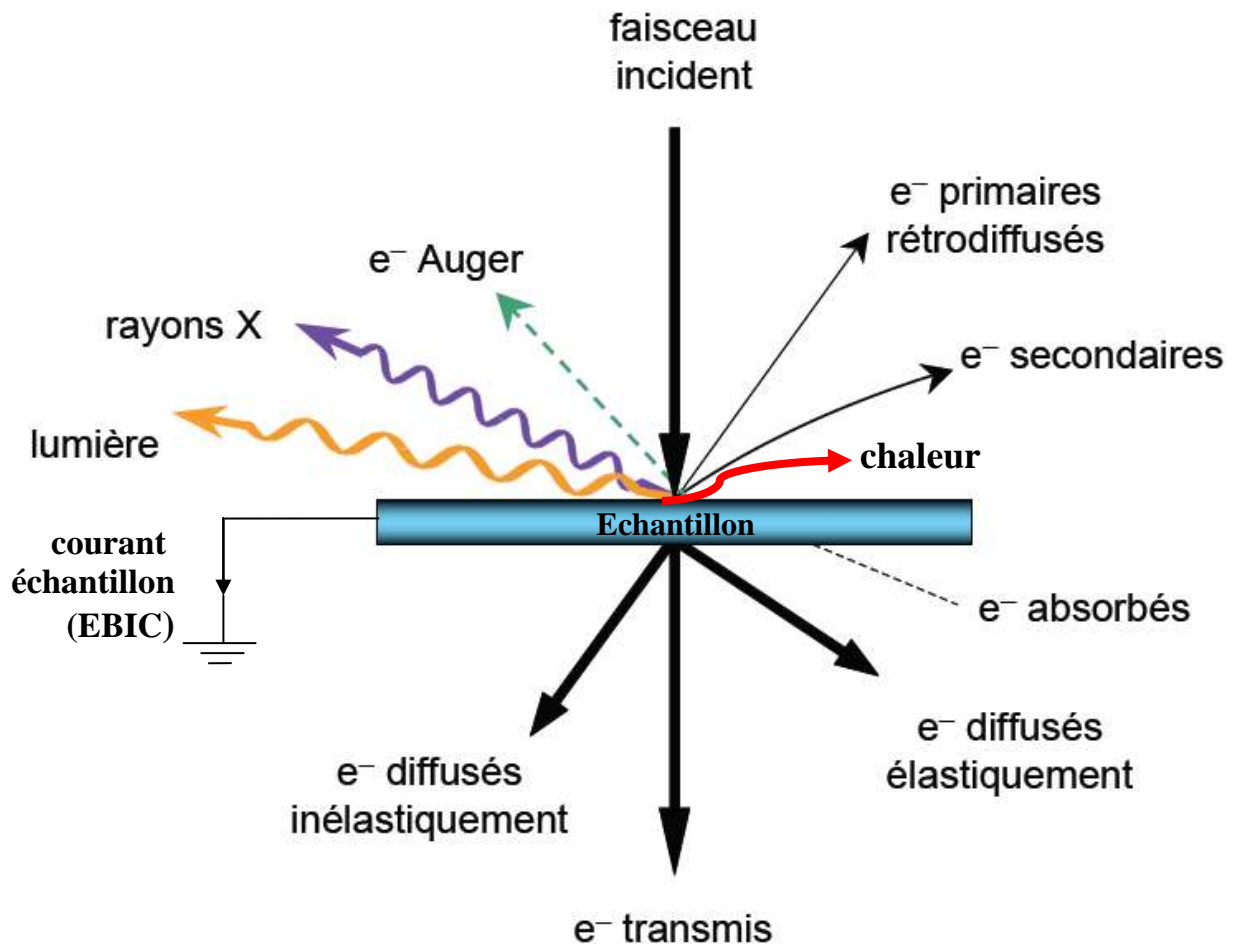


Figure II.1 : Représentation des principales émissions (signaux) dues aux interactions d'un faisceau d'électrons avec un échantillon cible.

II.2. Processus de perte d'énergie des électrons

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

II.2.1. La diffusion élastique

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

II.2.2. La diffusion inélastique

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

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

II.2.2.1. Emission électronique

a- Electrons secondaires

Les électrons secondaires résultent de collisions inélastiques des électrons primaires avec les électrons des couches externes des atomes de la cible (électrons faiblement liés), ils sont définis comme des électrons s'échappant de l'échantillon avec une énergie inférieure à 50 eV. La génération d'électrons secondaires se fait le long du parcours des électrons primaires dans le volume d'interaction. L'imagerie en électrons secondaires est ainsi largement employée dans l'analyse par MEB pour visualiser la topographie de l'échantillon.

b- Electrons rétrodiffusés

Un électron rétrodiffusé est un électron qui s'échappe de la surface de l'échantillon avec une énergie plus élevée que 50 eV. Ce type d'électrons représente des électrons primaires (une fraction des électrons primaires) du faisceau qui subissent ou non des collisions à fort angle et sortent de l'échantillon sans perdre une grande quantité d'énergie. Le signal détecté dépend de la composition chimique de l'échantillon. Ainsi une image en électrons rétrodiffusés peut être obtenue sur le moniteur du MEB. Il est alors possible d'observer des différences dans des phases chimiques en utilisant cette technique.

c- Emission d'électrons Auger

Un électron primaire peut arracher un électron de cœur à un atome de la cible. La lacune peut être comblée par un des électrons des couches les plus externes. L'énergie libérée lors de ce processus permet à un troisième électron de s'arracher à l'attraction du noyau. Ce processus de désexcitation est le processus Auger et le troisième électron émis est un électron Auger. L'énergie d'émission de cet électron porte en elle une information sur la composition chimique ainsi que sur le type de liaison chimique de la cible.

II.2.2.2 Emission de photons

Lorsqu'une collision inélastique survient, des photons caractéristiques sont souvent émis de l'échantillon. Dépendant de l'énergie de ce photon, le spectre peut s'étendre des rayons-X à l'infrarouge.

a- Emission de photons X

Un électron primaire possède une énergie relativement importante, et peut arracher un électron de cœur d'un atome de la cible, un électron du niveau supérieur vient combler la lacune créée. L'atome excité tend à retrouver un état plus stable par un processus de désexcitation radiatif (processus complémentaire de l'émission Auger), mettant en jeu l'émission d'un photon X.

L'irradiation électronique d'un matériau, s'accompagne donc de l'émission de photons X à des énergies bien définies et caractéristiques des atomes composant la cible.

b- Rayonnement de freinage (bremsstrahlung)

Au cours de leur ralentissement dans le champ électrostatique des noyaux atomiques de la cible, les électrons primaires perdent continuellement de l'énergie cinétique et émettent un rayonnement électromagnétique appelé rayonnement de freinage ou plus communément bremsstrahlung. Le bremsstrahlung forme un spectre continu qui s'étend de zéro jusqu'à l'énergie des électrons primaires.

c- Cathodoluminescence

Dans certains matériaux tels que les semiconducteurs et isolants, le faisceau d'électrons peut produire des photons qui sont émis par l'échantillon. Les électrons du faisceau peuvent exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction, générant ainsi un trou dans

la bande de valence. Dépendant du type de semiconducteur ou isolant, un photon peut être émis quand un électron excité de la bande de conduction se recombine avec un trou dans la bande de valence. L'énergie du photon est déterminée par l'énergie séparant la bande de valence et la bande de conduction du matériau. Ainsi, les photons émis sont typiquement dans la gamme du spectre allant de l'infrarouge aux ultra-violets. La technique de cathodoluminescence est basée sur l'analyse de ces photons. Cette technique est utilisée pour caractériser des défauts et des propriétés électriques dans des semiconducteurs.

II.3. Volume d'interaction

Les électrons incidents pénètrent dans la matière en empruntant des parcours aléatoires jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique. Le lieu de l'ensemble des interactions électron - matière est appelé : volume d'interaction ou "poire" d'interaction (volume de génération). Les dimensions de ce volume dépendent fortement de l'énergie incidente et du nombre atomique du matériau.

II.4. Parcours (Trajectoire) des électrons dans la matière

La trajectoire d'un électron peut être décrite comme une succession de libres parcours rectilignes formant des angles de diffusion dépendant des interactions de cet électron avec la matière. Il s'agit de la distance parcourue par un électron dans un matériau jusqu'à ce qu'il perde toute son énergie. La profondeur du volume d'interaction est appelée profondeur de pénétration des électrons.

La distance parcourue réelle est bien plus grande que la distance séparant le point d'entrée du point d'arrivée (où l'électron a perdu toute son énergie). On définit alors la profondeur de pénétration R_e qui correspond à la distance maximale moyenne parcourue par un électron.

Deux types d'approche sont utilisés pour calculer la trajectoire des électrons dans le matériau : l'un est une approche numérique (la méthode de Monte-Carlo), l'autre, est une approche analytique.

La figure II.1 représente la trajectoire de 25 électrons primaires simulés par la méthode de Monte-Carlo par CASINO, dans le tellure de cadmium sous incidence normale.

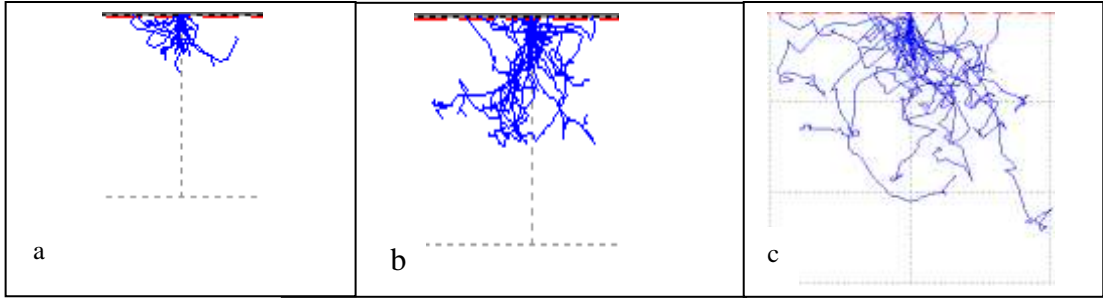


Figure II.1: Trajectoires de 25 électrons primaires simulées par la méthode de Monte-Carlo dans un substrat de CdTe pour différentes énergies d'accélération : a) 1 keV, b) 10 keV, c) 20 keV.

En général, la profondeur de pénétration maximale est donnée par l'expression [75] :

$$R_e = \left(\frac{K}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad (\text{II.1})$$

Où K et α sont des paramètres dépendant du numéro atomique du matériau et de l'énergie des électrons incidents, ρ est la densité du matériau et E_0 l'énergie du faisceau incident.

La plupart de ces profondeurs de pénétration sont déterminées expérimentalement, la valeur de α est comprise entre 1.5 et 1.7 [76].

Plusieurs expressions semi-empiriques existent dans la littérature pour calculer la profondeur de pénétration (Grüen, 1956 ; Everhart et Hoff, 1971 ; Kanaya et Okayama, 1972). Nous donnons dans ce qui suit quelques résultats de la littérature.

- **Grüen** trouve l'expression de R_e à partir des travaux concernant la dissipation d'énergie des électrons en fonction de la profondeur de pénétration dans l'air, cette expression est donnée par la relation suivante [77] :

$$R_G(\mu m) = \frac{4.57 \times 10^{-2}}{\rho} E_0^{1.75} \quad (\text{II.2})$$

Où ρ (g/cm^3) est la masse volumique et E_0 (keV) est l'énergie incidente.

- **Kanaya et Okayama** donnent le parcours électronique par [78] :

$$R_{K-O}(\mu m) = 276 \cdot 10^{-4} \frac{A}{\rho Z^{0.889}} E_0^{1.67} \quad (\text{II.3})$$

Où ρ (g/cm^3) est la masse volumique du matériau, A et Z sont, respectivement, la masse atomique et le nombre atomique, et E_0 (keV) est l'énergie incidente des électrons.

Cette relation est la plus connue et la plus utilisée, elle est valable pour des énergies d'incidence comprises entre 10 et 1000 keV, et pour un large domaine de numéro atomique Z .

La figure (II.2) montre une comparaison entre le parcours obtenu par le modèle de Grüen et le modèle de Kanaya et Okayama.

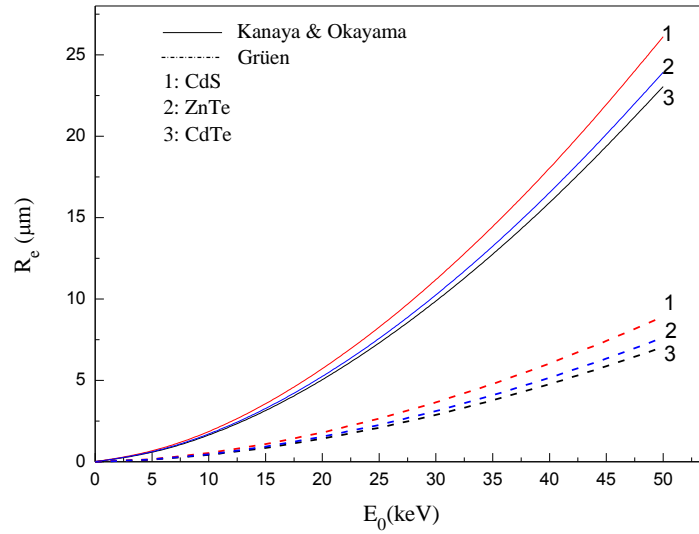


Figure II.2: Variation de la profondeur de pénétration du faisceau électronique dans le CdS, ZnTe et CdTe en fonction de la tension d'accélération, d'après les modèles de Grün et de Kanaya-Okayama.

II.5. Perte d'énergie de l'électron incident (due aux collisions)

La perte d'énergie par unité de longueur, encore appelée pouvoir d'arrêt ou transfert d'énergie linéique, est donnée par la formule de Bethe [79]:

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

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

Le parcours peut donc être relié à la perte d'énergie par [80] :

$$R_e = \int_{E_0}^0 \left(\frac{dE}{dS}\right)^{-1} dE \quad (\text{II.5})$$

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

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

- Soit par la formule de Berger et Seltzer [81]:

$$J \text{ (keV)} = (9.76 Z + 58.5 Z^{-0.19}) 10^{-3} \quad (\text{II.6})$$

- Soit par la formule de Zeller [82] :

$$J(eV) = 10.04Z + 8.25Ze^{\left(\frac{-Z}{11.22}\right)} \quad (\text{II.7})$$

Pour le CdTe la relation (II.6) donne $J=515.82$ eV.

La figure II.3 représente l'évolution de la perte d'énergie par unité de longueur d'un électron énergétique selon Bethe.

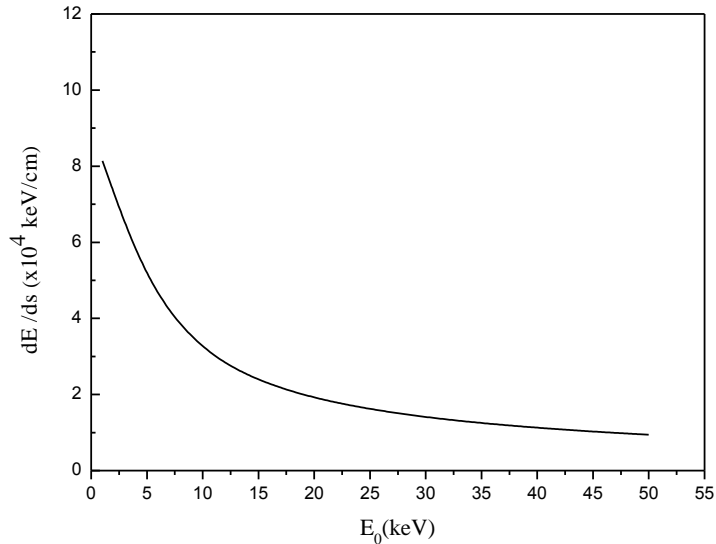


Figure II.3 : Evolution de la perte d'énergie par unité de longueur d'un électron énergétique selon Bethe dans un échantillon de CdTe.

II.6. Cathodoluminescence dans les semiconducteurs

II.6.1. Définition de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence (CL) est l'émission de lumière par un solide soumis à un bombardement électronique. Elle représente un des modes de fonctionnement du microscope électronique à balayage, qui sont :

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

II.6.2. Techniques de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence dans un microscope électronique à balayage (MEB) est une technique de microcaractérisation non destructive qui utilise l'émission de photons dans le domaine visible et proche infra-rouge, d'un échantillon (solide organique, isolant ou

semiconducteur) soumis au bombardement d'un faisceau électronique. Elle permet l'observation de défauts et d'hétérogénéités présentes dans les matériaux et composants de l'optoélectronique. Plus qu'une simple technique d'observation, c'est un outil analytique très utile pour la compréhension des effets de ces défauts sur les propriétés électriques et luminescentes du matériau.

II.6.3. Principe de la cathodoluminescence

Les mécanismes conduisant à cette émission de lumière peuvent être regroupés selon trois étapes principales :

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

II.6.4. Applications de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence est un phénomène technologique très important qui, trouve ses applications dans un large domaine d'instruments modernes [75], par exemple les tubes à rayons cathodiques (CRT), les écrans d'affichage (monitor displays), les écrans fluorescents...

Dans le domaine de la science des matériaux, la cathodoluminescence permet de mettre en évidence les variations spatiales des propriétés optiques locales d'un matériau non métallique et conduit à une technique de caractérisation couramment utilisée pour l'étude des propriétés locales des matériaux semiconducteurs et les isolants.

Les spectromètres de CL sont typiquement combinés à des microscopes électroniques à balayage (MEB) qui possèdent une capacité de balayage fin et une grande résolution spatiale permettant l'analyse d'objet jusqu'à l'échelle nanométrique [83-85].

La résolution spatiale de la cathodoluminescence est déterminée principalement par trois facteurs qui sont [86] : la taille de la sonde électronique, la diffusion des porteurs créés dans l'échantillon et le volume d'émission des photons (volume de génération). Ce dernier peut varier du nanomètre cube (nm^3) au micromètre cube (μm^3) [87].

En effet, cette technique présente l'intérêt de pouvoir obtenir une information résolue en profondeur via une augmentation de la valeur de la tension d'accélération. Certains microscopes

électroniques en transmission à balayage (STEM) sont équipés d'un système de détection de cathodoluminescence.

Les matériaux massifs ne sont pas les seuls à pouvoir être étudiés par cathodoluminescence. L'élaboration de couches épitaxiées, et surtout de puits, fils et boîtes quantiques semiconducteurs, a conduit à un fort accroissement de son utilisation, tout d'abord en raison de la possibilité d'obtenir facilement des images avec une résolution spatiale bien supérieure à celles obtenues en photoluminescence. De plus, l'efficacité de luminescence des nanostructures est bien souvent supérieure à celle des matériaux massifs, du fait du confinement quantique des porteurs. Cela permet de s'affranchir en grande partie de l'influence, souvent néfaste, des surfaces libres et autres centres de recombinaison non radiatifs.

II.6.5. Les différents modes d'acquisition de cathodoluminescence

Les modes d'utilisation de la CL peuvent être classés en deux catégories:

- ❖ La détection et l'étude globale (toute la gamme des longueurs d'onde) dans le but de la formation d'une image.
- ❖ La détection et l'étude spectrale sélective pour réaliser une analyse monochromatique et une identification spatiale des différentes transitions.

Parmi les utilisations les plus fréquentes de la cathodoluminescence, on distingue:

a) Formation d'une image :

Dans l'étude globale, la lumière est directement collectée sur un photomultiplicateur, le signal électrique alors généré porteur de l'information spatiale de la luminescence permet de constituer une image de l'échantillon. La cathodoluminescence permet de visualiser en mode image la répartition spatiale des niveaux responsables de la transition radiative ; les régions de fortes intensités correspondent généralement à des lieux d'accumulation d'impuretés actives, les zones sombres ou de faible luminescence traduisent l'existence de processus non radiatifs. Ils pourraient être dus à certaines impuretés à l'origine de processus radiatifs peu efficaces ou à des défauts tels que les dislocations.

b) Cathodoluminescence sélective :

La cathodoluminescence permet d'obtenir des spectres de CL qui sont essentiellement des graphes donnant l'intensité de luminescence en fonction de la longueur d'onde (ou de l'énergie). Le principe est basé sur une analyse sélective et sur l'utilisation de longueurs d'onde déterminées. L'analyse spectrale permet l'interprétation des processus radiatifs dans le but de la détermination précise des niveaux d'énergie superficiels ou profonds, à l'origine de ces

transitions, qui rend généralement possible l'identification, à l'échelle locale, des défauts ponctuels et des impuretés responsables des propriétés de luminescence d'un matériau. La longueur d'onde des photons détectés est située dans le domaine infrarouge (IR), visible et ultraviolet (UV) du spectre électromagnétique.

c) Cathodoluminescence totale :

La lumière totale émise par l'échantillon est utilisée pour former le signal de cathodoluminescence. La variation de l'intensité I_{CL} en fonction des paramètres du faisceau (l'intensité et l'énergie) permet la détermination des paramètres physiques de volume et de surface tels que : la longueur de diffusion, la durée de vie, la concentration de porteurs et des défauts.

Les acquisitions de CL peuvent être réalisées selon les trois modes :

- **Le mode balayage** : permet d'obtenir des informations sur la moyenne des émissions de CL pour une fenêtre d'analyse donnée,
- **Le mode balayage en ligne** : utilisé, par exemple, pour connaître le comportement de luminescence à travers un défaut de surface,
- **Le mode spot** : permet d'obtenir un spectre local provenant d'une région spécifique.

Le tableau suivant proposé par Smith [88] résume les différentes applications de la CL :

Nature des données	Informations obtenues
Intensité de luminescence	-Concentration des défauts -Longueur de diffusion -Vitesse de recombinaison en surface -Absorption de la lumière émise
Spectres de distribution de la luminescence	-Composition -Structure de la bande -Activation du dopant
Distribution spatiale de la luminescence	-Homogénéité -Composition chimique -Schéma des dislocations -Profil de diffusion
Variation de la CL en fonction du temps	-Densité des pièges -Temps de relaxation des porteurs

Tableau II.1 : Différentes applications de la CL pour la caractérisation des matériaux [88].

II.6.6. Comparaison de la CL avec quelques techniques de caractérisation

En général, l'excitation par un faisceau d'électron conduit à une émission de tous les mécanismes de luminescence présents dans le semiconducteur.

La comparaison de la cathodoluminescence (CL), avec d'autres phénomènes de la luminescence tels que la photoluminescence (PL), l'électroluminescence (EL), et les rayons X (RX) donne des résultats similaires, avec quelques différences possibles associées aux détails des processus de l'excitation, le taux de génération et le volume d'excitation.

Un avantage supplémentaire de l'analyse par cathodoluminescence en microscope électronique à balayage (CL-MEB), est la disponibilité des informations complémentaires obtenues par les autres modes du MEB, comme l'EBIC (Electron Beam Induced Current) et la microanalyse X [86].

La technique du courant induit (EBIC) est très proche de celle de la CL, car les deux techniques utilisent un faisceau d'électrons. Mais la CL a l'avantage de la simplicité de la préparation des échantillons ; il suffit de polir la surface avant l'utilisation, tandis que la technique EBIC nécessite une barrière de Schottky ou une jonction p-n.

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

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

II.7. Phénomènes de génération de charges

II.7.1. Energie de création d'une paire électron-trou

Un faisceau d'électrons de haute énergie ($E_0 > E_g$, E_g : énergie du gap) perd son énergie dans un semiconducteur en produisant des paires électron-trou (e-h) et des phonons. Le nombre,

N , des paires (e-h) créées dans le matériau est directement proportionnel au nombre d'électrons incidents.

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

$$E_{e-h} = \frac{E_A}{N} \quad (\text{II.8})$$

Où E_A est l'énergie absorbée dans le semiconducteur, et N le nombre de paires électron-trou créées.

La formule de E_{e-h} donnée par Klein [89] s'écrit sous la forme :

$$E_{e-h} = E_g + \bar{E}_R + \bar{E}_K \quad (\text{II.9})$$

Avec :

E_g : L'énergie du gap.

\bar{E}_R : La perte d'énergie moyenne pour la génération de phonons optiques.

\bar{E}_K : La perte d'énergie moyenne due aux vibrations du réseau.

Les mesures expérimentales pour différents semiconducteurs donnent toutes plus ou moins la même valeur approchée [89] :

$$E_{e-h} \cong 3E_g \quad (\text{II.10})$$

Dans le cas du CdTe, l'énergie moyenne de création d'une paire électron-trou est de 4.56 eV. Ce qui veut dire qu'un électron incident de 20 keV génère environ 4400 paires électron-trou.

II.7.2 La fonction de génération de paires électron-trou

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

$$E_{eff} = N_0 E_0 (1 - f) \quad (\text{II.11})$$

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

$$N' = \frac{N_0 E_0}{E_{e-h}} (1 - f) \quad (\text{II.12})$$

E_{eff} est l'énergie effective perdue dans l'échantillon, f est la fraction d'énergie rétrodiffusée, et N_0 le nombre d'électrons incidents par unité de temps ($N_0 = I_p/q$).

La génération est caractérisée par un paramètre $g'(\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$, représentant le nombre de paires électron-trou générées par unité de volume et unité de temps. Ce paramètre résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs, que l'on peut exprimer par :

$$g' = g_{\text{th}} + g \quad (\text{II.13})$$

Où

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

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

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

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

$$g(z) = \int_{x,y} g(x, y, z).dx.dy \quad (\text{II.14})$$

On définit alors le taux de génération $g(z)$ comme étant le nombre de paires créées par unité de temps et de profondeur ($\text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$), il sera donné par :

$$g(z) = \frac{I_p}{q \cdot E_{e-h}} \cdot \frac{dE_A}{dz} \quad (\text{II.15})$$

Où I_p est l'intensité du faisceau primaire, q est la charge élémentaire et $\frac{dE_A}{dz}$ est l'énergie cédée par le faisceau électronique incident à la profondeur z du matériau.

Le taux de génération total $G_0 (\text{s}^{-1})$ correspondant au nombre de paires créées par unité de temps dans le semiconducteur est donné par l'intégrale :

$$G_0 = \int_0^{+\infty} g(z) dz \quad (\text{II.16})$$

Soit, compte tenu de l'équation (II.12) :

$$G_0 = \frac{I_p E_0}{q} \cdot \frac{(1-f)}{E_{e-h}} \quad (\text{II.17})$$

II.7.3. Fonction de dissipation d'énergie normalisée

La dissipation de l'énergie du faisceau d'électrons dans le matériau est définie par la perte d'énergie des électrons primaires dans une direction normale à la surface de l'échantillon. Elle est donnée par la fonction suivante :

$$\Phi(u) = \frac{d(E_A/E_0)}{du} \quad (\text{II.18})$$

$u=Z/R_e$ est un paramètre sans dimension traduisant la pénétration normalisée.

Z : la profondeur.

R_e : la profondeur de pénétration.

E_A : l'énergie absorbée en fin du parcours et qui s'écrit [78] :

$$E_A = E_0 - \eta_T E - \eta_B \bar{E}_B \quad (\text{II.19})$$

Avec :

E et η_T sont, respectivement, l'énergie et la fraction des électrons transmis.

\bar{E}_B et η_B sont, respectivement, l'énergie moyenne et la fraction des électrons rétrodiffusés.

Le rapport entre l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés (\bar{E}_B) et celle du faisceau incident a été donné par Fitting et al [90] :

$$\frac{\bar{E}_B}{E_0} = 0.5(1 + \eta_B)$$

(II.20)

Où η_B dépend à la fois du numéro atomique Z et de l'énergie de l'électron incident E_0 .

Le coefficient des électrons rétrodiffusés est donné par Neubert et al [91] :

$$\eta_B(Z, E_0) = F_1(Z)[1 + F_2(Z) \ln \frac{E_0}{20}] \quad (\text{II.21})$$

Avec :

$$F_1(Z) = (-272.5 + 168.6 Z - 1.925 Z^2 + 0.00822 Z^3) \cdot 10^{-4} \quad (\text{II.22})$$

$$F_2(Z) = 0.2043 - 0.6543 Z^{-0.3} \quad (\text{II.23})$$

Hunger et Kùchler (1979) [92], ont proposé une autre expression analytique des électrons rétrodiffusés, donnée sous la forme:

$$\eta_B(Z, E_0) = E_0^{m(Z)} \cdot c(Z) \quad (\text{II.24})$$

Avec :

$$m(Z) = 0.1382 - 0.9211 Z^{-0.5} \quad (\text{II.25})$$

$$C(Z) = 0.1904 - 0.2236 \ln Z + 0.1292 (\ln Z)^2 - 0.01491 (\ln Z)^3 \quad (\text{II.26})$$

L'expression de l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés (\bar{E}_B) basée sur des mesures expérimentales de Bishop (1966) est donnée par [80]:

$$\bar{E}_B = E_0 (0.55612 + 3.163 \times 10^{-3} Z - 2.0666 \times 10^{-5} Z^2) \quad (\text{II.27})$$

Où \bar{E}_B et E_0 sont exprimées en keV.

Les figures (II.4 et II.5) représentent les variations de η_B et \bar{E}_B en fonction de l'énergie des électrons pour une incidence normale à la surface du semiconducteur CdTe dans le cas des différents modèles cités précédemment.

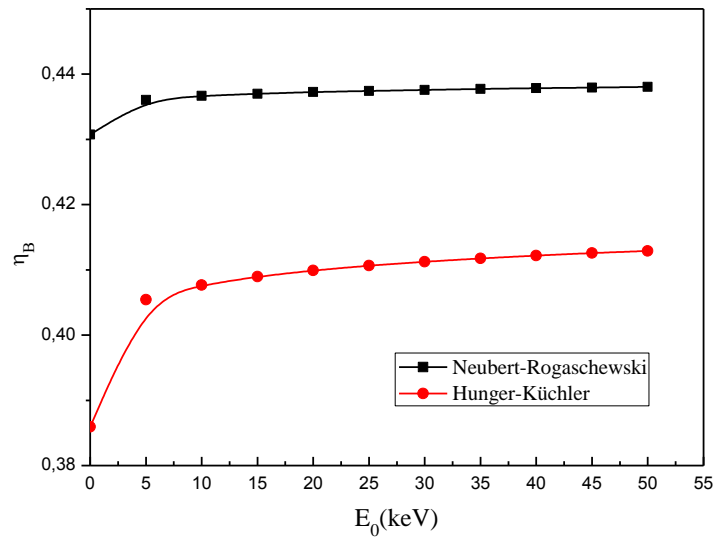


Figure II.4: Variation du coefficient des électrons rétrodiffusés en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents.

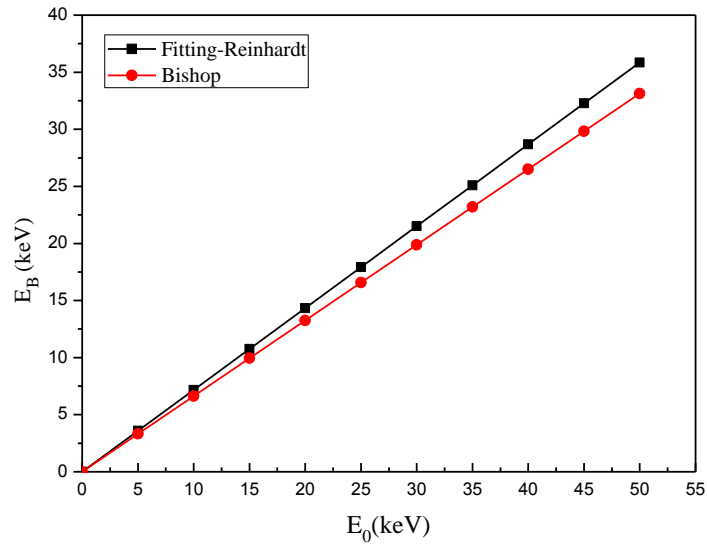


Figure II.5 : Variation de l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents.

Plusieurs expressions de la perte d'énergie en fonction de la profondeur z ont été proposées dans la littérature :

II.7.3.1. Fonction de dissipation de Wittry-Kyser

Une approximation gaussienne a été proposée par Wittry et Kyser (1967) [76] à partir d'une étude de CL dans l'arséniure de gallium (GaAs). Kyser (1972) [93] a modifié cette expression en introduisant un terme supplémentaire en exponentielle à partir d'une étude de l'émission X d'une cible de cuivre (Cu).

La forme finale de la gaussienne modifiée proposée est donnée alors par l'expression [94] :

$$\Phi(u) = A \cdot \exp\left[-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \cdot \exp\left[-\frac{b \cdot u}{u_0}\right] \quad (\text{II.28})$$

Avec u_0 , Δu , b et B / A qui varient suivant la nature de la cible. Pour GaAs : $u_0 = 0.125$, $\Delta u = 0.35$, $b = 4$ et $B/A = 0.4$.

II.7.3.2. Fonction de dissipation de Modèle de Kanaya - Okayama

La fonction de dissipation $\Phi(u = \frac{Z}{R_e})$ obtenue par Kanaya et Okayama est donnée par [78] :

$$\Phi(u) = \frac{1}{(1-u)^{2/5}} \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5} \right) \exp \left[-\left(\frac{\gamma \cdot u}{1-u} \right) \right] + \left[\frac{1}{2^{5/6}} - (1-u)^{5/6} \right] \left[\frac{E_B}{E_0} \cdot \frac{6.1,9}{5} \cdot \frac{\gamma}{(1-u)^2} \right] \cdot \exp \left(-\frac{1,9 \cdot \gamma \cdot u}{1-u} \right) \quad (\text{II.29})$$

Avec

$$\gamma = 0.187Z^{2/3}$$

Z est le numéro atomique des atomes constituant le matériau.

La figure (II.6) illustre la variation de la dissipation d'énergie en fonction de la profondeur pour le cas de CdTe.

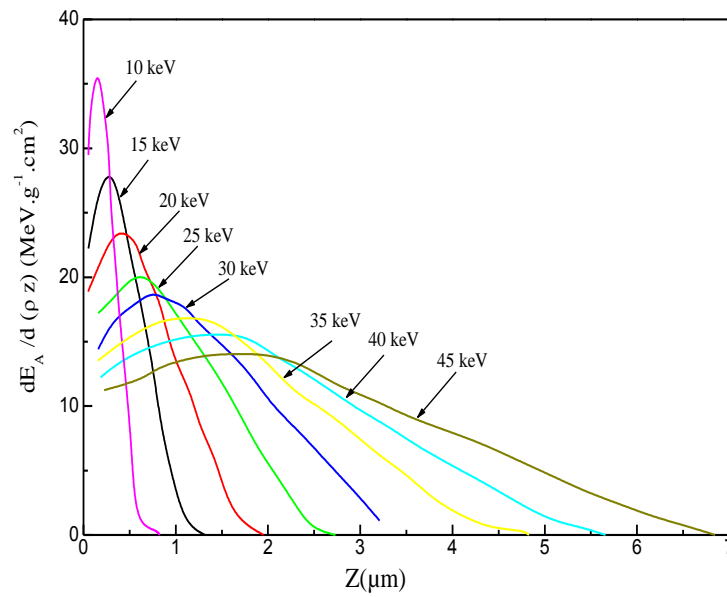


Figure II.6 : Courbe de dissipation d'énergie en fonction de la profondeur, calculée pour CdTe d'après le modèle de Kanaya et Okayama.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différentes interactions d'un faisceau électronique avec la matière en général, et avec un semiconducteur en particulier, l'irradiation électronique étant un outil intéressant pour injecter des charges électriques dans un semiconducteur.

Nous avons décrit, dans un premier temps, certains phénomènes qui accompagnent l'irradiation électronique de la matière, telles que l'émission des électrons secondaires, électrons rétrodiffusés et l'émission de photons X. Nous avons décrit ensuite, les divers modèles analytiques permettant la description de la trajectoire d'électrons dans un solide, ainsi que la fonction de génération de paires électron-trou suite aux pertes d'énergie de l'électron incident à l'intérieur du matériau.

Nous avons présenté en fin et en détail, la technique de caractérisation, en l'occurrence la cathodoluminescence, utilisée dans le cadre de cette thèse, et que nous appliquerons à notre matériau CdTe.

Chapitre III

Les défauts dans CdTe

Introduction

Nous donnerons dans la première partie de ce chapitre, un rappel sur les différents processus de recombinaison des porteurs de charge au sein du matériau en se focalisant sur les recombinaisons volumiques et surfaciques.

Dans la deuxième partie, nous présenterons, en détail, les différents défauts et impuretés présents dans le tellure de cadmium. La caractérisation de ceux-ci dans un semiconducteur est très importante pour les différentes applications auxquelles il est destiné.

III.1. Notions de génération et recombinaison

Il existe plusieurs techniques d'injection de porteurs qui créent, à l'aide d'une source extérieure, des paires électron-trou dans un semiconducteur. Cette source peut être soit un faisceau d'électrons : c'est le cas des techniques de cathodoluminescence (CL) et de courant induit (E.B.I.C: Electron Beam Induced Current), soit un faisceau de photons : c'est le cas des techniques de photoluminescence (PL) et de L.B.I.C (Light Beam Induced Current).

Différents processus de recombinaison des porteurs libres sont possibles pour ramener le système à son état d'équilibre thermodynamique. Nous citons la recombinaison bande à bande et la recombinaison par l'intermédiaire de niveaux profonds.

On peut ensuite distinguer les processus de recombinaison suivant le mode de dissipation de l'énergie au moment de la désexcitation de l'électron du niveau supérieur au niveau inférieur. Dans le cas d'une recombinaison radiative, l'énergie est évacuée par :

- ❖ Emission d'un photon (cas des dispositifs électroluminescents) si le semiconducteur est à gap direct.
- ❖ Emission d'un photon assisté par un phonon si le semiconducteur est à gap indirect.

On caractérise la création de porteurs dans le semiconducteur par un paramètre noté \mathbf{G} , qui mesure le nombre de porteurs créés par unité de volume et unité de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). En revanche, on caractérise la recombinaison des porteurs par un paramètre noté \mathbf{R} , qui mesure le nombre de porteurs qui disparaissent par unité de volume et par unité de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

Par définition, à l'équilibre thermique, le taux de génération thermique \mathbf{G}_{th} est compensé par le taux de recombinaison \mathbf{R}_{th} d'équilibre, on peut écrire donc:

$$\mathbf{R}_{\text{th}} = \mathbf{G}_{\text{th}} = K n_0 p_0 = K n_i^2 \quad (\text{III.1})$$

Après excitation et en l'absence de tout champ électrique, les porteurs en excès sont animés d'un mouvement de diffusion pur sous l'effet du gradient de leur concentration. La

longueur de diffusion L qu'ils parcourent pendant leur durée de vie τ , avant de se recombiner est donnée par :

$$L = \sqrt{D \tau} \quad (\text{III.2})$$

Où D est le coefficient de diffusion des porteurs.

III.2. Mécanismes de recombinaison des porteurs

Dans CdTe, les électrons et les trous générés (porteurs de charge libres) se recombinent principalement par l'intermédiaire de trois processus : soit par l'intermédiaire de défauts de manière radiative ou non radiative, soit par le biais de transitions interbandes ou par le concours de phénomène de recombinaison Auger de manière non radiative.

Les processus de recombinaison peuvent se produire soit dans le volume soit à la surface.

III.2.1. Recombinaisons volumiques

Les trois mécanismes de recombinaison fondamentaux sont la recombinaison radiative, la recombinaison SRH (pour Shockley-Read-Hall) et la recombinaison Auger. A chaque mécanisme de recombinaison des porteurs de taux R est associée une durée de vie τ par la relation :

$$R = \frac{\Delta C}{\tau} \quad (\text{III.3})$$

Où ΔC est la concentration de porteurs en excès.

III.2.1.1. Recombinaisons radiatives

La recombinaison radiative par transitions interbandes, ou bande à bande, correspond à la transition d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence avec émission d'un photon d'énergie E_g (Figure III.1a). Ce type de recombinaison est fréquent dans les matériaux à gap direct comme CdTe. A noter qu'il est à la base du principe de fonctionnement des diodes électroluminescentes LEDs. Dans ce cas le taux de recombinaison radiative R_{rad} , s'écrit :

$$R_{\text{rad}} = K (np - n_i^2) \quad (\text{III.4})$$

Avec :

K : le coefficient de recombinaison radiative, qui dépend de la température, n_i : la concentration intrinsèque de porteurs et n et p : les concentrations des électrons et des trous libres hors équilibre respectivement.

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

$$R_{\text{rad}} = 0, \quad n = n_0, \quad p = p_0 \quad (\text{III.5})$$

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

En régime hors équilibre ($n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta p$, $\Delta n = \Delta p$), avec Δn et Δp représentant respectivement l'excès d'électrons et de trous créés par excitation.

Pour un semiconducteur de type p, et en régime de faible injection ($N_a \approx P_0 \gg n_0$, $\Delta p = \Delta n \ll p_0$) les expressions de R_{rad} ainsi que la durée de vie τ_{rad} , des électrons minoritaires sont liés par la relation :

$$R_{rad} = \frac{\Delta n}{\tau_{rad}} \quad (III.6)$$

$$\tau_{rad} = \frac{1}{k(n_0 + p_0 + \Delta n)} \approx \frac{1}{KN_a} \quad (III.7)$$

Par contre lorsque l'injection est forte ($\Delta p \gg p_0$, $p = \Delta p$ et $n = \Delta n$) on a :

$$\tau_{rad} = \frac{1}{K\Delta n} \quad (III.8)$$

De manière identique pour les trous minoritaires dans un semiconducteur de type n, et en régime de faible injection ($N_d \approx n_0 \gg p_0$, $\Delta n = \Delta p \ll n_0$) on a :

$$R_{rad} = \frac{\Delta p}{\tau_{Rad}} \quad (III.9)$$

$$\tau_{rad} = \frac{1}{K(n_0 + p_0 + \Delta n)} \approx \frac{1}{KN_d} \quad (III.10)$$

Pour un régime de forte injection ($\Delta n \gg n_0$, $p = \Delta p$ et $n = \Delta n$ et $\Delta p = \Delta n$) on a :

$$\tau_{rad} = \frac{1}{K\Delta p} \quad (III.11)$$

Remarque : En général, les composants semiconducteurs fonctionnent en régime de faible injection. En d'autre terme, l'excès de porteurs par rapport au régime d'équilibre est faible devant la densité des porteurs majoritaires du semiconducteur.

III.2.1.2. Recombinaisons Shockley-Read-Hall

Le mécanisme de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) se fait par l'intermédiaire des défauts dans la bande interdite (défauts structuraux, impuretés, etc.), selon les niveaux énergétiques introduits par les défauts dans le gap. Ces défauts peuvent jouer le rôle de pièges à électrons (ou à trous) qui piègent momentanément les électrons (les trous) avant de les renvoyer vers la bande de conduction (la bande de valence). Ils peuvent aussi jouer le rôle de centres recombinants des paires électron-trou par la capture d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence et provoquant ensuite la recombinaison des deux porteurs libres. A noter que ces défauts sont responsables de la chute de la durée de vie des porteurs, en

créant des centres de recombinaison. Ils sont caractérisés par leur densité N_t et leur position énergétique E_t dans la bande interdite, leur section efficace de capture des électrons et des trous σ_n et σ_p , le taux de capture C_n et C_p et les taux d'émission des électrons et des trous e_n et e_p . La probabilité d'occupation du défaut dépend du niveau de Fermi E_F . La Figure III.1b montre ces phénomènes de recombinaisons.

Toutes ces recombinaisons sont très probables dans les matériaux possédant une forte densité de défauts.

Les recombinaisons SRH sont définies par l'expression :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_n(n+n_1) + \tau_p(p+p_1)} \quad (\text{III.12})$$

τ_n et τ_p étant les durées de vie des électrons et des trous, dépendant de la concentration de centres recombinants N_t , à la vitesse d'agitation thermique des porteurs de charges V_{th} , et à leur section efficace de capture σ . Elles sont définies par :

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_n V_{th} N_t} \quad (\text{III.13})$$

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p V_{th} N_t} \quad (\text{III.14})$$

Où n_1 et p_1 sont les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre lorsque le niveau de Fermi E_F coïncide avec le niveau du piège E_t elles sont données par :

$$n_1 = n_i \exp[(E_t - E_{FI})/KT] \quad (\text{III.15})$$

$$p_1 = n_i \exp[-(E_t - E_{FI})/KT] \quad (\text{III.16})$$

E_{FI} : niveau intrinsèque de Fermi localisé proche du milieu du gap.

K : la constante de Boltzmann.

T : la température absolue.

Dans le cas d'un semiconducteur de type p, en régime de faible injection (ce qui est le cas dans la plupart des expériences) la durée de vie SRH peut donc s'écrire sous la forme :

$$\tau_{SRH} = \frac{\Delta n}{R_{SRH}} = \frac{\tau_n(n + \Delta n + n_1) + \tau_p(p + \Delta p + p_1)}{n_0 + p_0 + \Delta p} \quad (\text{III.17})$$

III.2.1.3. Recombinaisons Auger

Lors d'une recombinaison Auger, un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence se recombinent en transférant leur énergie cinétique à une autre charge libre (électron ou trou). Ce mécanisme de recombinaison se manifeste lorsque le niveau de dopage ou niveau d'injection est élevé (densité très élevée des porteurs libres n et p). Notons que la recombinaison Auger est une recombinaison bande à bande, mais l'énergie résultante est

transmise à un électron ou à un trou différent. La Figure III.1c montre ce mécanisme de recombinaison dans le cas d'un transfert à un électron.

Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$R_A = (C_n n + C_p p)(np - n_i^2) \quad (\text{III.18})$$

C_n et C_p sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

La durée de vie associée aux recombinaisons Auger τ_A est donnée comme suit :

❖ pour un semiconducteur de type p :

- En régime de faible injection : $\tau_A = \frac{1}{C_p N_d^2}$ (III.19)

- En régime forte injection : $\tau_A = \frac{1}{(C_n + C_p) \Delta n^2}$ (III.20)

❖ pour un semiconducteur de type n :

- En régime de faible injection : $\tau_A = \frac{1}{C_n N_d^2}$ (III.21)

- En régime forte injection : $\tau_A = \frac{1}{(C_n + C_p) \Delta p^2}$ (III.22)

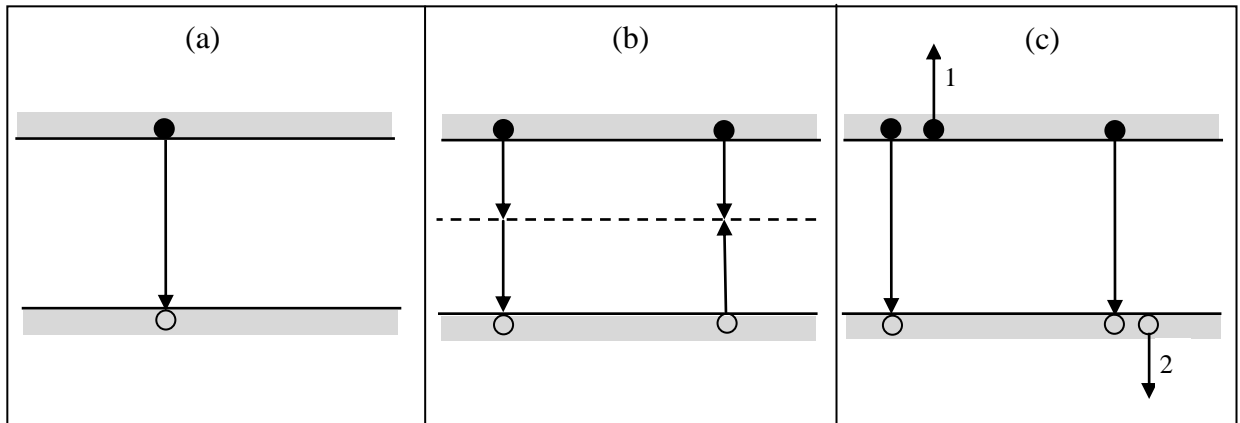


Figure III.1: Schémas des différents processus de recombinaison ; a) la recombinaison radiative ; b) la recombinaison Shockley-Read-Hall ; c) la recombinaison Auger : l'excès d'énergie peut être transféré à un électron (1) ou à un trou (2).

III.2.2. Recombinaisons surfaciques

III.2.2.1. Les états de surface

La recombinaison de surface est un cas particulier de la recombinaison en volume de Shockley-Read-Hall. La rupture de continuité du réseau cristallin à la surface engendre la présence de liaisons non saturées ou liaisons pendantes, responsables d'une répartition quasi-

continue d'états énergétiques permis dans la bande interdite. Ces états sont appelés états de surface, et les niveaux correspondants sont appelés niveaux de surface.

Les états de surface, sont dus d'une part, aux phénomènes intrinsèques résultant de la rupture de périodicité du réseau cristallin, et d'autre part, aux phénomènes extrinsèques résultant de l'adsorption à la surface d'atomes étrangers, dont les plus courants sont les atomes d'oxygène qui entraînent une oxydation de la surface du semiconducteur [95].

L'état électronique de la surface dépend de la densité des états de surface, de leur type et de leur position énergétique dans la bande interdite. Le nombre et la nature dépendent du traitement de la surface du cristal (polissage, attaque chimique, revêtement, ...), et des conditions extérieures (composition de l'atmosphère, température, ...) [96].

Le taux de recombinaisons SRH en surface, par unité de surface, est donné par :

$$R_{SRH}^{surface} = \frac{C_n C_p N_t (np - n_i^2)}{C_n \left(n + n_i e^{\frac{E_t - E_{FI}}{KT}} \right) + C_p \left(p + n_i e^{-\frac{E_t - E_{FI}}{KT}} \right)} \quad (III.23)$$

n et p (cm^{-3}) sont les concentrations des électrons et des trous à la surface, N_t (cm^{-2}) : la densité des états de surface et E_t , E_{FI} sont le niveau du piège et du niveau de Fermi intrinsèque.

$C_n = \sigma_n V_{th}$, $C_p = \sigma_p V_{th}$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) représentent, respectivement, les coefficients de capture des électrons et des trous.

Par analogie avec les autres mécanismes de recombinaison, on peut parler d'une durée de vie des porteurs minoritaires à la surface, d'un échantillon d'épaisseur W qui possède une durée de vie constante τ_b et une vitesse de recombinaison S sur chaque surface. La durée de vie à la surface τ_s , qui exprime les recombinaisons sur les deux surfaces est donnée par [97]:

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{\tau_b} + \frac{2S}{W} \quad (III.24)$$

III.2.2.2. Notion de la vitesse de recombinaison en surface

La qualité d'une surface est généralement donnée par la valeur de la vitesse de recombinaison en surface. Dans ce cas, on définit la vitesse de recombinaison des porteurs minoritaires à la surface pour le cas d'un semiconducteur de type p par :

$$R_{SRH}^{surface} = S \cdot \Delta n \quad (III.25)$$

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

III.3. Taux de recombinaison total et durée de vie effective des porteurs minoritaires

Les quatre mécanismes de recombinaison discutés précédemment peuvent exister à la fois dans le même matériau, mais avec des proportions différentes. Dans un matériau à gap direct comme le tellure de cadmium les recombinaisons radiatives sont prédominantes devant les recombinaisons Auger et SRH. Pour un faible dopage du matériau les recombinaisons de type SRH sont prédominantes. Le taux de recombinaison de type SRH varie selon la densité d'impuretés et de dislocations dans le matériau. Dans les matériaux très dopés ce sont les recombinaisons Auger qui prédominent en volume. Tandis que, les recombinaisons en surface sont plus influentes dans les couches minces.

En général, le taux de recombinaison total englobant les taux de recombinaisons en volume et en surfaces est donné par :

$$R_{Total} = R_{Rad} + R_{SRH}^{volume} + R_A + R_{SRH}^{Surface} \quad (III.26)$$

La durée de vie effective correspondant au taux de recombinaison total est définie par :

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{Rad}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} + \frac{1}{\tau_A} \quad (III.27)$$

III.4. Présentation des défauts et impuretés dans CdTe

III.4.1. Introduction sur les défauts cristallins

Un cristal parfait tridimensionnel est un arrangement d'atomes en un réseau périodique. Les ruptures de périodicité constituent des défauts et altèrent les propriétés du semiconducteur de manière significative.

L'élaboration d'un composant semiconducteur ne conduit jamais à la perfection. Il existe toujours des imperfections qui peuvent nuire aux propriétés électriques du matériau, et de ce fait réduire les performances du dispositif associé et donc leur développement industriel.

La présence de ces imperfections est en pratique inévitable, soit qu'elles existent en équilibre thermodynamique, soit qu'elles subsistent à l'état métastable suite aux processus d'élaboration, de croissance ou de traitement ultérieurs.

Lorsque la perturbation du réseau cristallin est faible, les niveaux d'énergie obtenus se trouvent proches des bandes de conduction ou de valence. Si la perturbation est liée à une imperfection plus complexe, le niveau d'énergie introduit dans la bande interdite est éloigné des bandes de conduction ou de valence.

Les plus ou moins récents travaux de recherche, dans le domaine des défauts cristallins, se sont portés essentiellement sur l'étude et l'amélioration des propriétés électriques et optiques de structures du tellure de cadmium.

Les différents types de défauts que l'on peut rencontrer dans un cristal ont des tailles qui varient à l'échelle atomique pour les défauts ponctuels et les complexes atomiques à quelques microns pour les défauts macroscopiques. Leur nature très diverse implique qu'ils affectent différemment le réseau cristallin, certains pouvant affecter les performances électriques ou optiques du matériau et perturber le fonctionnement des dispositifs [98,99]. Ainsi des effets très clairs de dislocations créées durant la croissance du cristal sur la dégradation de dispositifs laser ont déjà été mis en évidence [100,101]. De même en ce qui concerne les défauts macroscopiques, bien qu'ils n'aient pas a priori d'influence directe sur les propriétés électriques et/ou optiques d'un dispositif.

Ces deux exemples montrent donc l'importance de la recherche de tout défaut cristallin et surtout de son origine dans un matériau semiconducteur si l'on désire améliorer la qualité et la fiabilité des composants. A noter que d'autres défauts (atomes étrangers introduits dans le réseau cristallin) sont volontairement ajoutés au cristal, parce qu'ils lui confèrent des propriétés nouvelles et intéressantes.

III.4.2. Les techniques de caractérisation des niveaux pièges

Il existe diverses techniques de mesure de ces défauts.

La mesure des défauts profonds mènent à l'évaluation des termes de piégeage, dépiégeage et recombinaison. Diverses méthodes permettent d'évaluer les divers paramètres caractéristiques des défauts électriquement actifs présents dans le matériau. Ces méthodes électriques et optiques, d'une manière non exhaustive, sont :

- 1) Mesure du courant thermo-stimulé (TSC : Thermo Stimulated Current)
- 2) Mesure de l'effet thermoélectrique (TEES : Thermoelectric Effect Spectroscopy)
- 3) Spectroscopie des niveaux profonds par mesure de la capacité transitoire (DLTS : Deep Level Transient Spectroscopy)
- 4) Spectroscopie transitoire de courant photo-induit (PICTS: Photo-Induced Transient Current Spectroscopy)
- 5) Mesure du courant limité par la charge d'espace (SCLC : Space Charge Limited Current).
- 6) Photoluminescence (PL)
- 7) Cathodoluminescence (CL)
- 8) Mesure de la décroissance de la photoconductivité

9) Courant induit par excitation électronique ou ionique (EBIC : Electron Beam Induced Current, IBIC : Ion Beam Induced Current).

III.5. Classification des défauts structuraux dans un cristal

Il existe plusieurs types de défauts structuraux dans un cristal. On peut les classer en deux catégories :

- Défauts de surface
- Défauts de volume

III.5.1. Défauts de surface

La surface de tout semiconducteur présente des défauts de toutes sortes, qui se comportent comme des centres de recombinaison. A la surface du semiconducteur les états électroniques sont modifiés en raison d'une part d'un phénomène intrinsèque qui résulte de la rupture de périodicité du réseau cristallin causant l'apparition des liaisons pendantes, et d'autre part des phénomènes extrinsèques résultant de l'adsorption d'atomes étrangers.

III.5.2. Défauts de volume

On peut distinguer deux groupes de défauts en volume :

III.5.2.1. Défauts Ponctuels

- ❖ Les lacunes (site atomique inoccupé, V_{Cd} ou V_{Te} dans CdTe).
- ❖ Les anti-sites (dans les semiconducteurs composés : un atome occupe le site d'un autre atome, par exemple, un atome de tellure à la place d'un cadmium (Te_{Cd}), ou un atome de cadmium à la place d'un atome de tellure (Cd_{Te})).
- ❖ Les impuretés par substitution (un atome étranger occupe un site atomique, par exemple, un atome de Gallium dans un site de cadmium (Ga_{Cd})).
- ❖ Les défauts interstitiels (un atome du matériau ou une impureté occupe un site interstitiel, par exemple, un atome de cadmium dans un site interstitiel, (Cd_{int})).
- ❖ Défauts Frankel (un atome ou un ion quitte sa position normale pour venir en position interstitielle (V_{cd}, Cd_i)).
- ❖ Défauts d'irradiation

Remarque: Les défauts natifs tels que lacune, les antisites et les interstitiels d'une part, et les atomes étrangers (impuretés) d'autre part, sont susceptibles de s'associer pour former des défauts ponctuels complexes les plus simples sont : association de paire de lacunes (dilacune), association de deux impuretés et association d'une lacune et d'une impureté.

III.5.2.2. Défauts étendus

- ❖ Les dislocations (discontinuité dans la structure cristalline). Il en existe trois types: dislocation coin, dislocation vis ou mixte. Elles proviennent généralement de la relaxation plastique d'un matériau sous contrainte.
- ❖ Les défauts d'empilement (la séquence d'empilement des atomes n'est plus respectée). Ce phénomène peut se produire sur un ou deux plans atomiques ou sur des zones plus étendues avec une structure symétrique. Ces défauts sont aussi appelés macles.
- ❖ Les inclusions (précipité ou changement de phase cristalline dans une zone du réseau).
- ❖ Les joints de grain (frontière entre deux cristaux possédant des orientations différentes).

III.6. Niveaux d'énergie associés aux défauts

L'existence des imperfections propres au réseau cristallin introduisent certains niveaux énergétiques dans la bande interdite. Ces niveaux sont classés en deux catégories :

- ❖ Niveaux superficiels
- ❖ Niveaux profonds

III.6.1. Niveaux superficiels

Ils sont introduits par les atomes d'impuretés dopantes, donatrices ou acceptrices, près des niveaux des bandes permises, bande de conduction et bande de valence respectivement, et donc l'énergie d'ionisation de ces impuretés superficielles est plus petite ou comparable à $K_B T_0$ (K_B constante de Boltzmann et T_0 température ambiante).

III.6.2. Niveaux profonds

Il s'agit des niveaux proches du centre de la bande interdite, ces niveaux sont appelés pièges profonds, ils modifient de façon plus ou moins importante les propriétés de conduction dans les semiconducteurs. Quand ces niveaux sont proches de la bande de conduction ou la bande de valence, ils correspondent à des impuretés dopantes qui établissent une conductivité de type n ou p.

Les centres profonds (pièges ou défauts) ne peuvent être décrits par le modèle hydrogénoïde comme les niveaux superficiels (impuretés dopantes), car les énergies d'ionisation requises sont très élevées d'où un potentiel très attractif entraînant une localisation très prononcée de la fonction d'onde de la particule liée.

La présence des niveaux profonds dans le gap du semiconducteur est caractéristique de plusieurs changements :

- ❖ Leurs capacités à émettre ou à capturer les porteurs libres, ils peuvent compenser les niveaux donneurs ou accepteurs introduits intentionnellement et donc réduire la concentration des porteurs libres ainsi que leur mobilité.
- ❖ Pour augmenter la résistivité d'un matériau, des pièges profonds peuvent être introduits intentionnellement pour capturer les porteurs libres.
- ❖ En raison de leur position centrale dans la bande interdite, les niveaux profonds peuvent interagir avec les porteurs des deux bandes. Ils sont considérés comme des centres de génération recombinaison et servent donc à régler la durée de vie des porteurs minoritaires.
- ❖ Ils participent à plusieurs phénomènes de génération et de recombinaison qui consistent à l'émission ou à la capture d'électrons ou de trous et sont régis essentiellement par la théorie Shockley- Reed-Hall.

III.7. Caractéristiques des défauts profonds

Les défauts profonds peuvent être ponctuels (des lacunes, des atomes interstitiels, des antisites,...), ou des défauts étendus (dislocation, fautes d'empilement,...). Ces défauts peuvent introduire un (ou plusieurs) niveau d'énergie dans la bande interdite. La position E_t d'un niveau d'énergie par rapport à la bande de conduction ($\Delta E_n = E_C - E_t$) ou par rapport à la bande de valence ($\Delta E_p = E_t - E_V$) est une caractéristique du piège. Les autres paramètres physiques caractéristiques d'un niveau profond sont : la densité des niveaux pièges N_t , la section efficace de capture σ , le coefficient de captures C et le coefficient d'émission e .

III.7.1. Mécanismes d'émission et de capture des porteurs

A l'équilibre thermodynamique, La probabilité d'occupation d'un niveau énergétique E_t par un électron obéit à la statique de Fermi-Dirac, elle est donnée par :

$$f(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{III.28})$$

Avec

E_F : le niveau de Fermi.

E_t : le niveau énergétique du défaut dans le gap.

K_B : la constante de Boltzmann.

T : la température absolue.

Les interactions entre les centres profonds et les porteurs libres (électrons de la bande de conduction et trous de la bande de valence) se font suivant les quatre processus élémentaires schématisés sur la figure III.2.

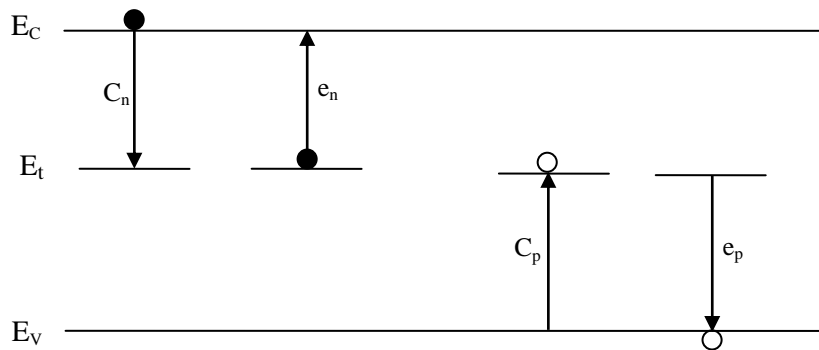


Figure III.2: Schéma des bandes avec niveau profond E_t et les quatre processus de capture et d'émission des deux types de porteurs.

Le nombre moyen de capture de porteurs par unité de volume et par unité de temps est proportionnel à la concentration de porteurs libres, à la densité du piège dont l'état de charge permet la capture et de la probabilité d'occupation du défaut par un porteur libre. On définit le taux de capture des électrons et des trous par :

$$C_n = \sigma_n V_{thn} \quad (III.29)$$

$$C_p = \sigma_p V_{thp} \quad (III.30)$$

Où σ_n et σ_p sont les sections efficaces de captures des électrons et des trous.

V_{thn} et V_{thp} sont les vitesses thermiques d'électrons et de trous données par :

$$V_{thn} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_n^*}} \quad (III.31)$$

$$V_{thp} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_p^*}} \quad (III.32)$$

Où m_n^* , m_p^* sont les masses effectives des électrons et des trous respectivement.

De la même manière, le nombre moyen d'émission vers la bande de conduction (ou vers la bande de valence) est proportionnel au nombre de pièges occupés et de la probabilité d'occupation du défaut par un porteur libre. On définit les taux d'émission (appelés aussi vitesse d'émission) e_n , e_p par :

$$e_n = \sigma_n V_{thn} N_C \exp \frac{E_t - E_C}{k_B T} \quad (\text{III.33})$$

$$e_p = \sigma_p V_{thp} N_V \exp -\frac{E_t - E_V}{k_B T} \quad (\text{III.34})$$

La densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence, N_C et N_V respectivement, est donnée par :

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{III.35})$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{III.36})$$

Compte tenu de la dépendance thermique de V_{thn} , V_{thp} , N_C et N_V (les équations : (III.31), (III.32), (III.35) et (III.36)), on décrit généralement les expressions e_n , e_p sous la forme :

$$e_n = A_n \sigma_n T^2 \exp \frac{E_t - E_C}{k_B T} \quad (\text{III.37})$$

$$e_p = A_p \sigma_p T^2 \exp -\frac{E_t - E_V}{k_B T} \quad (\text{III.38})$$

Où A_n et A_p sont des paramètres caractéristiques du matériau, ils sont donnés par :

$$A_n = \frac{2\sqrt{3} (2\pi)^{\frac{3}{2}} m_n^* k_B^2}{h^3} \quad (\text{III.39})$$

$$A_p = \frac{2\sqrt{3} (2\pi)^{\frac{3}{2}} m_p^* k_B^2}{h^3} \quad (\text{III.40})$$

h est la constante de Planck.

Pour le CdTe : $A_n = 3.10 \times 10^{20} \text{ K}^{-2} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{S}^{-1}$

$$A_p = 1.91 \times 10^{21} \text{ K}^{-2} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{S}^{-1}$$

Le taux d'émission thermique est donc fonction du niveau d'énergie du piège et de la température. Ainsi, à partir de mesure de $e_{n,p}$ en fonction de T , il est possible de déterminer les paramètres du piège : énergie d'activation E_t et la section efficace de capture $\sigma_{n,p}$.

III.7.2. Pièges à électrons et pièges à trous

Les valeurs des taux de captures C_n et C_p , permettent de différencier les niveaux pièges.

- ❖ Si $C_n \gg C_p$ alors il s'agit d'un niveau piège à électron
- ❖ Si $C_p \gg C_n$ alors il s'agit d'un niveau piège à trou
- ❖ Si $C_n \cong C_p$ alors il s'agit d'un centre recombinant

Remarque : Dans un semiconducteur de type n , un piège à électron est plus communément appelé piège à majoritaires et un piège à trou piège à minoritaires, inversement pour un semiconducteur de type p .

III.8. Défauts électriquement actifs dans le CdTe

III.8.1. Défauts natifs

Différentes méthodes de croissance permettent d'obtenir du CdTe. Chacune donne des propriétés spécifiques au semiconducteur et induit des défauts dans le matériau. Le CdTe de nature est de type p , il contient de nombreux défauts intrinsèques (principalement : V_{Cd} , V_{Te} , Te_{Cd} , Cd_{Te} , Cd_i , Te_i) et des impuretés résiduelles, donatrices et acceptrices, responsables de la mauvaise résistivité des matériaux non dopés. L'ensemble de ces défauts est responsable de la résistivité et des propriétés de transport des porteurs de charges. Les niveaux énergétiques de ces défauts peuvent être compensés par dopage, avec du chlore ou de l'indium, pour ramener le niveau de Fermi proche du milieu du gap et obtenir une haute résistivité.

L'écart à la stœchiométrie se traduit par l'apparition de défauts natifs électriquement actifs, donc d'une grande concentration de lacune et interstitiels de Cd et Te, en plus d'autres défauts natifs telles que les antisites et les impuretés résiduelles (Li, Na, Cu, Ag) [102]. Ces défauts sont responsables d'un dopage résiduel non intentionnel.

Plus d'une trentaine de niveaux pièges et centres de recombinaison ont été identifiés dans CdTe [103]. Nous nous intéressons plus particulièrement ici aux défauts ponctuels (lacunes, antisites et interstitiels). Ils sont tous susceptibles d'introduire des niveaux énergétiques dans la bande interdite et sont donc à même d'influencer considérablement les propriétés électriques et optiques du matériau.

III.8.1.1. Le Dopage résiduel

L'une des grandes limitations de la maîtrise du dopage dans les semiconducteurs II-VI, est la difficulté d'obtenir des matériaux de haute pureté. D'où la notion de dopage involontaire, un dopage dû à des impuretés résiduelles provenant de la source du matériau et/ou d'une pollution due à l'environnement pendant l'élaboration du matériau.

III.8.1.2. Les lacunes

La lacune est un atome manquant dans la structure du matériau. Il en existe deux types de lacunes : la lacune du cadmium V_{Cd} et la lacune de tellure V_{Te} . Un raisonnement à partir des électrons de valence permet de conclure au caractère double accepteur de V_{Cd} et double donneur de V_{Te} . En effet, le cadmium possède une structure $5S^2$ tandis que le tellure est en $5S^2 5P^4$. Ce dernier étant plus électronégatif, chaque tétraèdre de tellure demande globalement deux électrons au cadmium central. Si celui-ci est absent, la lacune réclame donc deux porteurs négatifs au réseau. Le même raisonnement pour le tellure conduit à donner deux électrons au cristal. Par conséquent, les lacunes peuvent introduire deux niveaux dans la bande interdite, un pour chaque état de charge [104].

Les valeurs des positions des niveaux énergétiques liées aux lacunes V_{Cd} doubles accepteurs rapportées dans la littérature sont regroupées dans le tableau III.1.

Défaut	Type	Position du niveau énergétique (eV)		Références
		0/-1	-1/-2	
V_{Cd}	Double accepteur	Bande de valence	0.47	[105]
		$E_V + 0.05$	$E_V + 0.6$	[106]
		$E_V + 0.2$	$E_V + 0.8$	[107]

Tableau III.1: Position des niveaux énergétiques de V_{Cd} dans la bande interdite de CdTe [108].

La lacune de cadmium joue un rôle prépondérant dans les mécanismes de compensation électrique [107], et elle peut se lier avec un donneur en site tellure et créer un complexe qu'on appelle « le centre A ». Si le donneur est simple, le centre A devient un accepteurs simple, sa position se situe entre 100 et 200 meV de la bande de valence selon le donneur associé [109].

La lacune de tellure isolée (aussi appelée centre F) est beaucoup moins traitée dans la littérature. Les résultats trouvés dans la littérature sont présentés dans le tableau III.2.

Défaut	Type	Position du niveau énergétique (eV)		Références
		0/+1	+1/+2	
V_{Te}	Double donneur	$E_C - 0.01$	$E_C - 0.05$	[106]
		$E_C - 0.4$	$E_C - 0.5$	[107]
		$E_C - 1.20$	Bande de valence	[110]

Tableau III.2 : Position des niveaux énergétiques de V_{Te} dans la bande interdite de CdTe.

III.8.1.3. Les antisites

Lorsqu'un atome constitutif du cristal est placé sur le site de l'autre, on parle d'antisite. Ce type de défaut est fréquent dans les matériaux II-VI. L'antisite de Te (noté Te_{Cd}) joue un rôle important dans CdTe, il peut se lier avec une lacune de cadmium et créer un complexe (V_{Cd}, Te_{Cd}) [104]. Les calculs ab initio de Berding [107] prédisent que ce niveau donneur profond serait responsable de la forte compensation observée sur les échantillons réalisés sous excès de tellure. Les niveaux énergétiques liés aux états de charge (états d'ionisation) 0/+ et +/+2 sont, respectivement, $E_C - 0.6$ eV et $E_C - 1.0$ eV [111]. En effet, Babentsov et al. [112] ont montré que le défaut natif (Te_{Cd}) est le candidat le plus probable du niveau donneur profond dans CdTe. L'antisite de cadmium Cd_{Te} est un accepteur et a un niveau énergétique situé à $E_V + 0.1$ eV [106], sous les conditions du matériau CdTe riche en Cd.

III.8.1.4. Les interstitiels

Les atomes de cadmium en position interstitiels (Cd_i eux même donneurs) ne semblent être présents que dans les matériaux tirés en excès de cadmium et sa position énergétique est $E_C - 0.8$ eV. De même, l'interstitiel de tellure (Te_i) est un donneur et son niveau énergétique est situé à $E_C - 1.2$ eV [106].

III.8.2. Les impuretés

III.8.2.1. Niveaux peu profonds

Il s'agit d'éléments différents des atomes constituants du CdTe. Les impuretés les plus attendues sont celles qui appartiennent à une colonne adjacente à un élément constituant la

matrice hôte. Selon la nature de l'impureté et le site qu'elle occupe, celle-ci pourra être donatrice ou acceptrice. Les formes interstitielles et substitutionnelle peuvent coexister dans le cristal durant le traitement thermique par exemple, mais également dans l'état final à température ambiante. Il est fréquemment supposé que lors de la diffusion, les impuretés migrent sous forme interstitielle avant de se placer en site substitutionnel [113]. Des diffusions simultanées des deux espèces ont été enregistrées dans CdTe [114]. En règle générale les processus interstitiels présentent une faible énergie d'activation et dominent à basse température, alors que les processus substitutionnels l'emportent à haute température. En fait, dans la pratique on s'intéresse essentiellement à la forme substitutionnelle qui seul fournit l'activité électrique souhaitée.

Dans les matériaux II-VI, en particulier dans CdTe [37], on s'attend que les impuretés de la colonne Ib (Cu, Ag, Au) et Ia (Li, Na, K) soient des accepteurs en substitution du cadmium tandis que ceux de la colonne IIIb (B, Al, Ga, In) soient des donneurs. De même, les impuretés de la colonne Vb (P, As, Sb) soient des accepteurs en substitution du tellure tandis que ceux de la colonne VIIb (F, Cl, Br, I) soient des donneurs. Ils sont tous considérés peu profonds (100-200meV).

III.8.2.2. Les éléments de la colonne IV

Les éléments de la colonne IV donnent lieu à des niveaux profonds dans la bande interdite lorsqu'ils substituent le cadmium (Tableau III.3).

Elément dopant	Position énergétique	Type	Références
Ge	$E_C - 0.95 \text{ eV}$	Donneur	[115]
Sn	$E_C - 0.92 \text{ eV}$	Donneur	[116]
Pb	$E_C - 1.3 \text{ eV}$	Donneur	[116]

Tableau III.3 : Niveaux des éléments de la colonne IV dans CdTe.

III.8.2.3. Les métaux de transition

Les éléments de transition s'insèrent généralement en substitution du cadmium (cation), et engendrent des niveaux profonds dans la bande interdite. Le type et le niveau de ces défauts sont regroupés dans le tableau III.4.

Elément dopant	Position énergétique	Type	Références
Sc	$E_C - 0.95 \text{ eV}$	Donneur	[117]
Ti	$E_C - 0.92 \text{ eV}$	Donneur	[118]
V	$E_C - 1.3 \text{ eV}$	Donneur	[119]
Cr	$E_V + 1.34 \text{ eV}$	Accepteur	[120]
Mn	Pas connue	Accepteur	[118], [120]
Fe	$E_V + 0.2 \text{ eV}$	Donneur	[120]
Co	$E_V + 1.25 \text{ eV}$	Accepteur	[121]
Ni	$E_V + 0.92 \text{ eV}$	Accepteur	[120]
Cu	$E_V + 0.1 \text{ eV}$	Accepteur	[120]

Tableau III.4 : Niveaux des éléments de transition dans CdTe [108].

Conclusion

Ce chapitre nous a permis de mieux comprendre les phénomènes de recombinaison des porteurs de charge générés par une excitation extérieure. Les électrons et les trous se recombinent principalement de trois manières : par l'intermédiaire de défauts de manière non-radiative, de manière radiative, par des transitions inter bandes, et par le phénomène de recombinaison Auger de manière non radiative.

Nous avons mis en exergue la classification des défauts cristallins présents, en général, dans un semiconducteur, les défauts électriquement actifs ainsi que les caractéristiques propres du CdTe.

Chapitre IV

Modélisation et simulation de la cathodoluminescence

Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous présentons un modèle permettant de simuler le phénomène de la cathodoluminescence couplé à la microscopie électronique à balayage (MEB-CL), dont l'intensité peut varier en fonction de divers paramètres tels que la tension d'accélération ou de l'intensité du faisceau électronique.

Les travaux de recherche utilisant la cathodoluminescence dans les échantillons massifs sont plus limités [122-124]. Leurs développements récents sont dus au grand intérêt porté aux composants opto-électroniques tels que les composés III-V et II-VI. Actuellement, la technologie des lasers et des transistors à effet de champ (FET) n'utilise les échantillons massifs que comme substrats, sur lesquels on dépose des couches minces.

Notre modèle permet le calcul de la cathodoluminescence en fonction de la température dans le cas du CdTe. A notre connaissance il fait introduire pour la première fois la dépendance entre la température et la CL. Les modèles théoriques proposés, dans la littérature, par différents auteurs ne tiennent pas compte (ne prennent pas en considération tous les effets) des effets de la température ; ils calculent la cathodoluminescence à la température ambiante et dans les cas exclusifs de InP [125] et GaAs [126,127].

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous donnons les différentes expressions analytiques des lois proposées dans la littérature de certains paramètres physiques à savoir : la longueur de diffusion, la largeur de la bande interdite, la concentration des porteurs intrinsèques, le coefficient d'absorption, la section efficace de capture, la mobilité et la durée de vie des porteurs de charges. Ce modèle tient donc compte de la variation de ces paramètres en fonction de la température et de l'injection. La prise en compte de la dépendance de ces paramètres avec la température est primordiale lors de la modélisation de la CL. Ensuite, et afin que le modèle de simulation physique soit complet et le plus précis possible afin de mieux décrire le phénomène physique ou de s'approcher au mieux des résultats expérimentaux de la cathodoluminescence, il était nécessaire d'étudier les effets de l'élévation de la température du matériau produit par l'irradiation, ainsi que la taille du faisceau d'électrons incidents.

IV.1. Présentation du modèle

Notre objectif est de construire un modèle de simulation physique représentatif du phénomène de la cathodoluminescence adapté au matériau CdTe. Le modèle proposé est basé sur la résolution numérique des équations de continuité, qui est analytiquement impossible.

Pour définir un cadre précis pour la simulation nous avons posé plusieurs hypothèses de base. Cela nous a permis de simplifier l'étude numérique tout en gardant un caractère assez général.

IV.1.1. Hypothèses de base

La modélisation repose sur des paramètres connus avec précision et des hypothèses simplificatrices qu'elles ont été nécessaires de considérer pour rendre les problèmes solubles. Les principales hypothèses utilisées sont les suivantes :

- L'échantillon considéré est le tellure de cadmium de type p (p-CdTe).
- La forme analytique de la fonction de génération choisie est celle proposée par Wu et Wittry [94], c'est une gaussienne modifiée de variance $(\Delta Z)^2$, centrée en Z_0 à partir de la surface (Figure IV.1). On écartera la fonction de génération qui prend en compte l'élargissement latéral du faisceau dans le semiconducteur.
- L'étude se fait à une seule dimension (la profondeur z dans le matériau), et on considère que le faisceau d'électrons incidents est normal à la surface, ce qui provoque une résolution symétrique autour de l'axe du faisceau incident.
- La profondeur de pénétration R_e des électrons a été calculée d'après le modèle de Kanaya et Okayama (Cf. chapitre II, §II.4. équation II.3) [78].
- Les défauts pris en compte, en l'occurrence les défauts de surface possédant un niveau énergétique unique E_t , de densité de pièges N_t , et la charge Q , donnent une barrière énergétique d'une hauteur (E_b) entre la surface et le volume. En général, pour un semiconducteur de type p le niveau énergétique E_t est situé, au-dessus du niveau de Fermi intrinsèque E_i .
- L'épaisseur Z_d d'une couche non radiative à la surface de l'échantillon, appelée "dead-layer", peut être soit une zone désertée en porteurs libres ou une zone écrouie [123,128]. La recombinaison non radiative des porteurs est contrôlée par le mécanisme de Shockley-Read-Hall pour les conditions de non-équilibre.
- Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont égales.
- Pour résoudre plus aisément l'équation de continuité, le quasi-niveau de Fermi des porteurs majoritaires est supposé constant.
- On suppose que le matériau semiconducteur est homogène et semi-infini et séparé en deux zones (Figure IV.1), que nous traitons séparément dans le calcul : la zone de déplétion et la zone neutre.

Dans la zone de déplétion, on suppose que la recombinaison des porteurs en excès, ainsi que la diffusion des porteurs est négligeable, tandis que dans la zone neutre, les porteurs créés par le faisceau électronique ont un régime de diffusion stationnaire, et l'intensité de cathodoluminescence provient des recombinaisons directes de ces porteurs.

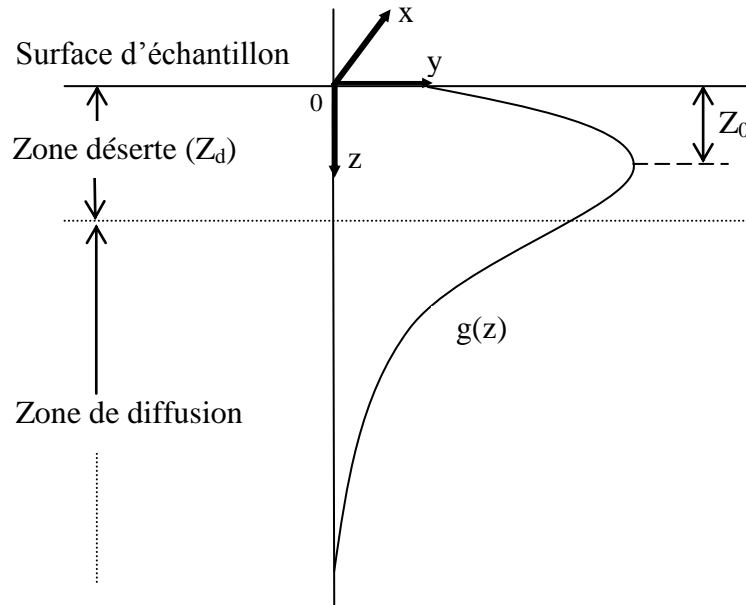


Figure IV.1: Illustration utilisée pour notre modèle. L'origine du référentiel est fixée en haut de la zone déserte, de largeur Z_d . La zone de diffusion est semi-infinie, $g(z)$ est la fonction de perte d'énergie.

IV.1.2. Surface libre d'un semiconducteur

La charge absolue (Q) qui s'accumule à la surface a pour expression [129] :

$$Q = e.N_a.Z_d = e.N_t.(1-f) \quad (\text{IV.1})$$

A partir de cette relation on peut déduire la largeur de la zone de déplétion :

$$Z_d = \frac{N_t(1-f)}{N_a} \quad (\text{IV.2})$$

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

$$f = \frac{\Delta n(0) + n_0 + n_i \cdot \exp\left(\frac{E_i - E_t}{KT}\right)}{\Delta n(0) + n_0 + \Delta p(0) + p_0 + 2n_i \cdot \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{KT}\right)} \quad (\text{IV.3})$$

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

$$n_0 = \frac{n_i^2}{N_a} \cdot \exp\left(\frac{E_b}{KT}\right) \quad (\text{IV.4a})$$

$$p_0 = N_a \cdot \exp\left(-\frac{E_b}{KT}\right) \quad (\text{IV.4b})$$

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

$$E_b = \frac{e \cdot N_a \cdot Z_d^2}{2 \cdot \epsilon} \quad (\text{IV.5})$$

La figure IV.2 représente la variation de la probabilité d'occupation en fonction du niveau d'énergie associé aux défauts de surface.

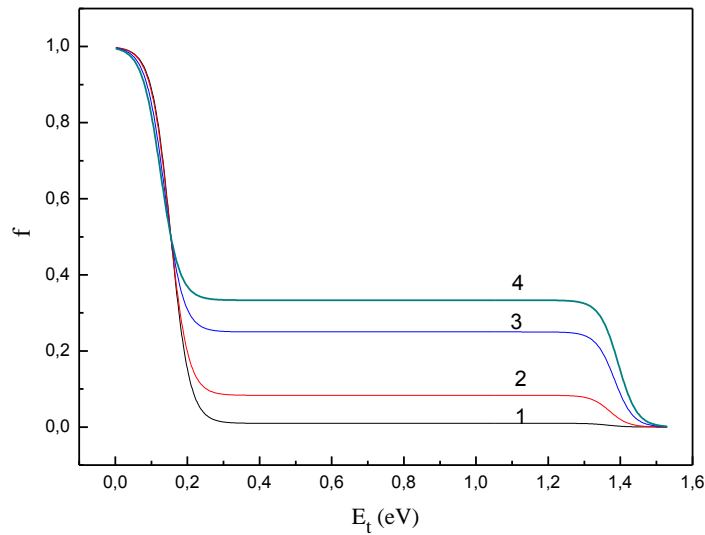


Figure IV.2: Probabilité d'occupation f en fonction du niveau des défauts E_t pour les concentrations des porteurs de charges en excès de : 1) $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 2) $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 3) $\Delta n = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 4) $\Delta n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

IV.1.3. Etablissement des équations de continuité

Pour décrire les phénomènes de transport des porteurs, on utilise les équations de continuité pour les électrons et pour les trous, qui régissent la condition d'équilibre dynamique des porteurs de charge dans le semiconducteur. Elles donnent la relation entre les courants, les mécanismes de génération et de recombinaison et la distribution spatiale et temporelle des porteurs de charges libres.

Par hypothèse la charge présente dans le matériau est due au bombardement par un faisceau d'électrons. La dynamique de charge libre est décrite par les équations de transport et de conservation de la charge, équations qui permettent de décrire les phénomènes qui régissent l'apparition de la cathodoluminescence.

Les modèles théoriques proposés dans la littérature pour le calcul de la cathodoluminescence sont basés sur la résolution de l'équation de continuité en fonction des conditions expérimentales et des conditions aux limites.

Le calcul de l'intensité de cathodoluminescence nécessite donc l'établissement et la résolution de l'équation de continuité. La connaissance de la fonction de génération des paires électron - trou est primordiale dans la résolution de l'équation de continuité.

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

IV.1.3.1. Equations générales

Le mouvement des charges est dû à la fois à l'action du champ électrique E interne ou généré, et à l'action de la diffusion. L'équation de transport permet de décrire mathématiquement à la fois ce déplacement des porteurs mais aussi les différents mécanismes de création des charges libres, de piégeage, de dépiégeage et de recombinaison. Les variations au cours du temps des densités des électrons et des trous sont données respectivement par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -div.\vec{J}_n + G_n - R_n \quad (IV.6a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -div.\vec{J}_p + G_p - R_p \quad (IV.6b)$$

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

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

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

$$G_n = G_p = G \quad (IV.7)$$

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

$$R_n = R_p = R \quad (IV.8)$$

En appliquant l'équation de continuité (IV.6) à un modèle unidimensionnel (la profondeur z), et dans le cas d'un régime permanent (stationnaire), on aboutit à la forme classique suivante :

$$div.\vec{j} = G(z) - R(z) \quad (IV.9)$$

Le taux de génération est relié à la fonction de dissipation d'énergie $\Phi(u)$ par l'équation suivante [126] :

$$G(z) = \frac{\rho}{R_e} \Phi(u) \quad (IV.10)$$

La fonction de dissipation de l'énergie $\Phi(u)$ a la forme d'une gaussienne modifiée donnée par Wu et Wittry [94] sous la forme suivante:

$$\Phi(u) = A. \exp \left[- \left(\frac{u-u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B. \exp \left(- \frac{b.u}{u_0} \right) \quad (IV.11)$$

Où $u = z.(\rho/R_e)$ étant la profondeur de pénétration réduite et normalisée du parcours de Kanaya et Okayama, ρ la densité du semiconducteur en (g/cm^3) et R_e est la profondeur de pénétration des électrons, exprimée en (g/cm^2) proposée par Kanaya et Okayama [78].

Les constantes A , B , b , u_0 , Δu , existant dans l'expression de $\Phi(u)$ sont calculées pour le cas de CdTe. Après le fit des courbes expérimentales et théoriques de $\Phi(u)$, on aboutit aux valeurs suivantes [130]: $\Delta u=0.17$, $u_0=0.057$, $b=3$, $B/A=0.5$

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

$$\int_0^{+\infty} \Phi(u) du = G_0 \quad (IV.12)$$

G_0 est le taux de génération total ($cm^{-3}.s^{-1}$), donné par :

$$G_0 = \frac{J_b \cdot E_0 \cdot (1-f)}{e \cdot E_{e-h}} \quad (\text{IV.13})$$

J_b et E_0 sont respectivement la densité de courant et l'énergie des électrons, E_{e-h} l'énergie de création d'une paire (e-h) et f la fraction de l'énergie des électrons rétrodiffusés.

Le calcul de l'intégral de $\phi(u)$ (relation IV.11) entre 0 et $+\infty$ donne :

$$\int_0^{+\infty} \Phi(u) du = A \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \Delta u \right) \left[1 - \text{erf} \left(\frac{u_0}{\Delta u} \right) \right] - B \left(\frac{u_0}{b} \right) \quad (\text{IV.14})$$

La constante A peut être calculée à partir des deux relations (IV.13) et (IV.11), on obtient la valeur suivante :

$$A = \frac{2 \cdot J_b \cdot E_0 \cdot (1-f)}{e \cdot E_{e-h} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \Delta u \left[1 + \text{erf} \left(\frac{u_0}{\Delta u} \right) \right] - B \left(\frac{u_0}{b} \right)} \quad (\text{IV.15})$$

IV.1.3.2. Résolution de l'équation de continuité dans la zone de déplétion

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

$$\vec{J}_n = -D_n \overrightarrow{\text{grad}}(\Delta n) - \Delta n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \quad (\text{IV.16a})$$

$$\vec{J}_p = -D_p \overrightarrow{\text{grad}}(\Delta p) + \Delta p \cdot \mu_p \cdot \vec{E} \quad (\text{IV.16b})$$

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

μ_n (μ_p), D_n (D_p) représentent, respectivement, la mobilité et le coefficient de diffusion des électrons (des trous) reliés par la relation d'Einstein :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{KT}{e} \quad (\text{IV.17a})$$

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{KT}{e} \quad (\text{IV.17b})$$

K est la constante de Boltzmann, T la température du milieu et e la charge électrique élémentaire.

\vec{E} le champ électrique obtenu par l'intégration de l'équation de Poisson est donnée par :

$$\text{div. } \vec{E} = -\frac{e.N_a}{\varepsilon} \quad (\text{IV.18})$$

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

$$E(z) = -\frac{e.N_a(z-Z_d)}{\varepsilon} \quad (\text{IV.19})$$

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

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

$$\frac{dJ_n}{dz} = G_n(z) - R_n(z) \quad (\text{IV.20a})$$

$$\frac{dJ_p}{dz} = G_p(z) - R_p(z) \quad (\text{IV.20b})$$

Lorsqu'on introduit les équations (IV.16), (IV.18) et (IV.19) dans l'équation (IV.20) on aura :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} + \mu_n \frac{e.N_a}{\varepsilon} (z - Z_d) \frac{d\Delta n(z)}{dz} + \mu_n \frac{e.N_a}{\varepsilon} \Delta n(z) = G_n(z) - R_n(z) \quad (\text{IV.21a})$$

$$-D_p \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \mu_p \frac{e.N_a}{\varepsilon} (z - Z_d) \frac{d\Delta p(z)}{dz} - \mu_p \frac{e.N_a}{\varepsilon} \Delta p(z) = G_p(z) - R_p(z) \quad (\text{IV.21b})$$

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

$$R_n(z) = R_p(z) = 0 \quad (\text{IV.22})$$

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

$$\alpha = \frac{e^2.N_a}{2.\varepsilon.KT} \quad (\text{IV.23})$$

L'équation de continuité (IV.21) devient :

$$-\frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} + 2\alpha(z - Z_d) \frac{d\Delta n(z)}{dz} + 2\alpha \Delta n(z) = \frac{G(z)}{D_n} \quad (\text{IV.24a})$$

$$-\frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - 2\alpha(z - Z_d) \frac{d\Delta p(z)}{dz} - 2\alpha \Delta p(z) = \frac{G(z)}{D_p} \quad (\text{IV.24b})$$

La résolution de ces deux équations différentielles du deuxième ordre dans la zone de déplétion donne des expressions intégrales :

$$\Delta n(z) = \exp\left[\alpha(z - Z_d)^2\right] \left\{ \begin{array}{l} \theta_n + \xi_n \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] + \int_0^z \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{2.D_n} \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)\right] dz' \\ - \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{2.D_n} dz' \end{array} \right\} \quad (\text{IV.25a})$$

$$\Delta p(z) = \exp\left[-\alpha(z - Z_d)^2\right] \left\{ \begin{array}{l} \theta_p + \xi_p F\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{D_p} F\left[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)\right] dz' \\ - F\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{D_p} dz' \end{array} \right\} \quad (\text{IV.25b})$$

Avec :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^x \operatorname{erf}(-t^2) dt \quad \text{et} \quad F(x) = \int_0^x \exp(t^2) dt$$

θ_n , ξ_n , θ_p , ξ_p sont des constantes qui seront déterminées après avoir imposé les conditions aux limites. Le détail du calcul est établi dans l'annexe B.

IV.1.3.3. Résolution de l'équation de continuité dans la zone neutre

Dans cette zone de volume, les porteurs en excès sont animés d'un mouvement de diffusion sous l'effet du gradient de leur concentration (absence de tout champ électrique).

Le flux des porteurs minoritaires (les électrons) est dû essentiellement à la diffusion, ce qui permet d'écrire la relation (IV.16) avec un seul terme, celui dû à la diffusion :

$$\vec{J}_n = -D_n \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\Delta n) \quad (\text{IV.26})$$

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

$$R_n = \frac{n - n_0}{\tau_n} = \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \quad (\text{IV.27})$$

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

$$\tau_n = \frac{L_n^2}{D_n} \quad (\text{IV.28})$$

En tenant compte des relations (IV.26) et (IV.27), on peut écrire l'équation de continuité (IV.20) sous la forme :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} = G - \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \quad (\text{IV.29})$$

La solution de cette équation différentielle est donnée par :

$$\Delta n(z) = B_n \exp\left[-\frac{(z - Z_d)}{L_n}\right] + \frac{L_n}{2.D_n} \int_{Z_d}^z G(z') \left\{ \exp\left(-\frac{|z - z'|}{L_n}\right) - \exp\left(-\frac{z + z' - 2Z_d}{L_n}\right) \right\} dz' \quad (\text{IV.30})$$

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

IV.1.4. Conditions aux limites

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

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

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

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

$$\Delta n(Z_d^-) = \Delta n(Z_d^+) \quad (\text{IV.31a})$$

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

$$\Delta p(Z_d^-) = \Delta p(Z_d^+) \quad (\text{IV.31b})$$

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

$$\Delta n(Z_d^+) = \Delta p(Z_d^+) \quad (\text{IV.31c})$$

- Condition de continuité de flux de porteurs minoritaires :

$$J_n(Z_d^-) = J_n(Z_d^+) \quad (\text{IV.31d})$$

En remplaçant $J_n(Z_d^-)$ et $J_p(Z_d^+)$ par leurs expressions (IV.16a) et (IV.16b) respectivement, la condition (IV.31d) devient :

$$\left. \frac{d\Delta n}{dz} \right|_{z=Z_d^-} = \left. \frac{d\Delta n}{dz} \right|_{z=Z_d^+} \quad (\text{IV.31e})$$

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

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

$$J_n(0) = J_p(0) = -U(0) \quad (\text{IV.31f})$$

Où $U(0)$ est le nombre total des porteurs recombinants à la surface par unité de temps et unité de surface ($\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$) (cf. l'équation III.12 du chapitre III), il peut être exprimé par [131] :

$$U(0) = \frac{V_{th} \sigma_n \sigma_p N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_p [p + n_i \exp\{\frac{E_i - E_t}{KT}\}] + \sigma_n [n + n_i \exp\{\frac{E_t - E_i}{KT}\}]} \quad (\text{IV.32})$$

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

$$n = n_0 + \Delta n(0) \quad (\text{IV.33a})$$

$$p = p_0 + \Delta p(0) \quad (\text{IV.33b})$$

L'hypothèse (§ IV.2), impose que les sections de capture des deux types de porteurs soient égales ($\sigma_n = \sigma_p$), ainsi que la vitesse thermique des électrons et des trous. La relation liant le coefficient de capture (c) à la vitesse thermique est donnée par [95] :

$$c = \sigma V_{th} \quad (\text{IV.34})$$

D'autre part, le coefficient de capture est également donné en fonction de la durée de vie des porteurs (τ) et la densité des centres de recombinaison (N_t) par la relation:

$$c = \frac{1}{\tau \cdot N_t} \quad (\text{IV.35})$$

En introduisant (IV.32) et (IV.33) dans (IV.34) on obtient :

$$U(0) = \frac{c \cdot N_t [\Delta n(0) \cdot \Delta p(0) + p_0 \cdot \Delta n(0) + n_0 \cdot \Delta p(0)]}{n_0 + \Delta n(0) + n_t + p_0 + \Delta p(0) + p_t} \quad (\text{IV.36})$$

Où les concentrations n_t et p_t sont données par :

$$n_t = N_C \exp[-(E_c - E_t)/KT] \quad (\text{IV.37a})$$

$$p_t = N_V \exp[-(E_t - E_v)/KT] \quad (\text{IV.37b})$$

Les équations précédentes (IV.31a, b, c, e, f) nous permettent de déterminer les constantes θ_p , ξ_n , ξ_p et B_n qui sont écrites comme une fonction linéaire de θ_n .

Le calcul de la constante θ_n se fait à partir d'une équation de 2^{ème} degré, qui est en l'occurrence :

$$K \cdot \theta_n^2 + L \cdot \theta_n + M = 0 \quad (\text{IV.38})$$

La solution de cette équation s'écrit :

$$\theta_n = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4 \cdot K \cdot M}}{2 \cdot K} \quad (\text{IV.39})$$

Le calcul de K, L, M, est donnée dans l'annexe B.

IV.2. Calcul auto-cohérent (self-consistent)

Nous avons vu précédemment (§IV.1.2) que la largeur de la zone de déplétion (Z_d) est reliée à la probabilité d'occupation f par l'équation (IV.2). La probabilité d'occupation f (équation IV.3) est à son tour reliée aux excès de concentration de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ à la surface libre ($Z=0$) dont les expressions sont:

$$\Delta n(0) = \exp(\alpha \cdot Z_d^2) [\theta_n + \xi_n \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)] \quad (\text{IV.40a})$$

$$\Delta p(0) = \exp(-\alpha \cdot Z_d^2) [\theta_p + \xi_p F(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)] \quad (\text{IV.40b})$$

D'autre part ces deux équations montrent clairement qu'il existe une relation entre les excès de porteurs et la largeur de la zone de déplétion Z_d .

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

convergence, permet de résoudre d'une façon self-consistante les équations de transport et déterminer les excès de porteurs pour un niveau d'excitation donnée (E_0, I_p).

IV.3. Intensité de cathodoluminescence

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

L'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle au taux de recombinaison radiative R_r qui dépend lui même de la densité de porteurs en excès Δn (dans le cas d'un semiconducteur de type p), de leur distribution (par l'intermédiaire de la fonction de génération g) et du rendement quantique interne η .

Le rendement quantique interne η , est défini comme le rapport de la durée de vie totale τ sur la durée de vie radiative τ_r [75] :

$$\eta = \frac{\tau}{\tau_r} \quad (IV.41)$$

La durée de vie totale τ peut s'écrire :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \quad (IV.42)$$

Où τ_{nr} est la durée de vie non radiative, en général, le résultat de différents processus de recombinaison non radiatifs.

Le nombre de photons créés dans l'échantillon lors du processus de recombinaison des paires électron - trou peut s'écrire :

$$N \sim \eta \quad (IV.43)$$

Pour obtenir le nombre de photons émis par l'échantillon, il faut moduler ce nombre N par leur réflexion à l'interface échantillon - air. On définit l'angle limite de réfraction θ_c au delà duquel les photons sont réfléchis dans l'échantillon :

$$\theta_c = \text{Arc sin}(n^{-1}) \quad (IV.44)$$

Où n est l'indice de réfraction du semiconducteur (pour CdTe : $n=2.79$ et $\theta_c= 21^\circ$).

Les seuls rayons lumineux émis par l'échantillon et collectés par le détecteur sont ceux qui se trouvent dans l'angle solide Ω donné par :

$$\Omega = 1 - \cos \theta_c \quad (IV.45)$$

Pour CdTe on a : $\Omega = 6.610^{-2}$ sr.

Tous les photons générés dans le matériau ne pourront être détectés car ils peuvent en plus d'être réfléchis à la surface, être absorbés lors de leur trajet vers la surface. Les pertes optiques sont alors représentées par la fonction qui peut s'exprimer par [132]:

$$A(z) = \int_0^{\theta_c} \exp\left(-\frac{\alpha \cdot z}{\cos \theta}\right) \sin \theta \, d\theta \quad (\text{IV.46})$$

Où α est le coefficient d'absorption optique.

Les radiations subissent des réflexions totales dans le matériau quand l'angle de leur incidence θ est supérieur à θ_c , qui est à peu près égal à 16° pour la majorité des semiconducteurs, ainsi leur coefficient de réflexion R est, en première approximation, indépendant de l'angle d'incidence pour $0 < \theta < \theta_c$ [133].

L'expression du terme A(z) a été, de ce fait, approximée par certains auteurs [122,123], à cause des faibles valeurs de θ_c :

$$A(z) \approx \exp(-\alpha \cdot z) \quad (\text{IV.47})$$

Le nombre de photons N_r qui ressort de l'échantillon peut alors s'exprimer par :

$$N_r = (1 - R) \int_V \Delta n(z) \cdot A(z) \cdot dz \quad (\text{IV.48})$$

V : volume de l'échantillon

$\Delta n(z)$: concentration des porteurs minoritaires en excès à la profondeur z.

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

R : coefficient de réflexion, qui peut s'exprimer à partir de l'indice de réfraction (n) par la relation [86]:

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 \quad (\text{IV.49})$$

L'intensité totale du signal de cathodoluminescence se calcule par l'équation [133] :

$$I_{CL} = (1 - R) \int_V A(z) \cdot \eta \cdot \frac{\Delta n(z)}{\tau} dz \quad (\text{IV.50})$$

L'excitation par un faisceau électronique peut être approximée par un point source localisée à une profondeur h (Figure IV.3), ce qui conduit à une simplification de la solution de l'équation de continuité des porteurs minoritaires (IV.6a). Bien que l'approximation d'un point source ne soit certainement pas une description exacte du phénomène, puisque le faisceau d'électron cède son énergie à un volume approximativement sphérique, comparable à celui de la pénétration des électrons primaires.

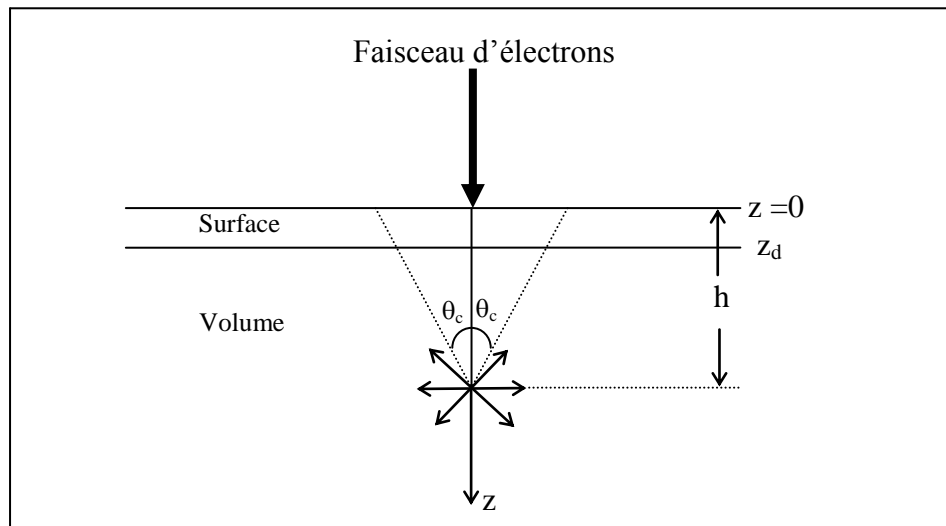


Figure IV.3: Représentation schématique d'un point source pour le calcul de l'intensité I_{CL} .

Pour simplifier davantage l'équation de l'intensité de cathodoluminescence (équation IV.50), on introduit les hypothèses suivantes :

- i) Le rendement quantique interne η est constant, ce qui n'est donc valable que pour des zones homogènes de l'échantillon.
- ii) Le coefficient de réflexion R est petit tant que l'angle critique de réflexion totale θ_c est petit ($\theta_c = 21^\circ$ pour CdTe).
- iii) La fonction de correction des pertes d'énergie utilisée est celle donnée par la relation (IV.47).
- iv) Les processus radiatifs et non radiatifs sont absolument indépendants, dans notre calcul de l'intensité de cathodoluminescence on ne considère que les processus radiatifs, la durée de vie est donc $\tau = \tau_r$. La zone de déplétion en surface ayant la largeur Z_d ne produit aucune recombinaison radiative.

Dans notre travail, nous avons utilisé le modèle simplifié de faible injection, ce qui permet d'écrire l'intensité I_{CL} pour une énergie d'émission donnée, dans le cas d'un semiconducteur de type p sous la forme finale suivante :

$$I_{CL} \approx \int_{z_d}^{+\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_r} \exp(-\alpha \cdot z) dz \quad (IV.51)$$

Cette formule n'est rigoureusement applicable qu'au cas de transition bande à bande, mais elle se prête bien à la discussion des approximations utilisées.

Remarque : L'intensité de cathodoluminescence I_{CL} globale, accessible expérimentalement, est dépendante des facteurs de réponse du système de collecte de cathodoluminescence (miroir, photomultiplicateur).

IV.4. Organigramme de calcul de la cathodoluminescence à T=300K

L'intensité de cathodoluminescences dans le matériau considéré (p-CdTe) est obtenue en poursuivant les étapes décrites dans l'organigramme représenté sur la figure IV.4, et en exécutant le programme FORTRAN traduisant cet organigramme.

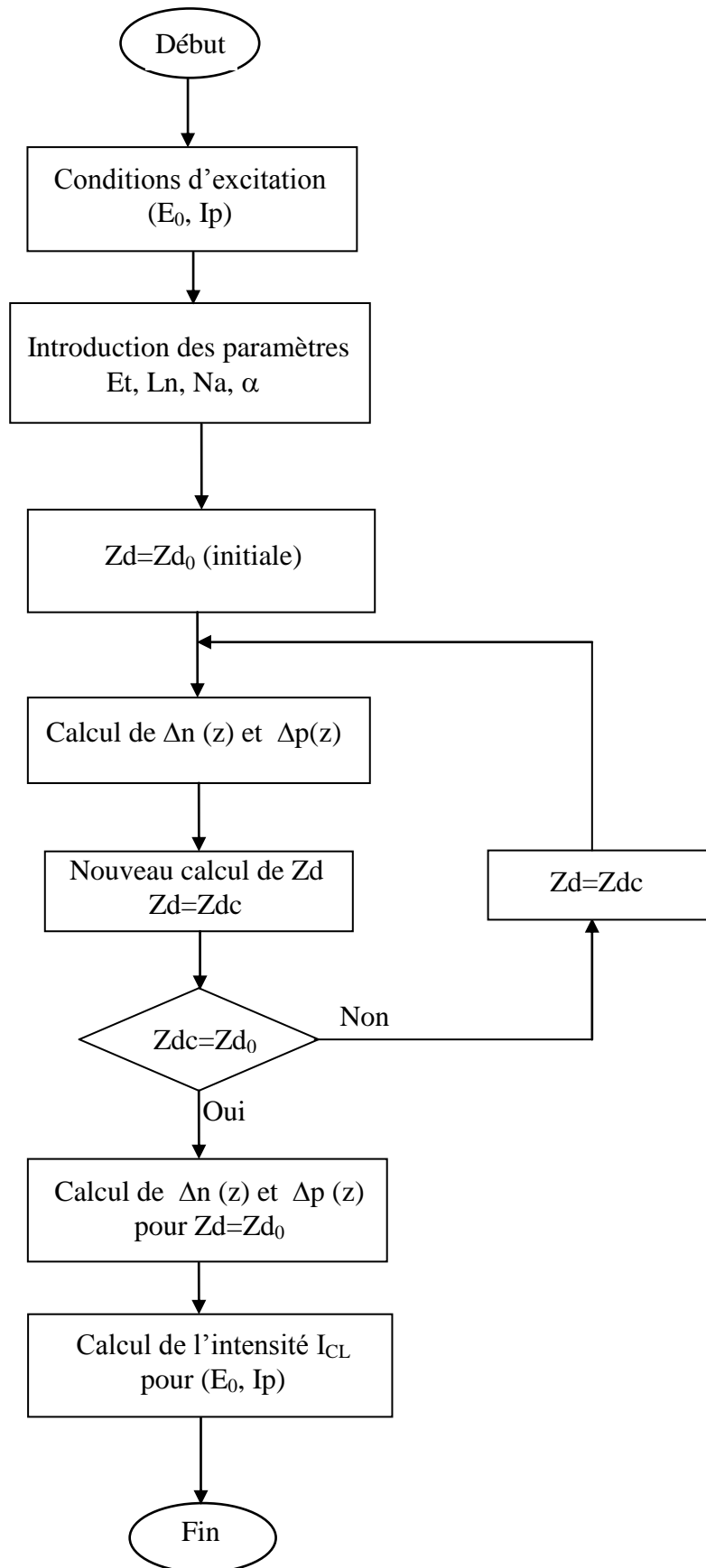


Figure IV.4: Organigramme des différentes étapes de calcul de l'intensité de cathodoluminescence à $T=300$ K.

IV.5. Effet de la température sur les propriétés du CdTe

L'influence de la température dans le matériau utilisé se traduit par une évolution de leurs propriétés physiques telles que : largeur de la bande interdite, concentration intrinsèque de porteurs, longueur de diffusion, coefficient d'absorption, mobilité des porteurs de charges, etc.

Dans cette section nous allons présenter une étude de l'effet de la température sur les paramètres physiques intervenant dans les calculs de l'intensité d'émission de CL dans CdTe. Pour mieux comprendre la dépendance en température, nous utiliserons les expressions analytiques proposées dans la littérature qui permettent d'expliquer d'une manière adéquate les différents comportements liés à ces paramètres caractéristiques. De plus, il est nécessaire de connaître l'ordre de grandeur pour la compréhension et l'interprétation des résultats obtenus par la simulation.

IV.5.1. Largeur de la bande interdite

Pour décrire l'influence de la température T sur l'énergie de la bande interdite $E_g(T)$, on utilise le modèle semi-empirique de Varshni [134] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (\text{IV.52})$$

Où $E_g(0)$ est l'énergie du gap à 0K, T est la température de mesure et α et β sont des constantes dépendantes des caractéristiques du matériau. Pour CdTe, $E_g(0)=1.606$ eV, $\alpha= 5 \times 10^{-4}$ eV/K et $\beta= 180$ K [135]

La figure IV.5 représente, (Eq. IV.52), l'évolution de la bande interdite en fonction de la température.

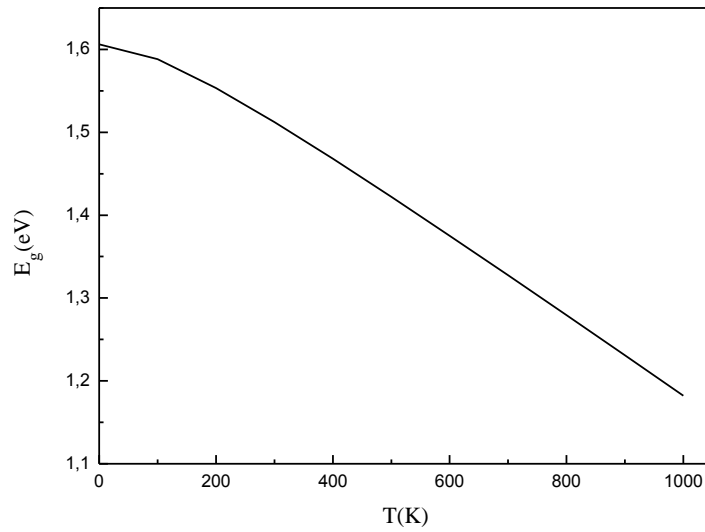


Figure IV.5: Evolution de la largeur de bande interdite en fonction de la température dans CdTe.

IV.5.2. La concentration de porteurs libres intrinsèques

La densité de porteurs intrinsèques est une fonction exponentielle du gap du matériau et de la température, c'est une caractéristique du semiconducteur à une température donnée, son expression s'écrit :

$$n_i = (N_C N_V)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_g}{2KT}} \quad (\text{IV.53})$$

Avec :

E_g la largeur de la bande interdite.

K la constante de Boltzmann.

Pour le CdTe, la densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence, N_C et N_V respectivement, est donnée par :

$$N_C \approx 4.82 \times 10^{15} \left(\frac{m_e}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot T^{\frac{3}{2}} \approx 1.76 \times 10^{14} \cdot T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.54a})$$

$$N_V \approx 4.82 \times 10^{15} \left(\frac{m_h}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot T^{\frac{3}{2}} \approx 2.10 \times 10^{14} \cdot T^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.54b})$$

La figure IV.6 représente la variation de la concentration de porteurs libres intrinsèques avec la température.

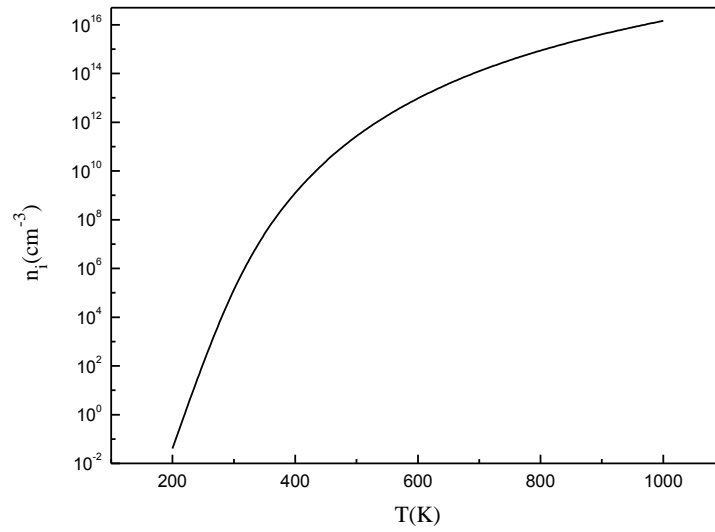


Figure IV.6: Evolution en fonction de la température de la concentration de porteurs libres intrinsèques dans CdTe.

IV.5.3. Longueur de diffusion

La dépendance en température de la longueur de diffusion des porteurs est donnée par [136] :

$$L = L_0 e^{-\frac{E_A}{2KT}} \quad (\text{IV.55})$$

Où L_0 est un facteur scalaire, E_A est l'énergie d'activation thermique (dans le cas de CdTe : $L_0 = 1.75 \mu\text{m}$, et $E_A = 13.7 \text{meV}$ [137])

La figure IV.7 représente l'évolution avec la température de la longueur de diffusion des électrons dans le matériau CdTe.

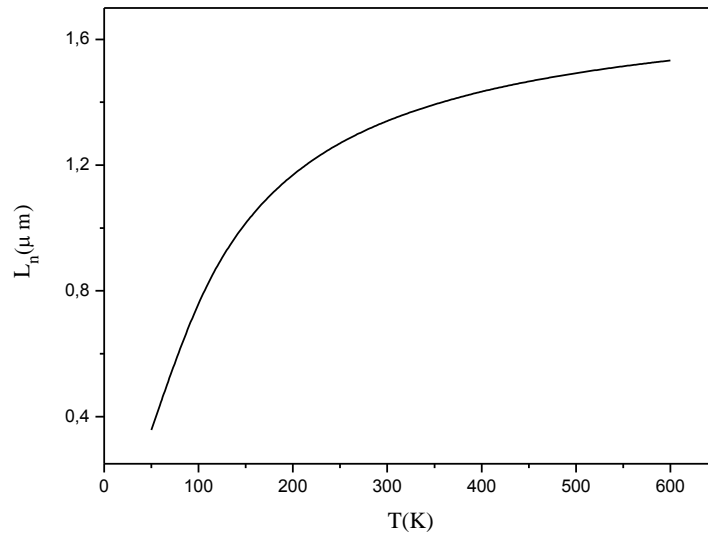


Figure IV.7: Evolution en fonction de la température de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires (électrons) dans CdTe .

Les valeurs des longueurs de diffusion L_p trouvées dans CdTe type n élaboré par une méthode de Bridgman modifiée (750°C) ou non (1100°C) [138] ou par T. H. M. (Travelling Heater Method) [27, 139], sont comprises entre 0.5 et 5 μm typiquement. Ceci est à relier à des variations de dopage ; en effet il a été observé que la longueur de diffusion diminue avec le dopage, passant de $L_p=5\mu\text{m}$ pour une concentration d'électrons libres $n=2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ à $L_p=0.13 \mu\text{m}$ pour $n=8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [27, 29, 140].

La loi décrivant la variation de la longueur de diffusion L_p en fonction de la concentration des porteurs majoritaire n dans n-CdTe à la température ambiante est donnée par [28] :

$$\text{Log}(L_p) \approx 4.9 - 0.315 \text{Log } n \quad (\text{IV.56})$$

La figure IV.8 Montre l'évolution de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires (trous) à 300 K, en fonction du niveau de dopage dans n-CdTe.

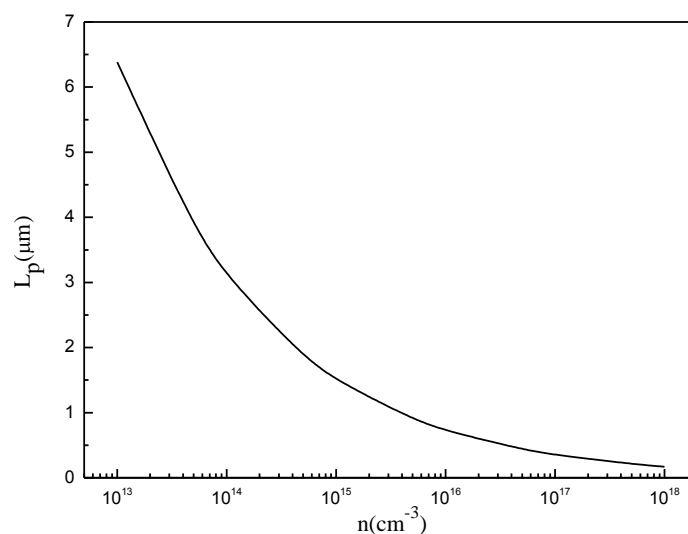


Figure IV.8: Variation de la longueur de diffusion des trous en fonction de la concentration des électrons dans CdTe type n.

IV.5.4. La mobilité des porteurs

La mobilité des porteurs est une grandeur physique, caractérisant le transport des charges, qui dépend de la nature du cristal, de la concentration des défauts et de la température [141].

IV.5.4.1. Processus de diffusion des porteurs

Les mécanismes de diffusion des porteurs de charge libres dans les semiconducteurs peuvent être classés en trois principales catégories:

- les phonons du réseau cristallin (processus de diffusion intrinsèque)
- Les imperfections du réseau cristallin (processus de diffusion extrinsèque)
- Les interactions porteurs-porteurs.

Les deux premiers mécanismes sont prépondérants dans le cas du CdTe.

Les expressions analytiques de la mobilité, proposées dans la littérature, dépendent principalement de la température et du domaine de sa variation.

B. Segall et al [142] ont étudié la mobilité des électrons dans un monocristal du tellure de cadmium très pure, l'expression de la mobilité donnée dépend du mécanisme de diffusion considérées :

- Diffusion par les phonons acoustiques (potentiel de déformation acoustique (dp)) :

$$\mu_{dp} \approx 1.5 \times 10^5 \left(\frac{300}{T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.57})$$

- Diffusion par les phonons acoustiques : potentiel piézoélectrique (pz)

$$\mu_{pz} \approx 1.9 \times 10^6 \left(\frac{300}{T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.58})$$

Dans un monocristal de CdTe très pur ou dopé n, à basse température la diffusion par les impuretés ionisées et par les phonons optiques polaires ($50 < T < 300\text{K}$), est prépondérante et limite la mobilité des porteurs (électrons) [142], alors qu'à haute température, se sont les diffusions par les phonons optiques polaires et phonons acoustiques qui deviennent prépondérantes, et qui limitent de manière importante la mobilité des électrons [143].

V. D. Popovych et al. [144] ont étudié la mobilité des trous dans CdTe : Cl monocristallin de type p, pour l'intervalle de températures ($310 < T < 420\text{ K}$).

La mobilité liée au processus de diffusion par les phonons optiques polaires (pop) est décrit par la relation [145]:

$$\mu_{pop} = 57 \left[\exp \left(\frac{252}{T} \right) - 1 \right] \approx 4 \times 10^{-5} T^{-\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.59})$$

La limitation de la mobilité liée à la diffusion par les impuretés ionisées est fortement dépendante de la température ($\mu_{imp} \sim T^{\frac{3}{2}}$) [146], la diffusion par les impuretés ionisées sera en général dominante à basse température [144].

$$\mu_i = \frac{8\sqrt{2}\varepsilon^2(KT)^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}} z^2 q^3 N_t m_h^{\frac{1}{2}} \ln \left[1 + \left(\frac{3\varepsilon KT}{z q^2 N_t^{\frac{1}{3}}} \right)^2 \right]} \quad (\text{IV.60})$$

Z : charge ionique de l'impureté (Z=1)

q : charge de l'électron

K : constante de Boltzmann

ε : constante diélectrique statique

N_t : concentration des centres ionisés (impuretés ionisées).

m_h : masse effective des trous

D. Kranzer [147] a mesuré la mobilité totale des trous ($\mu \sim T^{-1.8}$) dans p-CdTe pour une température variant entre 240 et 360 K. Il a également montré que la diffusion par les phonons optiques polaires et au potentiel de déformation acoustique ($\mu_{Ac} \sim T^{-\frac{3}{2}}$) affecte la mobilité des trous de manière importante pour $T < 300\text{K}$.

A noter que les valeurs de la mobilité des électrons dans CdTe très pure à température ambiante, est de l'ordre de $1050 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Ainsi la mobilité varie de 1200 à $57000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ quand la température varie de 170 à 30 K [142].

La mobilité des trous couramment observée, a été estimée entre 80 et $100 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

IV.5.4.2. Mobilité globale des porteurs

Si l'ensemble des i mécanismes de diffusion sont simultanés, on peut écrire la mobilité globale des porteurs en fonction de la température à l'aide de la règle de Matthiessen :

$$\frac{1}{\mu_{TOT}(T)} = \sum_i \frac{1}{\mu_i(T)} \quad (\text{IV.61})$$

Les figures IV.9 et IV.10 représentent les résultats des mesures expérimentales et des calculs théoriques de l'évolution la mobilité de Hall des porteurs des électrons et des trous en fonction de la température, réalisés par différents auteurs dans le CdTe monocristallin et non dopé.

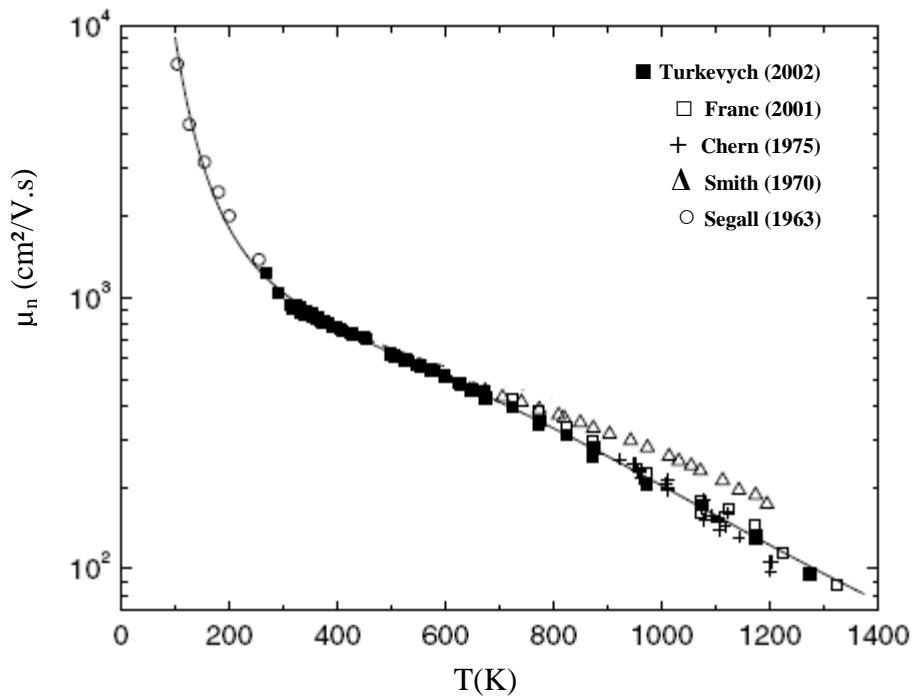


Figure IV.9: Evolution de la mobilité de Hall des électrons en fonction de la température dans CdTe. En trait plein(—) il s’agit des résultats des calculs théoriques [145].

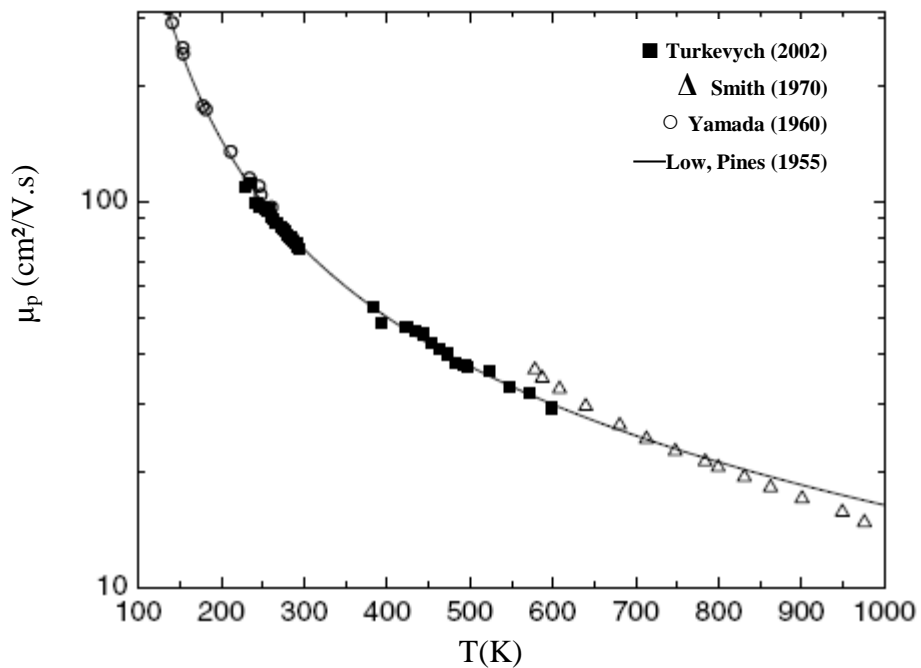


Figure IV.10: Evolution de la mobilité de Hall des trous en fonction de la température dans CdTe [145]. En trait plein(—) il s’agit des résultats des calculs théoriques [148].

IV.5.5. Coefficient d'absorption optique

L'absorption d'une radiation par un matériau semiconducteur non dégénéré peut s'effectuer suivant différents processus, dans le cas du tellure de cadmium, cette absorption est la superposition de quatre mécanismes:

- L'absorption par le réseau cristallin α_0 .
- L'absorption par les impuretés et les défauts du matériau α_i .
- L'absorption par transition de la bande de valence à la bande de conduction (ou absorption intrinsèque) α_{in} .
- L'absorption par transition intrabande (ou absorption par porteurs libres) α_{pl} .

L'expression générale du coefficient d'absorption totale α est donc égale, de façon générale, à la somme des coefficients d'absorptions partielles si les processus sont indépendants, elle s'écrit:

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_i + \alpha_{in} + \alpha_{pl} \quad (IV.62)$$

Le coefficient d'absorption dépend de plusieurs paramètres qui sont : la longueur d'onde de la radiation incidente, le dopage, la pureté ainsi que la température de l'échantillon, cette dépendance est donnée par la loi d'Urbach [149]

$$\alpha(\hbar\omega, T) = \alpha_0 \exp\left[-\sigma\left(\frac{\hbar\omega_0 - \hbar\omega}{K_B T}\right)\right] \quad (IV.63)$$

Avec :

α_0 et $\hbar\omega_0$ des constantes (pour CdTe, $\alpha_0 = 10^{12} \text{cm}^{-1}$, $\hbar\omega_0 = 1.7095 \text{ eV}$ valeur estimée)

$\hbar\omega$: énergie du photon

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \frac{2K_B T}{\hbar\omega_p} \cdot \text{tgh} \frac{\hbar\omega_p}{2K_B T} \quad (IV.64)$$

$\hbar\omega_p$: énergie du phonon ($\hbar\omega_p = 50 \text{ meV}$ pour CdTe)

σ_0 : constante ($\sigma_0 = 3$ à 300 K)

K_B : constante de Boltzmann.

IV.5.5.1. Variation du coefficient d'absorption avec la température

Sur la figure IV.11, est représentée la courbe de la variation du coefficient d'absorption en fonction de la température, calculée à partir de la formule (IV.63) et pour une énergie de la radiation incidente $h\nu=1.538$ eV.

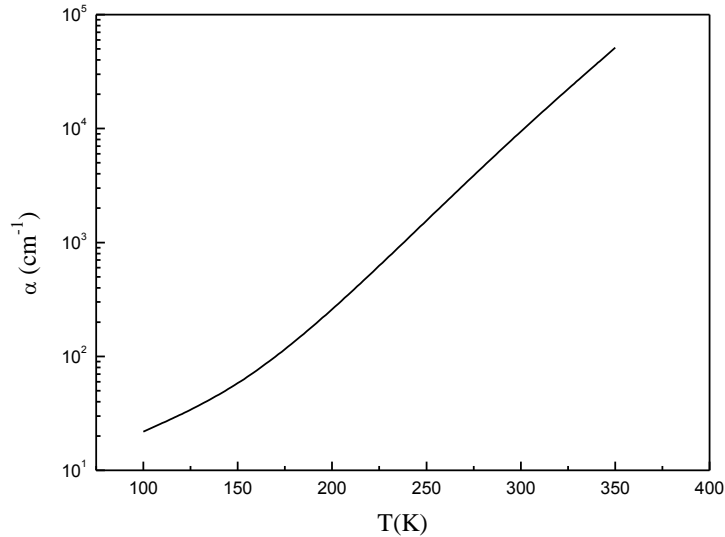


Figure IV.11: Evolution en fonction de la température du coefficient d'absorption optique dans CdTe pour une énergie de radiation incidente $h\nu=1.538$ eV.

IV.5.5.2. Variation du coefficient d'absorption avec l'énergie de la radiation incidente

Sur la figure IV.12 nous avons reporté les courbes de la variation du coefficient d'absorption pour différentes valeurs de la température T de l'échantillon calculées d'après l'expression (IV.63).

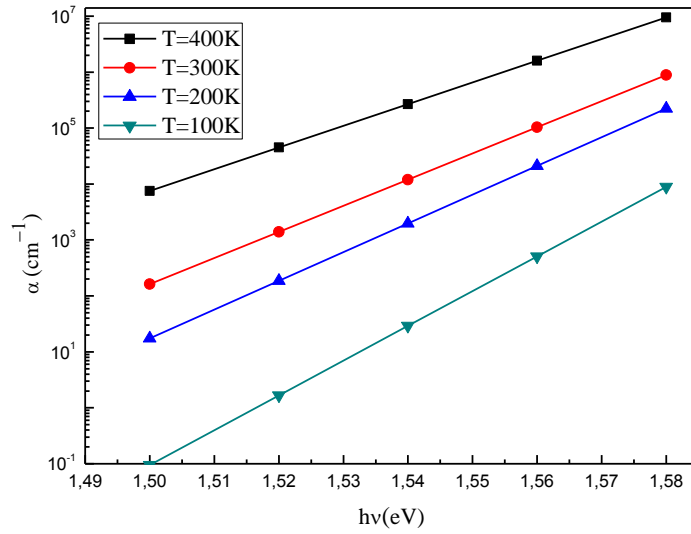


Figure IV.12: Variation du coefficient d'absorption optique en fonction de l'énergie du photon incident pour différentes températures dans CdTe.

IV.5.6. Les durées de vie des porteurs

La durée de vie effective des porteurs de charge est donnée par [150] :

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{SRH}} + \frac{1}{\tau_A} = \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_{surface}} \quad (IV.65)$$

$$\frac{1}{\tau_r} = B_{radiatif} p \quad (IV.66a)$$

$$\frac{1}{\tau_{SRH}} = \sigma \bar{V} N_{défaut} \quad (IV.66b)$$

$$\frac{1}{\tau_A} = B_{Auger} P^2 \quad (IV.66c)$$

Où τ_r , τ_{SRH} , τ_A , τ_B et $\tau_{surface}$ sont, respectivement, la durée de vie radiative, de Shockley-Read-Hall, d'Auger, du volume et de la surface.

σ la section efficace de capture.

\bar{V} la vitesse moyenne des porteurs libres.

$N_{défaut}$ la densité de défauts.

P la densité des trous libres.

$B_{radiatif}$ et B_{Auger} des constantes qui dépendent du matériau.

Dans le cas de CdTe, le type de recombinaison dominant est une recombinaison bande à bande radiative, avec une durée de vie mesurée $\tau_B = 360$ ns à la température ambiante et pour un monocristal non dopé [151].

La durée de vie radiative τ_r , dépend de la concentration du dopage, elle varie de 780 ns à 8.8 μ s [151], sa variation en fonction du dopage (cas p-CdTe) est donnée par la relation: $\tau_r = \frac{1}{B_r p}$, où B_r est le coefficient de recombinaison radiative, dans la littérature les valeurs trouvées varient de 3.8×10^{-10} cm³/s [152] à 3×10^{-9} cm³/s [153] à 4.3×10^{-9} cm³/s [154]. La variation de la durée de vie radiative en fonction du dopage est représentée sur la figure IV.13

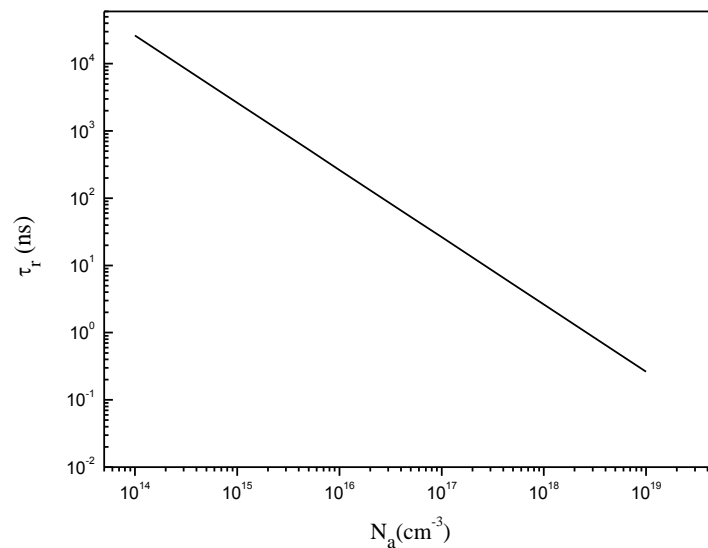


Figure IV.13: Variation de la durée de vie radiative en fonction du dopage dans CdTe.

IV.5.7. Sections efficaces de capture des défauts

Comme nous l'avons vu précédemment (cf. chapitre III, §7.1), il existe 4 processus possibles qui permettent de définir le comportement des centres profonds, qui sont la capture et l'émission individuelle d'électrons et de trous. Le processus de capture est caractérisé par une section de capture σ .

Les sections efficaces de capture $\sigma_{n,p}$, traduisent l'aire dans laquelle le porteur libre doit s'approcher du centre pour être capturé. Plus cette distance est grande, plus le centre intervient facilement dans le processus de génération – recombinaison (à environ 10^{-12} cm² on parle de forte section de capture et à environ 10^{-20} cm² on parle de faible section de capture).

La valeur de la section de capture d'un défaut (piège, centre recombinant...) représente le caractère plus ou moins répulsif ou attractif d'un défaut vis à vis d'un porteur de charge libre et représente la probabilité de capture de ce porteur par défaut. Cette section de capture σ sera caractéristique de l'état de charge du défaut avant la capture du porteur de charge. Plus le défaut possède un caractère attractif, plus la section de capture sera grande et inversement.

La variation de la section efficace de capture des électrons en fonction de la température, a pour expression [155]:

$$\sigma_n = \sigma_n^\infty \exp\left(-\frac{E_B}{K_B T}\right) \quad (\text{IV.67})$$

Où σ_n^∞ est une constante et E_B l'énergie d'ionisation thermique (pour CdTe, $\sigma_n^\infty = 8.2 \times 10^{-16} \text{cm}^2$ et $E_B = 0.05 \text{eV}$)

La figure IV.14 illustre l'évolution de la section efficace de capture des électrons σ_n en fonction de la température.

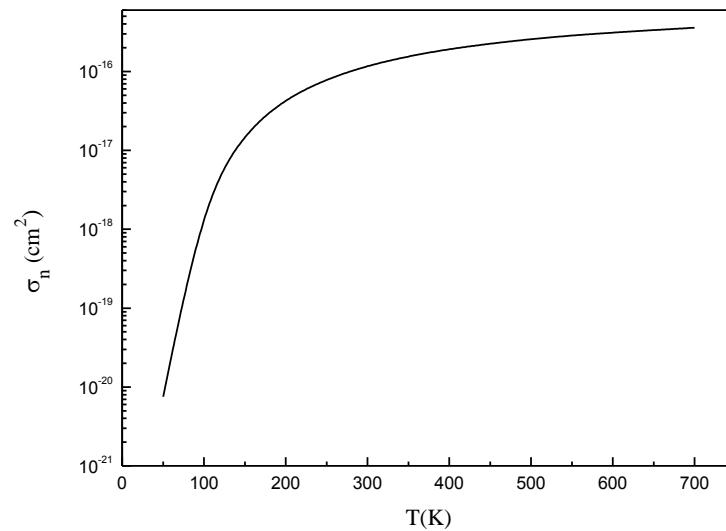


Figure IV.14: Variation de la section efficace de capture des électrons par un défaut en fonction de la température dans CdTe.

IV.6. Vitesse de recombinaison en surface

La génération de charges se fait près de la surface et l'effet de la vitesse de recombinaison à la surface est très important. L'état de la surface peut être caractérisé par la vitesse de recombinaison en surface. A ce titre, nous en avons tenu compte. Dans l'étude de simulation qui sera présentée dans le présent chapitre, nous considérons qu'il existe des recombinaisons en surface. Ceci signifie que la vitesse de recombinaison a évidemment une grande importance et son influence est reportée, ainsi que d'autres paramètres, au chapitre suivant.

Nous avons vu, (voir §IV.1.3.2 et §IV.1.4), que le flux des porteurs minoritaires dans la zone de déplétion s'écrit :

$$J_n = -D_n \frac{d\Delta n}{dz} - \Delta n \cdot \mu_n \cdot E \quad (\text{IV.68})$$

$$J_n(0) = -U(0) \quad (\text{IV.69})$$

On peut résoudre l'équation de continuité en utilisant des conditions aux limites appropriées ($z = 0$), on obtient alors :

$$D_n \cdot \left. \frac{d\Delta n(z)}{dz} \right|_{z=0} = S \cdot \Delta n(z)|_{z=0} \quad (\text{IV.70})$$

Avec S la vitesse de recombinaison à la surface de l'échantillon.

En introduisant l'équation (IV.70) dans (IV.68), et en égalisant les équations (IV.68) et (IV.69), nous obtenons :

$$S \cdot \Delta n(0) + \Delta n(0) \cdot \mu_n \cdot E(0) = U(0) \quad (\text{IV.71})$$

$$S = \frac{U(0)}{\Delta n(0)} - \mu_n \cdot E(0) \quad (\text{IV.72})$$

Avec :

$$E(0) = \frac{e \cdot N_a \cdot Z_d}{\epsilon} \quad (\text{IV.73})$$

$$\mu_n = \frac{e \cdot D_n}{KT} \quad (\text{IV.74})$$

$$U(0) = \frac{V_{th} \sigma_n \sigma_p N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_n [n + n_i \cdot \exp(\frac{E_t - E_i}{KT})] + \sigma_p [p + n_i \cdot \exp(\frac{E_i - E_t}{KT})]} \quad (\text{IV.75})$$

L'expression de la vitesse de recombinaison à la surface devient donc :

$$S = \frac{U(0)}{\Delta n(0)} - \frac{e^2 D_n N_a Z_d}{\epsilon K T} \quad (\text{IV.76})$$

Remarques :

- La vitesse de recombinaison en surface S est très petite devant à la fois ce qu'on peut appeler une vitesse de génération $\alpha.D$, et à la vitesse de diffusion en volume $L/\tau_B = (D/\tau_B)^{1/2}$ des porteurs (α : coefficient d'absorption, D : constante de diffusion, L : longueur de diffusion, τ_B : durée de vie volumique).

- La vitesse de recombinaison en surface est souvent exprimée sous forme réduite $V_s = \frac{S}{V_d}$, où $V_d = \frac{L}{\tau}$.

- Les centres recombinants les plus actifs se situent proches du milieu du gap.

La figure IV.15 présente la variation de la vitesse de recombinaison en surface S en fonction du niveau d'énergie E_t des pièges dans le CdTe.

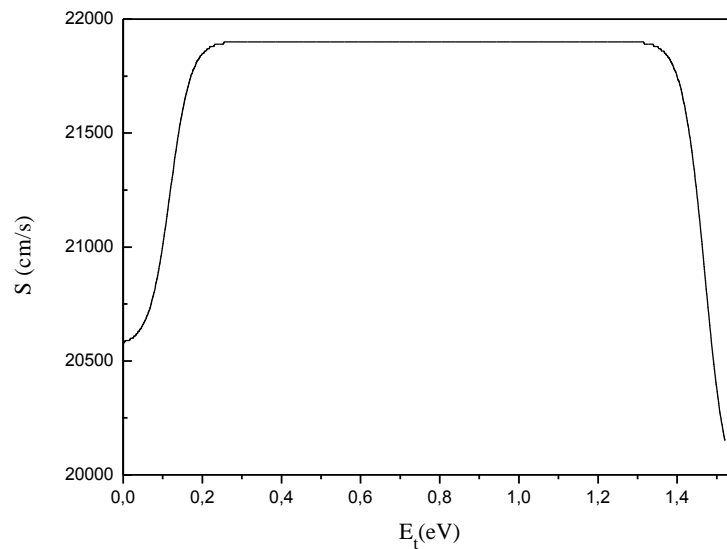


Figure IV.15: Variation de la vitesse de recombinaison en surface en fonction du niveau d'énergie introduit par le défaut de surface calculée pour le cas de CdTe. ($\Delta n = \Delta p = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $Z_d = 10^{-7} \text{ cm}$, $N_a = 10^{17}$, $\sigma = 10^{-14} \text{ cm}^2$, $V_{th} = 2 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$).

IV.7. Diamètre du faisceau d'électrons

Le diamètre final du faisceau dépend de la luminosité de la source d'électrons, des aberrations des lentilles et de l'énergie d'accélération des électrons. Dans le cas du microscope électronique à balayage le système focalisateur d'électrons est composé de trois lentilles (une lentille électrostatique cathodique constitué par le canon à électrons, et deux lentilles magnétiques : le condenseur et l'objectif), et dans l'hypothèse où l'ensemble électro-optique n'est pas parfait, des défauts sont introduits dans les images obtenues, des distorsions que l'on désigne sous le nom général d'aberrations. Le diamètre réel de la sonde électronique est la somme quadratique de ces aberrations, il est donné par [156] :

$$d = \sqrt{d_0^2 + d_c^2 + d_d^2 + d_s^2} \quad (\text{IV.77})$$

- Diamètre Gaussien :

Le diamètre Gaussien d_0 de la sonde est donné par la relation :

$$d_0 = \sqrt{\frac{0.32 I}{E \cdot \alpha}} \quad (\text{IV.78a})$$

Où I est l'intensité du courant de la sonde s'exprimant en ampères, E est la tension d'accélération qui s'exprime en volts, α et l'angle d'ouverture du faisceau électronique s'exprimant en radians et d_0 s'exprime en centimètres.

- Aberration chromatique :

Le diamètre d_c est donné par la formule :

$$d_c = \frac{\Delta E}{E} \cdot C_c \cdot \alpha \quad (\text{IV.78b})$$

Où C_c est le coefficient d'aberration chromatique ($C_c=1$ cm), $\Delta E/E$ est la variation relative de la tension ($\Delta E/E \approx 10^{-4}$) et ΔE est la dispersion énergétique des électrons.

- Aberration de diffraction :

L'expression du diamètre de la diffraction est donnée par :

$$d_d = \frac{1.5210^{-7}}{\sqrt{E} \alpha} \quad (\text{IV.78c})$$

- Aberration de sphéricité :

Le diamètre d_s est donné par la relation :

$$d_s = \frac{1}{2} \cdot c_s \cdot \alpha^3 \quad (\text{IV.78d})$$

Où C_s est le coefficient d'aberration de sphéricité, $C_s=2.5 \text{ cm}$.

La figure IV.16 représente la variation du diamètre d en fonction de l'angle d'ouverture α calculé à partir de la relation (IV.76).

Le diamètre du faisceau d'électrons à la surface de l'échantillon (diamètre de la sonde d'électrons) est typiquement dans la gamme de 10 nm à 100 nm et il varie en fonction de l'énergie et du courant du faisceau.

L'intensité I_0 électroniquement admissible dans une sonde de diamètre d compte tenu des aberrations du système d'optique électronique délivrant le faisceau est donnée par [157] :

$$I_0 = 0.016 V_0 d^{8/3} \quad (\text{IV.79})$$

Où I_0 est l'intensité de la sonde qui s'exprime en (μA), V_0 est la tension d'accélération qui s'exprime en (kV), d est le diamètre total de la sonde qui s'exprime en (μm), et le coefficient (0.016) relatif à un filament du tungstène porté à 2700 K.

Les figures IV.16, 17 et 18 représentent, respectivement, les variations du diamètre électronique en fonction de l'angle d'ouverture α , de l'intensité du courant I_0 et de l'énergie incidente E_0 .

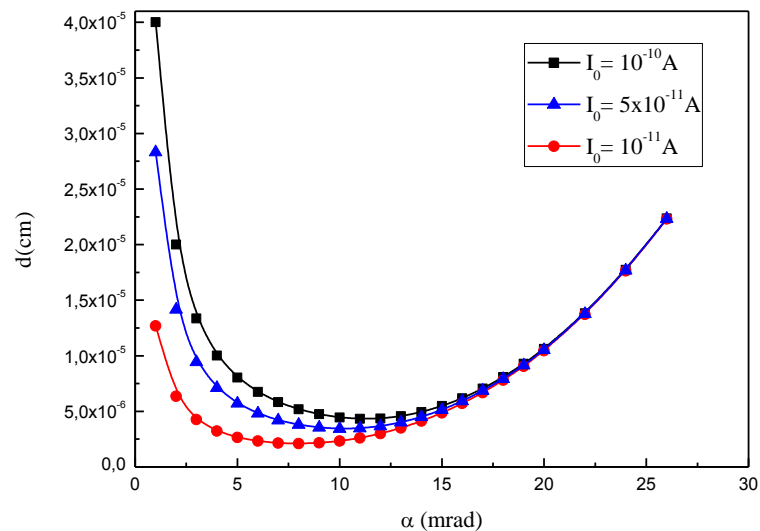


Figure IV.16: Variation du diamètre du faisceau d'électrons en fonction de l'angle d'ouverture α pour une énergie primaire $E=20 \text{ keV}$.

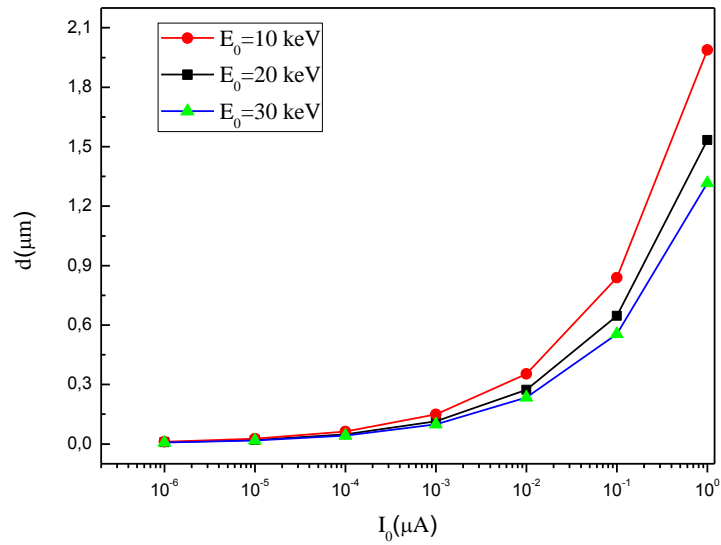


Figure IV.17: Variation du diamètre de la sonde électronique en fonction de l'intensité du courant pour des énergies d'accélération des électrons incidents $E_0=10$ keV, 20 keV et 30 keV.

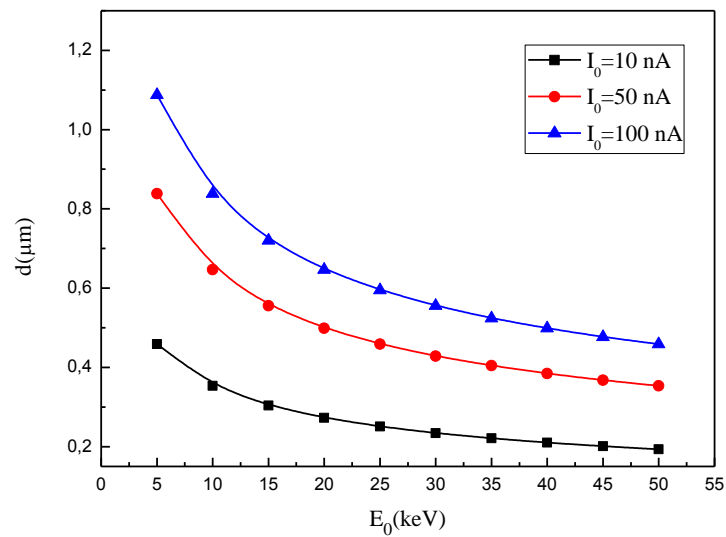


Figure IV.18: Variation du diamètre de la sonde électronique en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents pour des intensités du courant $I_0=10$ nA, $I_0=50$ nA et $I_0=100$ nA.

IV.8. Echauffement dû au faisceau d'électrons incidents

Lorsqu'un faisceau irradie une zone de la surface du matériau, une partie de son énergie absorbée est convertie en chaleur conduisant à un échauffement localisé. La quantité de chaleur ainsi transmise a pour effet d'élever la température localement.

Cette élévation de la température dépend :

- des paramètres du faisceau d'électrons (puissance, diamètre).
- des propriétés thermiques du matériau (conductivité thermique, diffusivité thermique).

IV.8.1. Etude de l'échauffement en fonction de la puissance excitatrice

L'expression de l'élévation de la température, due à l'échauffement produit par le faisceau d'électrons est donnée par l'équation [156]:

$$\Delta T = (1 - \eta) \frac{3.P_0}{2\pi.K.R_e} \quad (\text{IV.80})$$

Avec :

η : le coefficient des électrons rétrodiffusés.

P_0 : la puissance du faisceau des électrons incidents ($P_0 = E_0 . I_0$) exprimée en watts

K : la conductivité thermique du matériau exprimée en $\text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

R_e : la profondeur de pénétration des électrons exprimée en cm.

Les deux figures IV.19 et IV.20 montrent, respectivement, la variation de la température en fonction de l'énergie d'accélération et de l'intensité du courant du faisceau des électrons incidents calculée pour un matériau de CdTe. $\eta=0.43$, $K=0.075 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et R_e est calculée d'après le modèle de Kanaya et Okayama (Cf. chapitre II, §II.4. équation II.3).

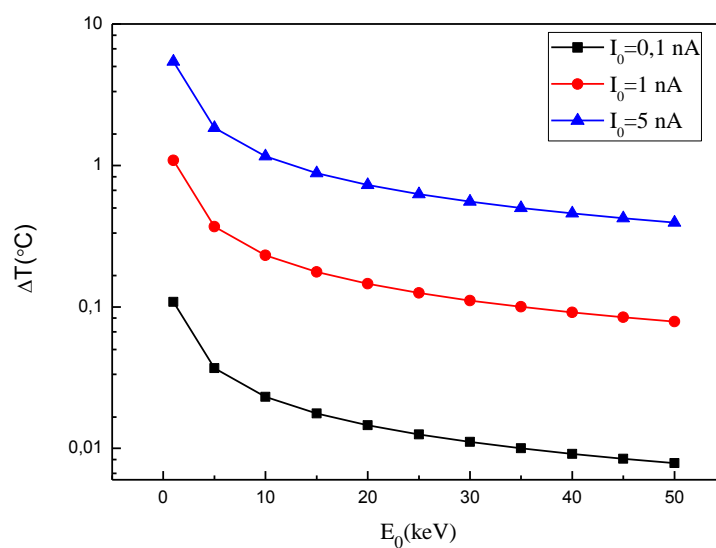


Figure IV.19: Variation de la température en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents calculée pour un matériau de CdTe.

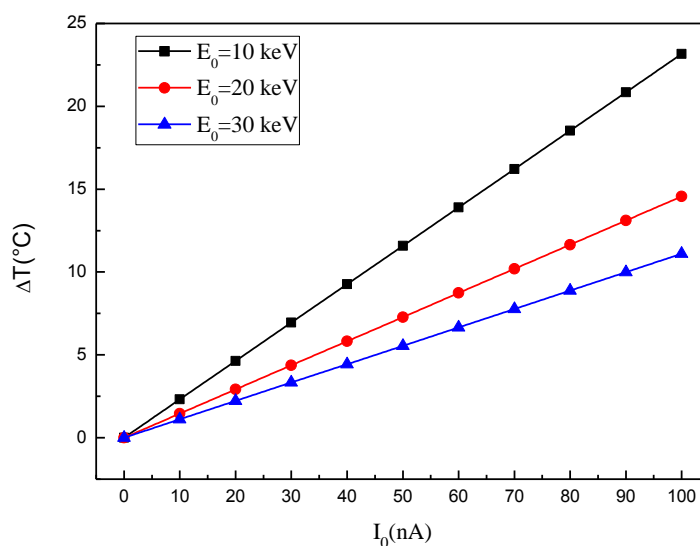


Figure IV.20: Variation de la température en fonction de l'intensité du courant des électrons incidents calculée pour un matériau de CdTe.

IV.8.2. Etude de l'échauffement en fonction du diamètre du faisceau électronique

L'élévation de la température induite lors du bombardement de l'échantillon par les électrons est estimée par l'expression suivante [158]:

$$\Delta T = 4.8 \frac{E_0 I_0}{K.d} \quad (\text{IV.81})$$

Avec :

E_0 : l'énergie d'accélération des électrons incidents exprimée en keV.

I_0 : l'intensité du courant des électrons incidents exprimée en μA .

d : le diamètre du faisceau électronique exprimé en μm .

K : la conductivité thermique du matériau exprimée en $\text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

La conductivité thermique de CdTe varie avec la température selon la loi de type [24]:

$$K(T) = AT^n \quad (\text{IV.82})$$

Où $A=230 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{0.43}$ et $n=-1.43$

IV.9. Organigramme d'algorithme de simulation de l'intensité cathodoluminescence

La Figure IV.21 représente le diagramme de toutes les étapes pour calculer l'intensité du signal de cathodoluminescence. L'algorithme de calcul est programmé sous le programme FORTRAN.

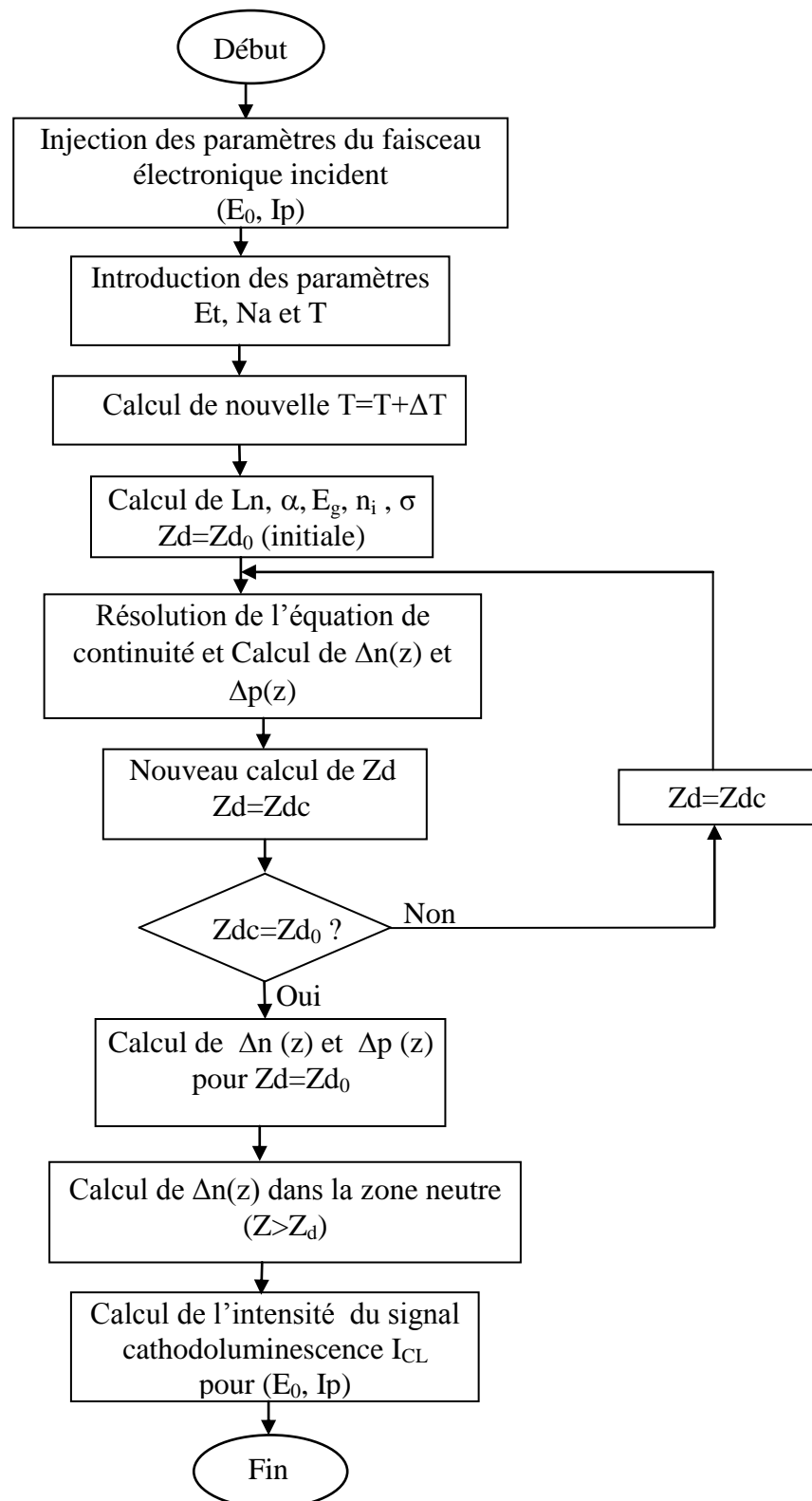


Figure IV.21 : Organigramme de l'algorithme de simulation de l'intensité du signal de cathodoluminescence tenant compte de l'effet de la température.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle analytique qui permet de calculer l'intensité totale de cathodoluminescence en se basant sur des hypothèses physiques. Les équations de continuité ont été établies et résolues dans la zone de déplétion et la zone neutre. Une méthode de calcul self-consistent permet de calculer la concentration des porteurs en excès et par suite le calcul de la largeur de la zone de déplétion à la surface du matériau.

Nous avons également donnée les expressions analytiques représentatives des propriétés du semiconducteur tels que : la longueur de diffusion, l'énergie de la bande interdite, la densité des porteurs intrinsèques, la mobilité, la durée de vie, le coefficient d'absorption, etc. Une étude des principaux effets de la température sur les paramètres physique relatifs au matériau, s'est avérée nécessaire pour comprendre leurs influences sur le comportement du signal de cathodoluminescence afin de pouvoir élaborer et vérifier un modèle fiable.

Enfin nous avons présenté l'effet thermique (échauffement) du faisceau d'électrons incidents qui peut se produire à la suite ou au cours d'une interaction électron-matière. Nous avons, également, mis en évidence les équations qui permettent l'évaluation de l'élévation de la température en fonction du faisceau d'excitation électronique (diamètre, énergie et intensité du courant).

Chapitre V

Résultats et discussion

Introduction

Nous présenterons dans ce chapitre les résultats et interprétations de la simulation numérique de l'intensité totale du signal cathodoluminescence I_{CL} dans le matériau CdTe.

Il est connu que le comportement du signal cathodoluminescence est influencé par certain nombre de paramètres, dont les plus importants sont : les paramètres du faisceau (l'énergie et l'intensité du courant des électrons primaires), les paramètres physiques du matériau (coefficient d'absorption, longueur de diffusion des porteurs minoritaire, vitesse de recombinaison en surface,...) et les paramètres du milieu ambiant tel que la température. Le diamètre du faisceau ainsi que l'élévation de la température due au bombardement électronique et la largeur de la région de déplétion sont trois autres paramètres pouvant influencer le comportement du signal cathodoluminescence.

Nous nous intéressons essentiellement à l'analyse et la discussion des courbes de la dépendance de la cathodoluminescence avec les différents paramètres cités précédemment. L'importance de ceux-ci ainsi que d'autres paramètres réside dans le fait qu'ils aident à comprendre le phénomène de cathodoluminescence.

Nous discuterons également les variations de la hauteur de barrière de potentiel, créée par la zone de déplétion au voisinage de la surface de l'échantillon, en fonction de l'intensité du courant primaire sous les effets d'un ensemble des paramètres tels que: paramètres d'injection, paramètres des défauts et du volume du matériau. Cette partie contribue énormément à apporter des explications liées au phénomène de cathodoluminescence.

En vue de confronter la théorie à la pratique une étude expérimentale de cathodoluminescence sur des échantillons de CdTe et CdZnTe a été effectuée. Les résultats des mesures expérimentales de la CL que nous avons réalisé ainsi que des études comparatives entre échantillons seront présentés et interprétés.

V.1. Etude des effets de différents facteurs externes sur l'intensité I_{CL}

V.1.1. Effet de la température

V.1.1.1. Influence de la température du matériau

Les courbes présentées sur la figure V.1 montrent une variation de l'intensité totale de cathodoluminescence en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents pour différentes températures de l'échantillon. Nous observons une diminution de l'intensité I_{CL} quand la température du matériau cible augmente. Ce phénomène a été observé également sur d'autre matériau [159-161].

On appelle extinction thermique de la luminescence la diminution de son intensité lorsque la température augmente. Généralement, un accroissement de la température conduit à une décroissance du rendement quantique de la luminescence et de sa durée de vie, parce que les processus non-radiatifs liés à l'agitation thermique (vibrations du réseau) sont plus efficaces pour les hautes températures.

Les états excités se désexcitent par ces transitions non radiatives vers des états de plus basse énergie. Inversement, en abaissant la température jusqu'à des niveaux cryogéniques, l'intensité de la luminescence peut augmenter pour atteindre un facteur supérieur à 10^3 , comme cela a été observé pour les STE (self trapped excitons : excitons piégés) [162].

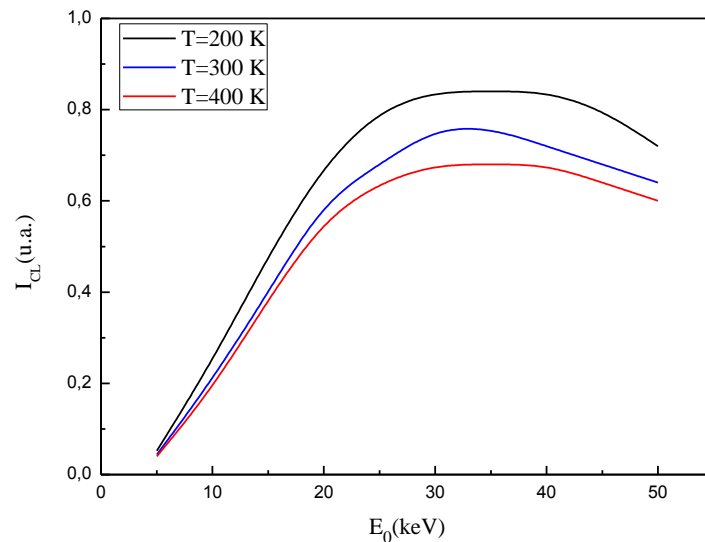


Figure V.1. Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie des électrons incidents pour différentes valeurs de la température ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.2$ eV, $Z_d=10^{-7}$ cm, $\sigma=10^{-16}$ cm², $N_a=10^{16}$ cm⁻³).

V.1.1.2. Etude de I_{CL} en fonction de la température

Les courbes de la figure V.2 montrent l'évolution de l'intensité I_{CL} en fonction de la température de l'échantillon. On remarque clairement une augmentation de l'intensité pour l'énergie incidente 20 keV lorsque la température diminue, il en est de même pour les énergies 8, 10 et 15 keV.

Concernant l'effet de l'énergie incidente, on remarque que l'intensité augmente quand l'énergie augmente pour une température donnée, l'intensité diminue avec l'augmentation de la température [160,163].

De fortes variations de l'intensité I_{CL} sont observées dans l'intervalle de températures [100K, 150K]. On peut remarquer lors de l'augmentation de la température que l'intensité de luminescence ne semble pas fortement affectée par la température ($T > 350K$). Puis, à plus haute température, la ré-émission thermique des porteurs devient dominante, ce qui se traduit par la décroissance du signal de CL.

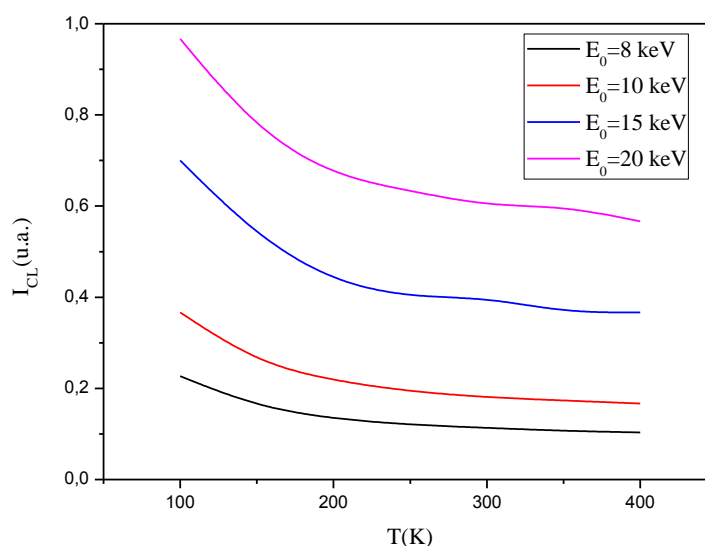


Figure V.2. Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de la température pour différentes valeurs de l'énergie d'accélération des électrons primaires ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.2$ eV, $Z_d=10^{-7}$ cm, $\sigma=10^{-16}$ cm², $N_a=10^{16}$ cm⁻³).

La figure V. 3 représente la variation de l'intensité I_{CL} en fonction de la température pour une intensité du courant variable, allant de 3.10^{-9} A à 7.10^{-9} A. Nous observons une diminution de I_{CL} lorsque la température augmente. Cette diminution de luminescence s'explique généralement par la dominance des recombinaisons non radiatives à haute température comparées aux recombinaisons radiatives.

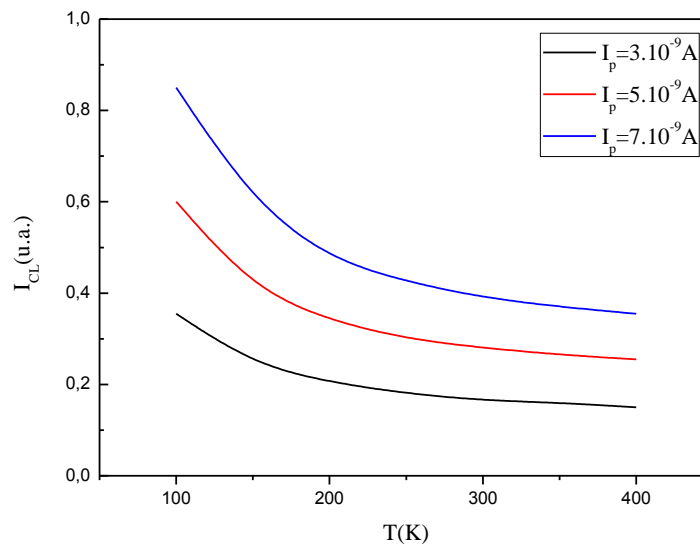


Figure V.3. Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de la température pour différentes intensités du courant du faisceau d'électrons incidents ($E_0=20$ keV, $E_i=1.2$ eV, $Z_d=10^{-7}$ cm, $\sigma=10^{-16}$ cm², $N_a=10^{16}$ cm⁻³).

V.1.1.3. Etude de l'échauffement thermique induit par le faisceau d'électrons

La figure V.4 représente la variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents avec et sans effet de l'augmentation de température ΔT , due au faisceau d'électrons incidents. On distingue clairement à partir de cette figure, l'effet de l'augmentation de la température ΔT sur l'intensité I_{CL} , qui diminue quand la température augmente. On constate que l'influence de ΔT n'apparaît d'une façon plus importante que pour les faibles énergies des électrons incidents, ce qui signifie que cette influence est négligeable pour les énergies incidentes élevées (i.e. dans le volume). L'augmentation de l'énergie incidente s'accompagne également d'une augmentation de la profondeur de pénétration et donc, correspond à une région où l'échauffement est le moins important.

Le mécanisme de conversion de l'énergie incidente en chaleur, s'agissant d'un semiconducteur à bande interdite directe est expliqué comme suit : les porteurs injectés dans le semiconducteur ont des énergies souvent très différentes des énergies E_C et E_V des extrema des bandes permises. Ces porteurs, par leur interaction avec le réseau cristallin, perdent de l'énergie et se thermalisent rapidement (temps de relaxation de l'ordre de la picoseconde) dans les extrema des bandes permises en émettant des phonons. Il en résulte que les électrons et les trous se thermalisent, respectivement dans les bandes de conduction et de valence, avant de se

recombiner. Une fraction de l'énergie incidente sera transformée en chaleur, l'autre fraction sera convertie en chaleur dans le cas où la recombinaison est purement non radiative.

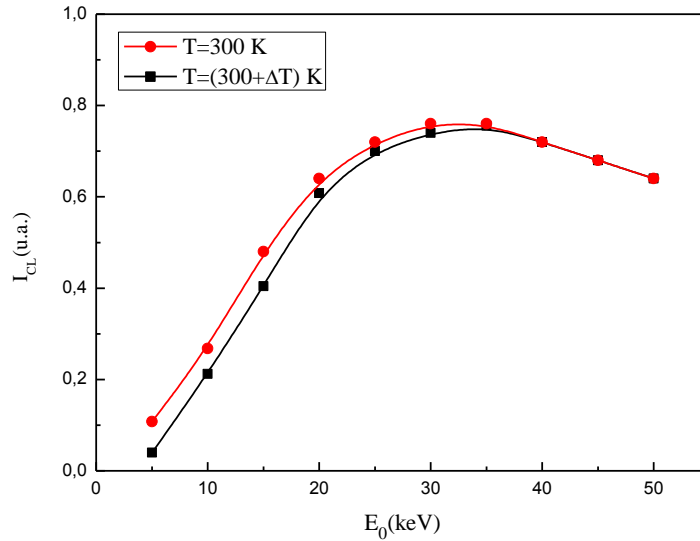


Figure V.4. Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour $T=300$ K et $T=(300 + \Delta T)$ K. ($I_p=10^{-7}$ A, $E_t=1.2$ eV, $Z_d=10^{-7}$ cm, $\sigma=10^{-16}$ cm², $N_a=10^{16}$ cm⁻³).

La figure V.5 montre la variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents tenant en compte l'élévation de température produite par l'échauffement du faisceau d'électrons incidents, pour un faible niveau d'injection ($I_p=10^{-10}$ A). Nous observons une légère différence entre les deux courbes obtenues, cette différence n'apparaît que pour des énergies comprises entre 5 et 30 keV, au delà l'intensité n'est pas affectée par la variation de la température.

On peut remarquer que les deux figures V.4 et V.5 présentent, respectivement, deux niveaux d'injection différents $I_p=10^{-7}$ A et $I_p=10^{-10}$ A, ce qui permet de différencier l'effet de l'intensité du courant sur l'augmentation de la température ΔT (cf. § IV.8.1, équation IV.80).

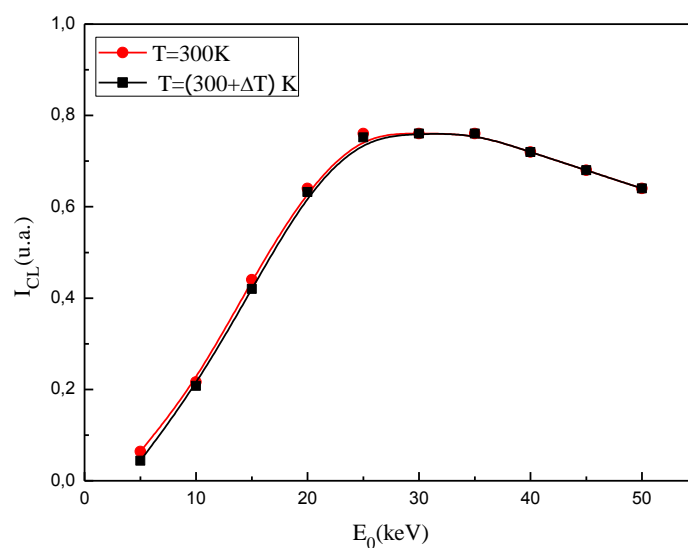


Figure V.5. Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour $T=300K$ et $T=(300 +\Delta T)$ K. ($I_p=10^{-10}$ A, $E_i=1.2eV$, $Z_d=10^{-7}cm$, $\sigma=10^{-16}cm^2$, $N_a=10^{16}cm^{-3}$).

V.1.1.4. Variation de la température en fonction de la profondeur

L'intensité du courant est un paramètre qui joue un rôle beaucoup plus important sur l'augmentation de la température, nous représentons dans la figure V.6 la variation de la température en fonction de la profondeur de pénétration pour différentes intensités du courant des électrons incidents. On remarque que la température atteint sa valeur maximale à 4.5 K au centre de la zone irradiée (zone d'impact du faisceau d'électrons), et en s'éloignant de cette zone (où la profondeur de la zone d'excitation z augmente), la température décroît et atteint progressivement sa valeur minimale.

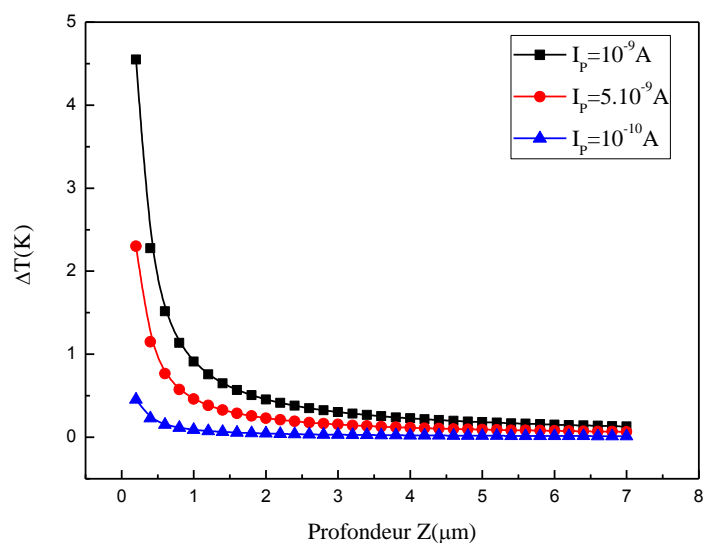


Figure V.6. Variation de la température en fonction de la profondeur z du volume de génération pour une énergie incidente $E_0=25$ keV.

V.1.2. Effet du diamètre de la sonde électronique

La taille de la sonde (diamètre du faisceau d'électrons à la surface de l'échantillon) est un paramètre important à connaître pour optimiser les paramètres de fonctionnement d'un MEB. Selon la tension d'accélération et l'intensité du courant le diamètre change.

Le diamètre est un paramètre important lors de la simulation. Afin de mieux comprendre son impact sur le comportement du signal cathodoluminescence, nous avons tracé des courbes de I_{CL} en fonction du diamètre d en considérant deux cas :

- On fixe l'énergie incidente et on fait varier l'intensité du courant.
- On fixe l'intensité du courant et on fait varier l'énergie incidente.

V.1.2.1. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction du diamètre de la sonde électronique

a) Effet de l'intensité du courant de la sonde

A partir des simulations effectuées sur le matériau CdTe pour différentes intensités du courant : 5 nA, 8 nA et 10 nA, on a obtenu les courbes de la figure V.7.

En analysant ces courbes, on peut remarquer que plus l'intensité du courant est faible plus l'intensité I_{CL} émise par le matériau est faible. En d'autre terme, l'augmentation de I_{CL} quand le

courant incident augmente s'explique par l'augmentation de la densité de porteurs minoritaires en excès.

Nous avons également remarqué que les maximums de l'intensité I_{CL} sont différents et se déplacent vers les grandes valeurs du diamètre quand l'intensité du courant augmente. Ce comportement est expliqué par une grande densité de porteurs de charges libres, créées au niveau de la zone irradiée, dont la valeur du diamètre est égale au diamètre du faisceau électronique.

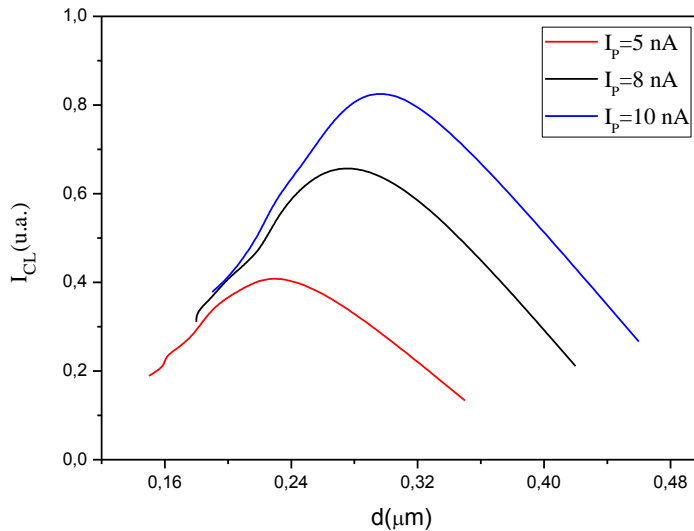


Figure V.7: Variation de l'intensité de cathodoluminescence en fonction du diamètre du faisceau d'électrons pour différentes intensités du courant incident.

b) Effet de l'énergie d'accélération du faisceau d'électrons incidents

La figure V.8 montre l'influence de l'énergie incidente sur la variation de l'intensité I_{CL} en fonction de la taille de la sonde. En cathodoluminescence, la taille du faisceau et par conséquent la résolution spatiale est fortement affectée par l'énergie du faisceau, ceci est dû au volume de dissipation d'énergie où les porteurs sont générés. Ce volume est plus grand dans le cas de la cathodoluminescence à cause des phénomènes de diffusion des porteurs. La résolution effective en CL est définie par la distance d_{CL} dont l'expression est généralement donnée par [75]:

$$d_{CL} = \sqrt{d_0^2 + R_e^2 + L_d^2}$$

Où d_0 est la taille (diamètre) de la sonde électronique, R_e la dimension latérale du volume de génération des paires électron-trou et L_d la longueur de diffusion des porteurs en excès qui dépend du matériau sondé [164,165].

Puisque la résolution spatiale est liée à cette caractérisation, il est clair qu'une diminution de l'énergie incidente entraîne une augmentation de la résolution spatiale. En effet quand on diminue l'énergie incidente ($d_{CL} \propto \frac{1}{E_0}$), le nombre de paires électron-trou générées pour une même intensité du courant de la sonde augmente.

L'intérêt de cette technique repose sur sa grande résolution spatiale latérale. Comme évoqué au chapitre 1, la résolution en CL dépend de la taille du faisceau d'électrons, de l'étalement des électrons primaires dans le matériau, autrement dit de l'extension du volume d'interaction, et également de la capacité des paires (e-h) à diffuser au delà de leur point de création.

On constate, sur la figure V.8, que l'intensité I_{CL} est d'autant plus grande que l'énergie incidente des électrons est grande, ceci est obtenu en maintenant fixe le diamètre de la sonde électronique. De plus, on remarque, pour une énergie d'accélération donnée, qu'une augmentation du diamètre provoque une augmentation de l'intensité I_{CL} recueillie. Cela trouve son explication dans le volume d'interaction électrons incidents-matière, qui dépend fortement de l'énergie du faisceau incident. L'augmentation du diamètre du faisceau s'accompagne d'une augmentation et de l'élargissement du volume d'interaction et donc une augmentation du nombre de paires électron-trou générées suivie d'une recombinaison radiative, ce qui conduit à une intensité I_{CL} plus grande.

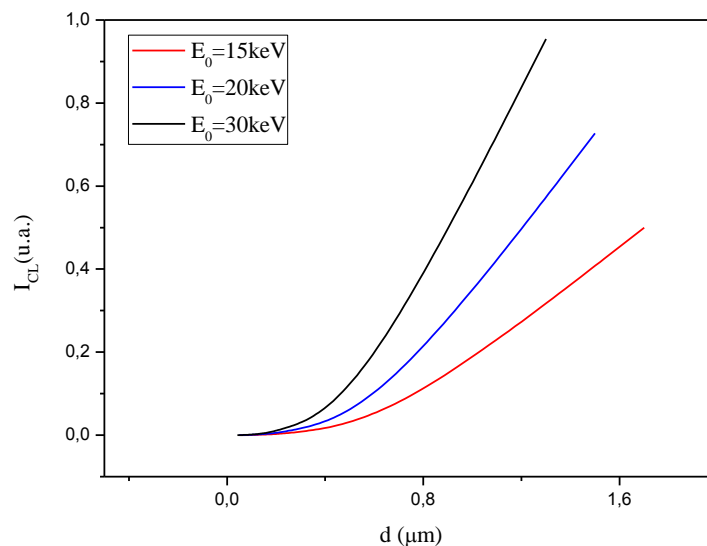


Figure V.8: Variation de l'intensité de cathodoluminescence en fonction du diamètre du faisceau d'électrons pour différentes énergies d'accélération.

V.2. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction des paramètres de surface

V.2.1. Influence des propriétés physiques des défauts

Le modèle proposé tient compte de l'influence des propriétés physiques du défaut (position du niveau d'énergie (E_t) dans la bande interdite, densité (N_t) et section efficace de capture (σ) des porteurs libres). Dans ce qui suit nous étudierons l'influence des propriétés physiques de ces défauts sur l'intensité I_{CL} à $T=300K$.

V.2.1.1. Influence de la position énergétique du défaut

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

Parmi les paramètres caractéristiques des défauts présents dans le matériau ayant une influence très importante, nous citons la position du niveau d'énergie (E_t) associé à ces défauts. Son influence est représentée sur la figure V.9. La partie basse énergie des courbes $I_{CL} = f(E_0)$ est évidemment la plus affectée par un changement de E_t . Une augmentation de E_t provoque une augmentation de l'intensité de cathodoluminescence sur toute la gamme d'énergie. Ceci peut être expliqué par la diminution de la durée de vie des porteurs de charge piégés sur les défauts introduits dans la bande interdite. En effet, des défauts ayant des niveaux d'énergie situés loin du centre de la bande interdite piègent moins de charges que ceux ayant un niveau proche du centre. On remarque que plus E_t s'éloigne du milieu de la bande interdite, le maximum de I_{CL} se trouve légèrement déplacé vers les faibles énergies (il passe de 33 à 25 keV lorsque E_t varie de 1.4 eV à 1.51eV).

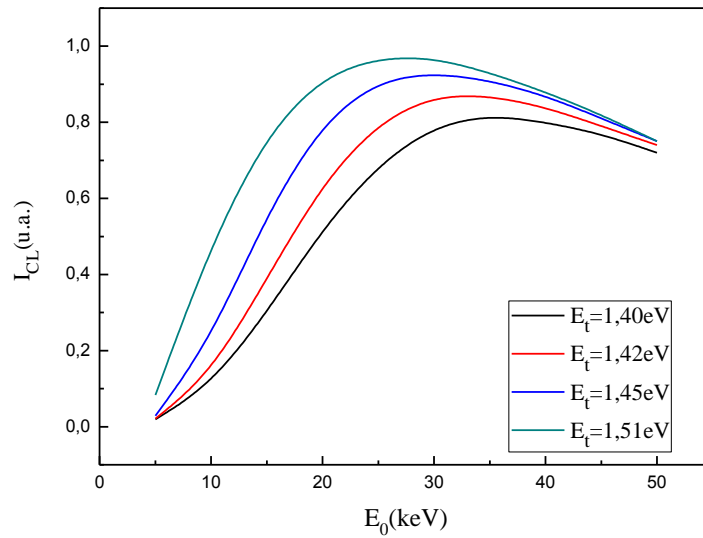


Figure V.9: Influence du niveau d'énergie des défauts sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.2.1.2. Influence de la densité des défauts de surface

Sur la figure V.10 est représentée l'influence de la densité totale des défauts N_t (piège ou centre de recombinaison) sur la variation de l'intensité de la cathodoluminescence. Ce paramètre physique a une grande influence sur l'intensité de cathodoluminescence. En effet on remarque que l'augmentation de la densité de défauts réduit l'intensité I_{CL} . En fait, à basse énergie, les porteurs excédentaires créés par le faisceau d'électrons près de la surface du matériau peuvent se recombiner par processus non radiatif, par conséquent une augmentation de la densité de défauts N_t entraîne un abaissement de l'intensité I_{CL} . On remarque, également, que lorsque l'énergie des électrons incidents augmente cela signifie l'existence d'une grande profondeur de pénétration des électrons dans le volume du matériau et par conséquent l'effet de surface diminue (ce qui se traduit par une diminution de la densité N_t) progressivement et l'intensité I_{CL} semble indépendante de la variation des valeurs de la densité de défauts de surface (pas de différence entre les courbes).

Enfin, signalons que la charge électrique du défaut dépend directement de la densité N_t (Chapitre IV§1.2, équation IV.1). On peut donc conclure que son influence est tout à fait similaire à celle de N_t .

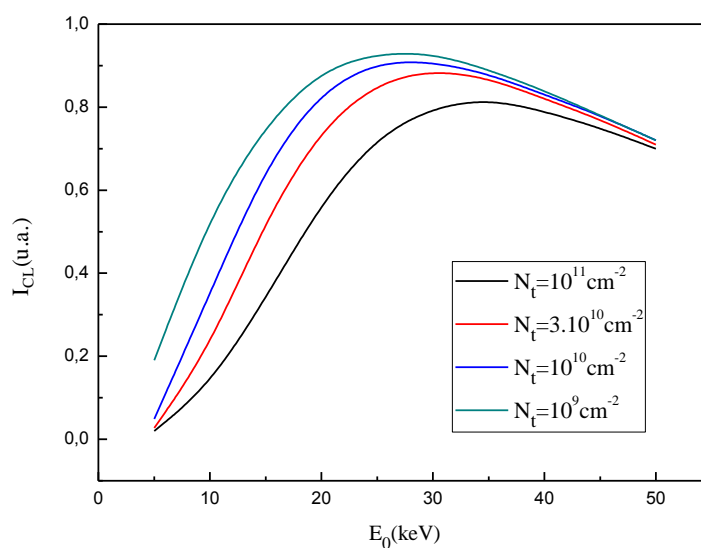


Figure V.10 : Influence de la densité de défauts sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.2.1.3. Influence de la section efficace de capture des défauts

La section efficace de capture thermique des porteurs de charges (électrons et trous) par un défaut est également, un paramètre physique caractéristique de ce défaut, il est donc important de connaître son influence sur l'intensité I_{CL} .

En analysant les courbes de la figure V.11, on remarque que pour de faibles valeurs de l'énergie d'électrons incidents, l'effet de la section de capture des électrons par les défauts de surface est important. Pour une valeur de E_0 constante, on constate que l'intensité I_{CL} est inversement proportionnelle à σ_n (I_{CL} diminue lorsque σ_n augmente). Cela peut s'expliquer par un taux de capture très élevé des porteurs en excès par les défauts de surface. Pour les grandes énergies on remarque que l'effet de la section efficace de capture devient négligeable car les porteurs générés, dans le volume, par le faisceau des électrons incidents ne sont pas influencés et ne sont donc pas capturés par les défauts de surface. A noter que le coefficient de capture C , d'un porteur libre par un défaut est directement proportionnel à la section efficace de capture σ ($C = \sigma \cdot V_{th}$) (cf. chapitre IV§1.4 équation IV.34) et son augmentation signifie la diminution de l'échange des électrons entre les défauts et la bande de conduction et donc la diminution des recombinaisons radiatives, ce qui implique la diminution de l'intensité I_{CL} .

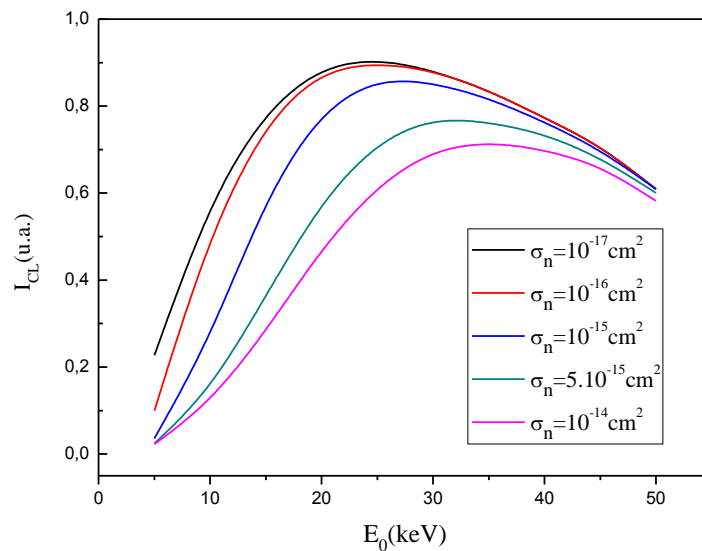


Figure V.11: Influence de la section efficace de capture des électrons par des défauts de surface sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.2.2. Influence de la vitesse de recombinaison en surface

Les effets de recombinaison en surface sont représentés par la valeur de la vitesse de recombinaison V_s (c'est la vitesse normalisée de recombinaison en surface, appelée aussi vitesse de recombinaison réduite en surface). La figure V.12 présente la variation de I_{CL} en fonction de l'énergie incidente, pour différentes vitesses de recombinaison en surface. On peut clairement voir que pour une même énergie incidente (E_0 constante) l'intensité de cathodoluminescence diminue avec l'augmentation de la vitesse normalisée de recombinaison en surface. Ceci trouve son explication par le fait que, cette augmentation entraîne une augmentation du taux de recombinaison de porteurs en excès à la surface. Nous avons indiqué auparavant que ce phénomène est lié au processus de piégeage ; un fort piégeage correspond à une grande vitesse de recombinaison de surface et donc conduit à une I_{CL} faible.

Dans le domaine des faibles énergies, la génération de charges se fait près de la surface et l'effet de la vitesse de recombinaison à la surface est très important. Au fur et à mesure que l'énergie incidente augmente, l'effet de la vitesse de recombinaison devient moindre. Nous constatons que les courbes sont identiques pour des énergies élevées ($\geq 40\text{keV}$), et s'écartent l'une de l'autre vers les énergies faibles ($< 25\text{keV}$). Le profil semble garder le même

comportement, augmentation à basse énergie, passage par un maximum puis diminution du maximum de la cathodoluminescence à haute énergie.

Les différentes courbes de la figure V.12 indiquent aussi qu'une augmentation de V_s provoque un déplacement du maximum vers les fortes énergies d'accélération : le maximum passe de 25 à 30 keV lorsque V_s varie de 20 à 10^4 . On peut également noter que la valeur $V_s = 10^4$ correspond à un cas extrême de la vitesse de recombinaison en surface, car toute courbe obtenue pour des valeurs supérieure ou égales à 10^4 (V_s varie de 10^4 à $+\infty$) se confond avec celle tracée pour $V_s=10^4$, et ne possède aucune influence de cette vitesse sur la position du maximum des courbes. Enfin on peut confirmer que l'effet de recombinaison en surface (vitesse infinie : $V_s \rightarrow \infty$) est de diminuer la concentration de porteurs minoritaires en excès Δn (cas d'un semiconducteur de type p) à la surface et d'abaisser le niveau d'injection.

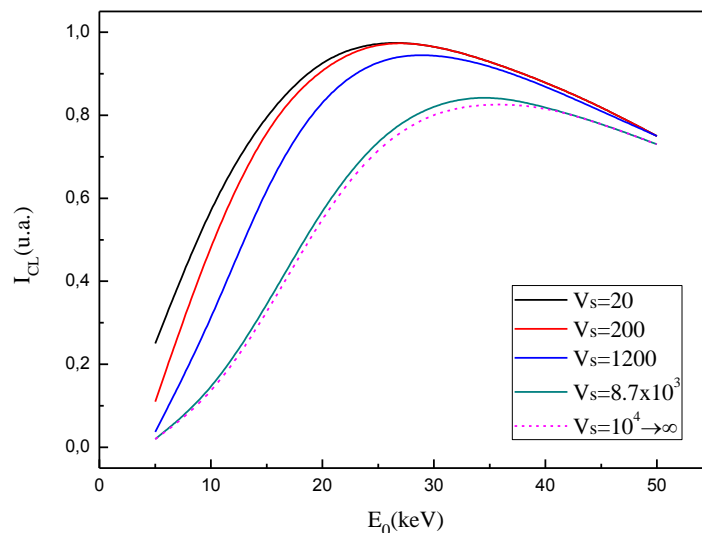


Figure V.12: Influence de la vitesse de recombinaison en surface sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.2.3. Influence de la largeur de la zone de déplétion

L'influence de la largeur de la zone de déplétion (vide de porteurs), qui apparaît au niveau de la surface du semiconducteur, sur l'intensité de cathodoluminescence est représentée sur la figure V.13. On peut remarquer que l'allure générale des courbes est la même quelque soit la valeur de la largeur de la zone de déplétion, on note une augmentation jusqu'à un maximum

puis une diminution. Il faut néanmoins remarquer que les maximums de I_{CL} sont différents. Pour $Z_d = 10^{-8}$ cm, le maximum est atteint vers 33 keV et pour $Z_d = 10^{-10}$ cm lequel le maximum est atteint à environ 26 keV. On remarque également que la largeur de la zone de déplétion joue également un rôle important dans le déplacement du maximum des courbes vers les basses énergies quand Z_d diminue, comme le montre la figure.

Un autre renseignement est à mettre à profit, ça concerne la partie de la courbe avant le maximum qui est la seule partie affectée par les différentes variations de Z_d , cela signifie que la largeur de la zone de déplétion a une influence moins importante sur I_{CL} à fortes énergies en volume. Il est aussi important de noter que le champ électrique présent dans cette zone sépare les paires électron-trou et conduit généralement à une baisse des recombinaisons radiatives en surface. L'épaisseur effective Z_d de cette zone dépend des conditions expérimentales et de la qualité de l'échantillon [123]. Signalons à la fin que l'influence de la largeur de la zone de déplétion est similaire à celle trouvée pour l'influence de la densité des défauts en surface.

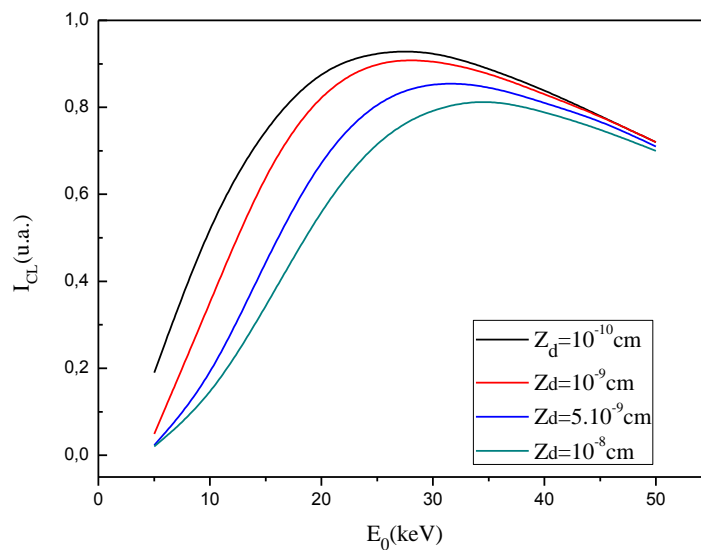


Figure V.13: Influence de la largeur de la zone de déplétion sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.3. Etude de l'intensité I_{CL} en fonction des propriétés physiques du matériau

Nous rappelons, tout d'abord, que tous les résultats obtenus par la simulation numérique montrent que toutes les courbes de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents E_0 ($I_{CL} = f(E_0)$) présentent le même comportement général, c'est-à-dire un maximum :

augmentation à basse énergie, passage par un maximum puis diminution, donc les explications suivantes restent valables dans tout ce qui suit.

Les faibles tensions d'accélération sont liées, en général, aux phénomènes de surface d'où on peut dire que l'augmentation de I_{CL} en fonction de E_0 est logique jusqu'au maximum. Dans cette partie on estime que le signal de cathodoluminescence est exclusivement lié aux recombinaisons en surface.

Une fois le maximum atteint, c'est l'influence du volume, par l'intermédiaire du phénomène d'absorption optique, qui intervient pour faire chuter I_{CL} .

Pour expliquer ce dernier phénomène, on doit tenir compte de deux comportements compétitifs, la recombinaison des porteurs, qui génère le signal de cathodoluminescence et le phénomène d'absorption optique, qui au contraire, fait diminuer l'intensité de ce signal.

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

V.3.1. Influence de la longueur de diffusion

La longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès dans des semiconducteurs massifs a été, pendant longtemps pour les semiconducteurs, le paramètre le plus étudié [166-168].

La figure V.14 montre des courbes typiques d'intensité de cathodoluminescence en fonction de la tension d'accélération simulées pour différentes valeurs de la longueur de diffusion des électrons.

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

La valeur de L_n influe essentiellement sur la position du maximum de la courbe $I_{CL} = f(E_0)$. Plus L_n est grande, plus le maximum se déplace légèrement vers les grandes énergies d'accélération, l'influence du volume est retardée à cause de la longueur de diffusion plus grande, ceci amène les maximums à se déplacer vers les hautes énergies.

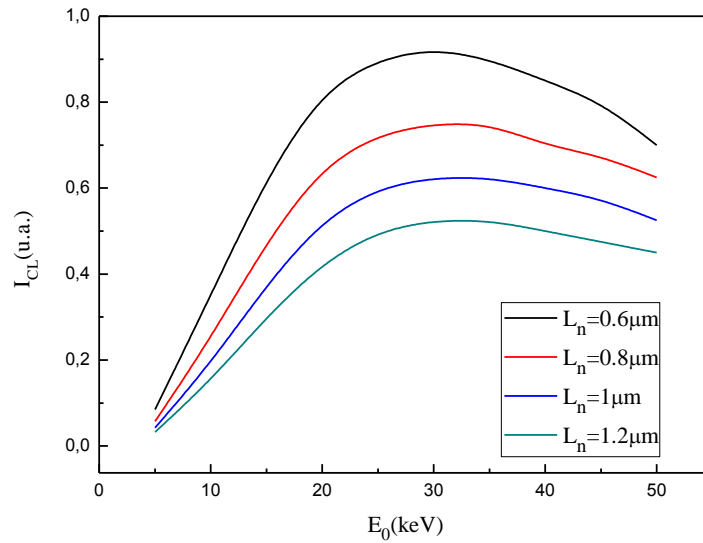


Figure V.14: Influence de la longueur de diffusion sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.3.2. Influence du coefficient d'absorption

Une augmentation de α diminue l'intensité de cathodoluminescence et déplace légèrement le maximum vers les basses énergies. L'intensité I_{CL} est fortement affectée par α dans le volume où on remarque des différences significatives dans les courbes. Par ailleurs le maximum des courbes, quand le coefficient d'absorption α diminue, se décale vers les plus grandes énergies, parce que la profondeur de pénétration des électrons incidents devient plus grande et le volume de génération des paires électron-trou est également plus grand, ce qui est confirmé sur la figure V.15.

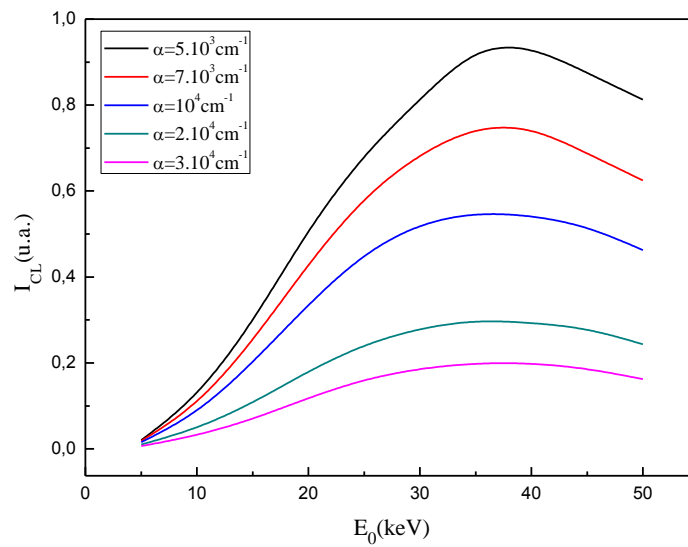


Figure V.15: Influence du coefficient d'absorption sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.3.3. Influence de la concentration du dopage

L'influence du dopage sur l'intensité du signal de cathodoluminescence est représentée sur la figure V.16.

On constate que le dopage influe notablement sur l'intensité de cathodoluminescence dans le domaine des grandes énergies, son influence se fait sentir essentiellement après le maximum, alors que pour les faibles énergies, on observe une légère différence pour des trois dopages différents. D'autre part, à partir de l'expression de la zone de déplétion en fonction du dopage (cf. chapitre IV§1.2 équation IV.2), on remarque qu'une augmentation du dopage diminue la largeur de la zone de déplétion, déplaçant ainsi le maximum de la courbe vers les grandes tensions d'accélération.

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

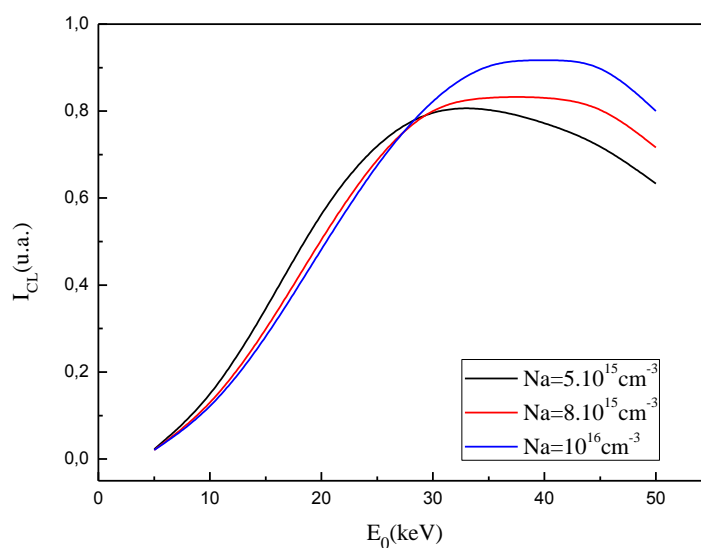


Figure V.16: Influence de la concentration du dopage sur l'intensité de cathodoluminescence.

V.4. Etude de la dépendance de la hauteur de barrière avec les paramètres du faisceau et les paramètres physiques du matériau

V.4.1. Influence de l'énergie du faisceau incident

Sur la figure V.17, nous avons reporté la variation de la hauteur de barrière en fonction du courant du faisceau incident pour différentes énergies E_0 .

L'analyse des courbes indique que pour les faibles valeurs de I_p ($I_p \leq 10^{-6} \text{ A}$) il n'y a pas de changement dans la valeur de la hauteur de barrière. Ce seuil dépassé elle commence à décroître quand I_p augmente.

Cette constatation est expliquée par le fait que pour les faibles courants d'excitation nous récoltons une faible concentration de porteurs en excès, qui ne permet pas une action sur E_b , tandis que pour les fortes intensités de courant il faudra considérer les cas des faibles et des fortes énergies E_0 .

En effet, la concentration des porteurs excédentaires devient importante pour les fortes intensités de courant, et elle augmente avec l'énergie E_0 , tant que celle-ci reste faible, ce qui est bien concevable car les faibles énergies induisent un petit volume de génération, et par suite cela conduit à une probabilité d'occupation des états de surface plus grande et donc à faire décroître E_b .

Mais pour les fortes énergies E_0 les électrons pénètrent plus profondément dans le matériau et font augmenter le volume de génération, ce qui conduit à une diminution des porteurs excédentaires en surface et donc la diminution de la probabilité d'occupation des états de surface. Ceci a pour effet de faire décroître E_b , mais d'une façon moins importante que pour les faibles énergies E_0 .

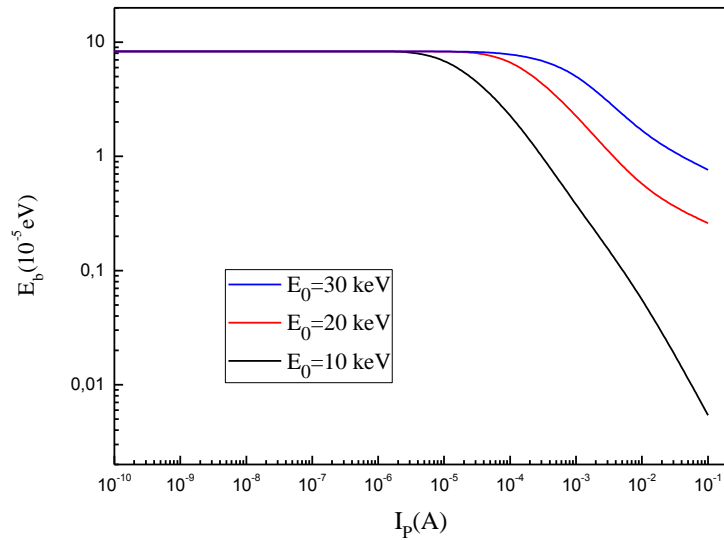


Figure V.17: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes énergies incidentes E_0 .

V.4.2. Influence des paramètres du défaut (N_t , E_t et σ)

V.4.2.1. Influence de N_t

La variation de E_b en fonction de I_p sous l'influence de la densité d'états de surface est montrée sur la figure V.18, sur laquelle on constate que pour une valeur donnée de N_t , E_b garde une valeur constante pour les faibles courants I_p , et accuse une diminution dès que celles-ci prennent des valeurs considérables. Cette diminution est liée à l'augmentation des concentrations des porteurs excédentaires $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ en surface, qui viennent occuper les états de surface du matériau.

Une autre explication peut être donnée en se basant sur les relations : $E_b = \frac{e \cdot N_a \cdot Z_d^2}{2 \cdot \epsilon}$ et $Z_d = \frac{N_t(1-f)}{N_a}$, où E_b dépendra seulement de f et N_t si N_a est fixe, comme dans notre cas. D'autre

part cette dépendance implique une diminution de E_b quand f augmente, c'est à dire quand $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ augmentent ou encore quand I_p augmente.

Le deuxième résultat de ce dépouillement est la diminution de E_b quand N_t diminue, ce qui peut nettement ressortir de la formule de E_b précédente. Cette diminution est expliquée en fixant une valeur de I_p , donc des concentrations $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ et en notant que pour N_t plus faible on a E_b plus faible, ce qui est complètement logique, car ce sont les états de surface qui créent la zone de charge d'espace et, donc, la hauteur de barrière.

V.4.2.2. Influence de E_t

La figure V.19 montre l'influence du niveau énergétique E_t des défauts de surface sur la hauteur de barrière.

Le niveau E_t ne possède aucune influence sur E_b pour les faibles intensités I_p , puisque les trois courbes obtenues pour trois valeurs de E_t se rejoignent pour une valeur constante de E_b si on utilise des courants plus petits que 10^{-7} A. La même explication apportée précédemment dans l'étude de l'influence de E_0 est à considérer dans ce cas.

Pour des valeurs plus élevées de I_p nous remarquons une diminution de E_b si I_p augmente. Cette diminution est liée au fait que l'énergie considérée est relativement faible (20KeV), ce qu'on a également expliqué dans le précédent paragraphe.

L'influence de E_t , quand à elle est liée à la diminution de Z_d quand E_t diminue, ceci est prévisible si on se réfère à la relation ($Z_d = \frac{N_t(1-f)}{N_a}$), où la largeur Z_d se trouve liée au niveau énergétique E_t à travers la probabilité d'occupation f .

Si on fixe chacun des paramètres E_0 , N_a , N_t et L_n et que l'on fait augmenter I_p on augmente la probabilité d'occupation f , et par conséquent on fait diminuer Z_d et donc E_b .

Comme il a déjà été indiqué (chap. IV), la probabilité d'occupation décroît quand l'énergie E_t augmente (Fig. IV.2), ce qui veut dire que E_b croît quand E_t augmente, ce qui signifie d'une autre manière que plus E_t se rapproche de la bande de conduction plus il n'a pas d'influence sur E_b .

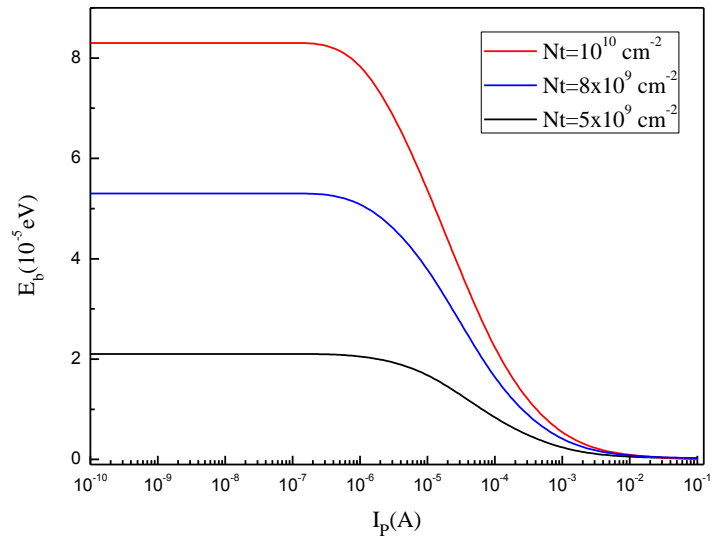


Figure V.18: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes concentrations d'états de surface N_t .

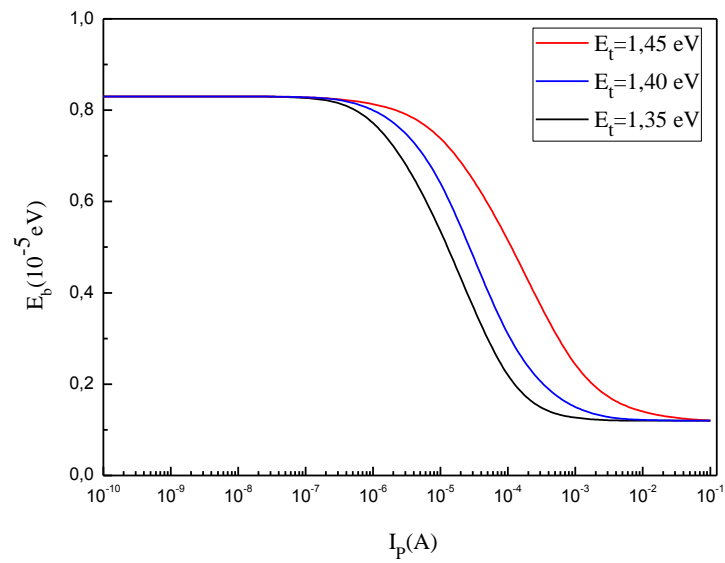


Figure V.19: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes positions des niveaux d'énergie associés aux défauts de surface E_t .

V.4.2.3. Influence de σ

Notre modèle tient compte la section efficace de capture σ des électrons par les défauts, dont l'influence sur E_b se fait à travers la probabilité d'occupation et les conditions aux limites (Figure V.20). Comme cela a été expliqué dans le chapitre IV (§5.7), plus la section efficace de capture augmente plus le défaut intervient facilement dans le processus de génération-recombinaison et plus la hauteur de barrière devient plus grande.

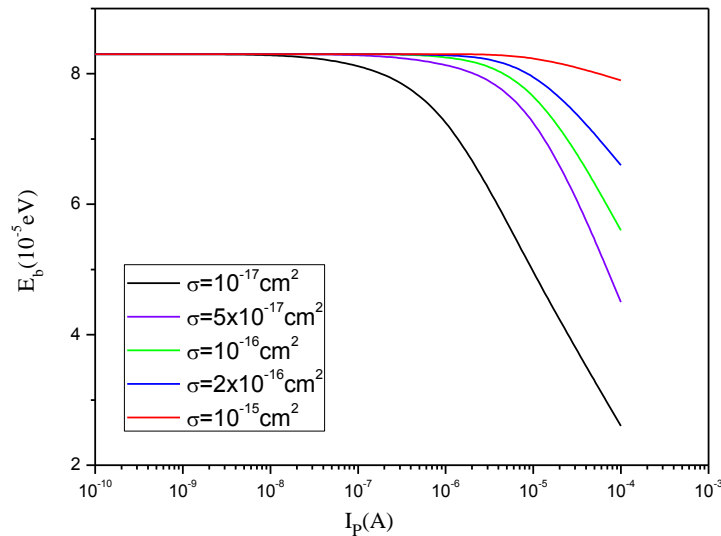


Figure V.20: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes sections efficaces de capture σ .

V.4.3. Influence de Zd

La figure V.21 montre la variation de E_b en fonction de I_p pour différentes valeurs de Zd. La hauteur de barrière E_b dépend de l'excès de porteurs de charges par l'intermédiaire de Zd. On remarque que pour le régime faible injection ($I_p \leq 10^{-7} \text{ A}$) Zd n'a aucune influence sur E_b , donc E_b reste constante. Dans le domaine des fortes valeurs de I_p , la décroissance de E_b est directement proportionnelle à la décroissance de Zd. (cf. chapitre IV, équation IV.5).

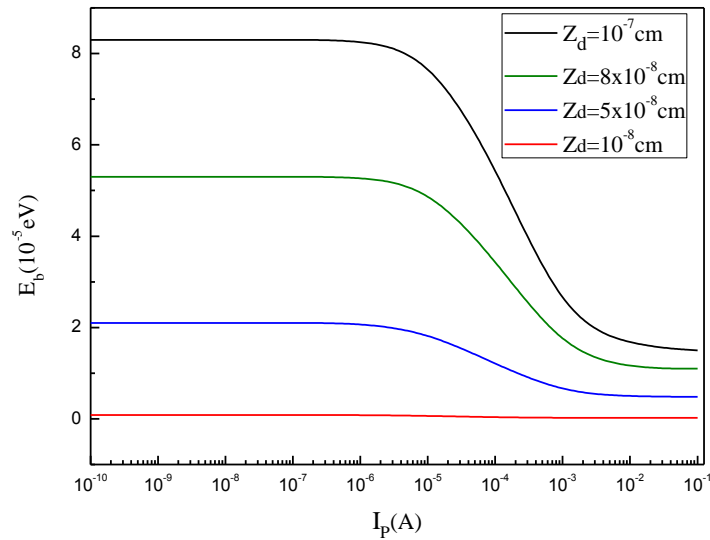


Figure V.21: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes largeurs de la zone de déplétion Z_d .

V.4.4. Influence des paramètres du Volume (L_n et N_a)

V.4.4.1. Influence de L_n

La figure V.22 montre l'influence de la longueur de diffusion sur E_b . Pour les courants inférieurs à 10^{-6} A, les courbes se superposent et donnent une valeur constante de E_b , ce qui est synonyme d'une absence d'influence de la longueur de diffusion, l'explication a déjà été donnée auparavant (voir influence de E_0).

Mais, dès que l'intensité I_p devient importante on enregistre un changement dans E_b sous l'influence de L_n . Ce changement est une sorte de décroissance pour les trois courbes de I_p et une diminution de E_b quand L_n augmente.

L'influence de L_n n'est pas comparable à celle de E_t ou autres paramètres de surface (faible différence entre les courbes) car c'est un vrai paramètre de volume.

En ce qui concerne la décroissance de E_b en fonction de I_p ça représente le phénomène commun pour tous les paramètres étudiés, et donc on avance toujours la même explication. Mais l'influence de L_n , par contre, demande une explication, qu'on énonce comme suit : si la valeur de L_n est assez grande, la probabilité d'occupation en surface se trouve diminuée, ce qui donne une valeur plus petite de E_b .

V.4.4.2. Influence de Na

Sur la figure V .23 on a tracé la variation de E_b en fonction de l'intensité du courant I_p sous l'influence de différentes concentrations de dopage Na.

Les courbes enregistrées pour ce cas de figure sont identiques à celles obtenues sous l'influence de N_t , sauf cependant qu'on a une influence en sens inverse, c'est à dire pour les forts courants I_p on a une diminution de E_b quand Na augmente, et N_t garde une valeur fixe.

L'explication donnée précédemment pour l'influence de N_t , en ce qui concerne la constance de E_b pour les faibles I_p et sa décroissance quand I_p prend des valeurs considérables reste valable ici.

Pour comprendre l'influence de Na, on est obligé de fixer d'une part N_t et d'autre part I_p , ce qui rend E_b inversement proportionnelle à Na, et qui trouve son explication dans le fait que la charge d'espace s'étend principalement dans la région la moins dopée à cause de la neutralité électrique.

En étendant ce résultat à de forts dopages on arrive à un seuil où E_b gardera une valeur fixe, comme c'est le cas de la courbe correspondant à $Na = 5.10^{16} \text{ cm}^3$.

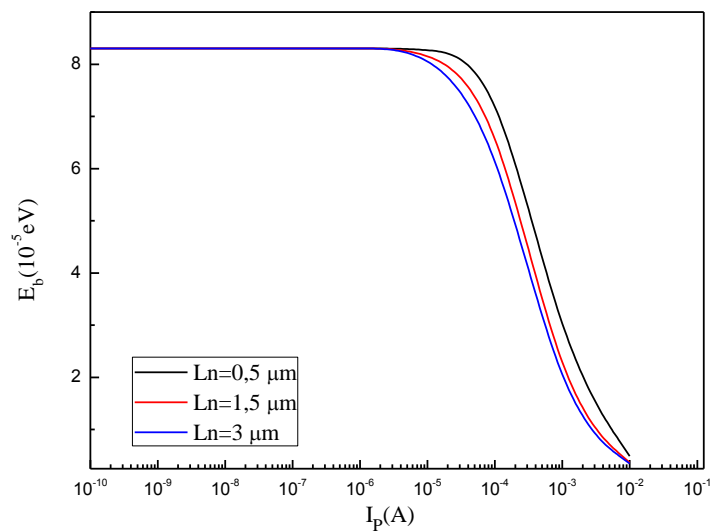


Figure V.22: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes longueurs de diffusion des porteurs minoritaires L_n .

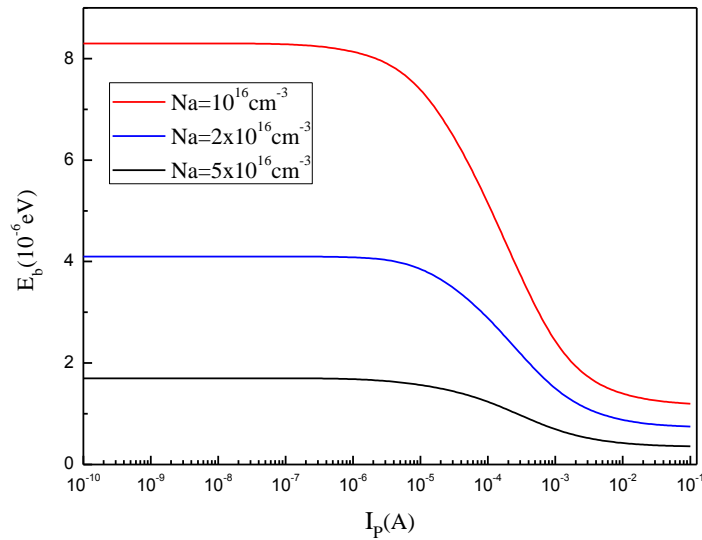


Figure V.23: Variation de la hauteur de barrière en fonction du courant pour différentes concentrations du dopage Na.

V.5. Etude expérimentale

V.5.1. Présentation des échantillons étudiés

Dans cette investigation, nous avons utilisé des échantillons de deux matériaux massifs monocristallins, CdTe et $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$. Ces échantillons présentent une surface d'environ 0.5 cm^2 et une épaisseur de 1 mm. Ils ont subi, au préalable, des polissages mécanique et mécano-chimique.

Pour étudier l'influence des dislocations, nous avons eu recours à la déformation plastique par micro-indentation : la microdureté utilisée est celle de Ludwick Vickers, qui utilise un pénétrateur ayant une tête en diamant de forme pyramidale à base carrée et dont l'angle au sommet est de 136° . Dans nos expériences les indentations sont appliquées en utilisant un poids de 50 grammes sur les faces Cd (111) et Te ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) sous air et à température ambiante.

V.5.1.1. Echantillons de CdTe

Les cristaux de CdTe de type p non intentionnellement dopés sont obtenus par la croissance en Bridgman vertical modifié orientés selon la direction $\langle 111 \rangle$.

Certains échantillons ont subi des traitements thermiques selon la procédure suivante :

- Hydrogénation : obtenue par recuit hydrogéné à une température de 500 °C pendant 70 heures, sous une pression d'hydrogène de 700 mbar dans une ampoule scellée sous vide avec un excès de cadmium. L'échantillon concerné est identifié comme suit :

A5 : CdTe face Te indenté hydrogéné.

- Recuits thermiques sous air à 360°C pendant une heure. Les échantillons concernés sont A1 et C4 cités ci-dessous :

A1 : CdTe face Te indenté recuit.

C4 : CdTe face Cd indenté recuit.

V.5.1.2. Echantillons de Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te

Les échantillons Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te de type p ($p \approx 10^{16} \text{cm}^{-3}$) sont issus de lingots tirés par la méthode de Bridgman horizontale.

L'hydrogénation des échantillons est réalisée par l'exposition à un plasma d'hydrogène à 150°C pendant 3 heures avec une pression d'hydrogène de 3 mbar. Les échantillons sont identifiés comme suit :

B5 : Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te face Te indenté hydrogéné.

B6 : Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te face Te indenté non hydrogéné.

B7 : Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te face Te non indenté non hydrogéné.

B8 : Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te face Te non indenté hydrogéné.

V.5.2. Résultats expérimentaux

Les expériences que nous avons réalisées se résument à mesurer l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie des électrons incidents E_0 à la température ambiante. Nous avons gardé les mêmes conditions en passant d'un échantillon à un autre, afin de pouvoir comparer les résultats obtenus (même détection, même ouverture de fentes et même amplification).

Expérimentalement, la valeur de l'intensité de cathodoluminescence a été relevée tous les 2keV et tous les 1keV à proximité du maximum. Il est à noter que la taille de la sonde électronique est égale à 3.5µm, et les résultats de mesures pour les échantillons indentés sont pris près du cœur de l'indentation. Une caractérisation complète et comparative a été réalisée sur l'ensemble de nos échantillons par l'intermédiaire de la technique de cathodoluminescence. De plus les matériaux étudiés permettaient d'élucider le rôle des dislocations et des traitements

thermiques sur l'intensité de cathodoluminescence. Nous avons, donc mis en évidence les effets de la déformation plastique et de l'atmosphère de recuit.

V.5.2.1. Etude de la cathodoluminescence dans les échantillons $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$

a) Etude de l'effet d'indentation (déformation plastique)

La figure V.24 montre les courbes expérimentales obtenues à partir des échantillons B6 et B7, qui ont même paramètres physiques, mais dont le premier est indenté et le second est non indenté.

On remarque que plus l'énergie des électrons incidents augmente plus l'intensité de cathodoluminescence augmente, néanmoins elle reste toujours inférieure pour l'échantillon indenté B6, cela peut être expliqué par l'apparition des dislocations introduites par microindentation pour l'échantillon indenté. Les dislocations introduisent, en général, des niveaux d'énergie dans la bande interdite, de plus la recombinaison au niveau des dislocations est non radiative [169-171]. Ces défauts peuvent affecter de manière importante les propriétés électriques ou optiques des semiconducteurs, comme la durée de vie des porteurs ou la luminescence [172-174], il est à noter que le modèle proposé par Donolato [175], décrit la dislocation comme un cylindre dans lequel la durée de vie des porteurs est réduite par rapport à celle du matériau sans défaut.

Sur la figure V.25 nous représentons les courbes expérimentales de l'effet de l'indentation pour les échantillons B5 et B8, respectivement indenté hydrogéné et non indenté hydrogéné.

Nous pouvons observer la présence d'un maximum détectable expérimentalement pour l'énergie incidente égale à 35 keV. On constate en outre que le signal de cathodoluminescence diminue considérablement pour B5 comparativement avec B8, ceci signifie que la déformation influe considérablement sur I_{CL} .

Sachant que les dislocations sont souvent des centres de recombinaison [176], on peut penser que celles-ci sont responsables de la diminution de I_{CL} . De nombreux travaux expérimentaux ont eu pour objet d'étudier comment les dislocations modifient les propriétés électroniques, et ont notamment montré une réduction importante de la densité et de la mobilité des porteurs libres [177].

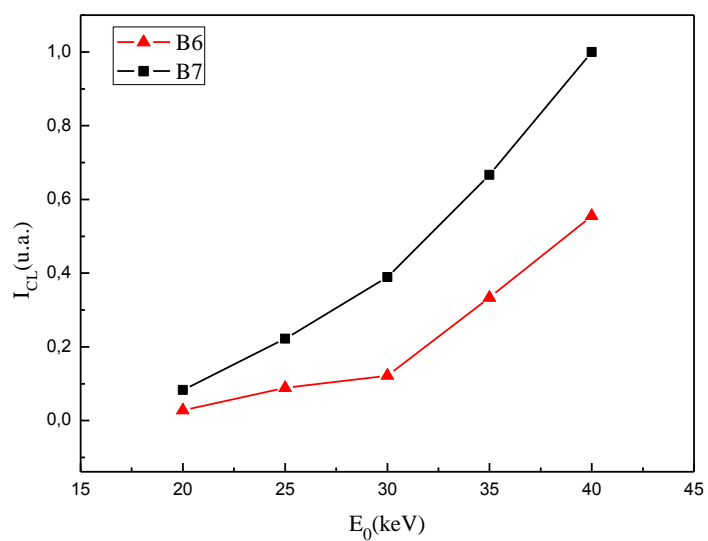


Figure V.24: Effet de l'indentation des échantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ sur l'intensité de cathodoluminescence. B6 : indenté, B7 : non indenté (brut de tirage).

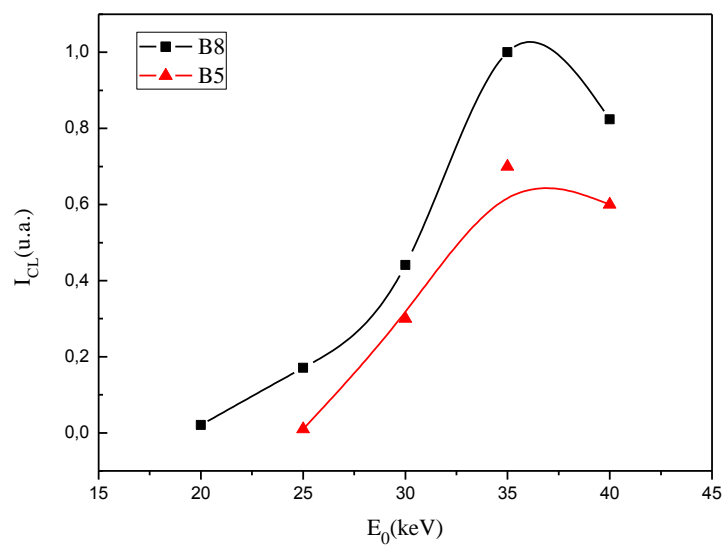


Figure V.25: Effet de l'indentation des échantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ hydrogénés sur l'intensité de cathodoluminescence. B5 : indenté hydrogéné, B8 : non indenté hydrogéné.

b) Etude de l'effet de l'hydrogène

Les résultats obtenus à partir de la mesure de la cathodoluminescence ont clairement montré l'effet de l'hydrogène sur nos échantillons non indentés (Figure V.26). On observe une différence significative entre les courbes de l'intensité I_{CL} pour les grandes énergies primaires par rapport à celles des faibles énergies. L'hydrogène peut jouer un rôle intéressant dans les semiconducteurs tels que Si, Ge, ayant soit des structures amorphes, polycristallines ou monocristallines, par saturation de la liaison pendante [178,179] et par compensation des autres accepteurs [180].

Dans les cristaux semiconducteurs composés tels que CdTe, CdZnTe, plusieurs expériences effectuées donnent l'indication de passivation de défauts par hydrogène [181-183], ceci prouve l'augmentation de l'intensité du signal cathodoluminescence pour le cas d'un échantillon hydrogéné.

Les résultats actuels concernant le comportement de l'hydrogène dans le cristal CdTe ont montré que l'hydrogène est aussi capable de passiver l'activité électrique de plusieurs défauts et dopants tels que : B, Al, Ga et In [184]. Cette propriété de neutralisation des niveaux profonds et superficiels dans les cristaux poly- et monocristallins a un grand intérêt dans la production des dispositifs de détection [185].

L'hydrogénation des cristaux ayant une grande imperfection et contenant des impuretés, conduit à l'augmentation de I_{CL} , lorsque la concentration d'hydrogène diffusée dans le volume du cristal est suffisante pour compenser la totalité des défauts actifs.

La figure V.27 montre l'effet de l'hydrogène sur l'intensité de cathodoluminescence pour des échantillons de $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ indentés. Nous observons, pour les faibles et grandes énergies du faisceau d'électrons incidents, que l'intensité de la lumière émise (I_{CL}) par l'échantillon B5, ayant subi une hydrogénation, est inférieure par rapport à celle émise par l'échantillon B6, non hydrogéné. Ceci peut probablement être expliqué par les défauts qui n'ont pas un rôle primordial dans l'activité électrique. L'incorporation de l'hydrogène dans CdTe cause une neutralisation significative des défauts électriquement actifs et ce processus conduit notamment à l'augmentation de la résistivité et la luminescence du matériau.

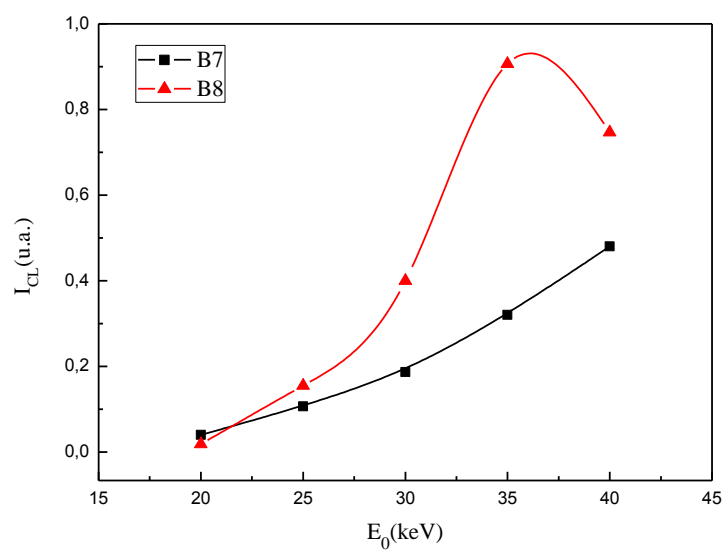


Figure V.26: Effet de l'hydrogène sur l'intensité de cathodoluminescence pour des échantillons de $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ non indentés. B7: non indenté non hydrogéné, B8 : non indenté hydrogéné.

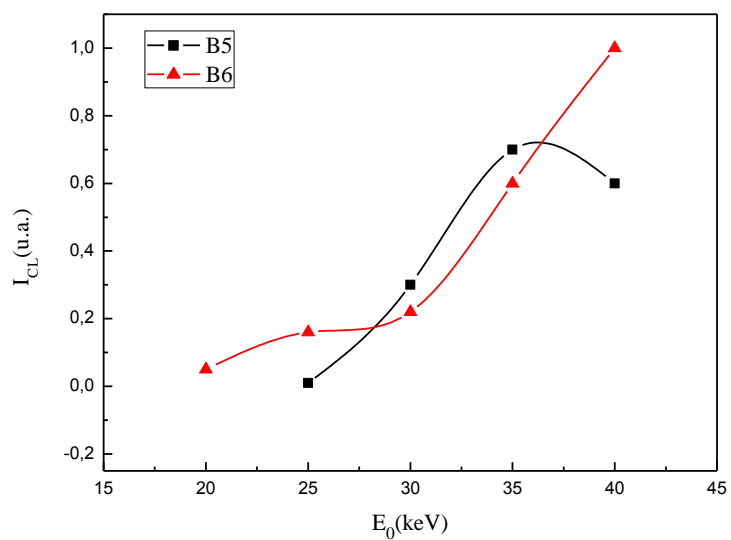


Figure V.27: Effet de l'hydrogène sur l'intensité de cathodoluminescence des échantillons de $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ indentés. B5 : indenté hydrogéné, B6 : indenté non hydrogéné.

V.5.2.2. Etude de la cathodoluminescence dans les échantillons CdTe

a) Etude de l'effet du recuit

L'influence du recuit sur I_{CL} est représentée sur la figure V.28. Les recuits thermiques ont été effectués sous air (échantillon A1), et dans une atmosphère d'hydrogène (échantillon A5). L'effet du recuit sur l'intensité de cathodoluminescence a été rendu possible sur des échantillons de CdTe indentés.

Les résultats obtenus à partir des mesures de cathodoluminescence ont montré, pour les énergies incidentes $E_0 \leq 30$ keV et $E_0 \geq 35$ keV, une légère augmentation de I_{CL} dans le cas de l'échantillon recuit sous H_2 comparativement à celui recuit sous air (triangles dans la figure V.28). Cette augmentation peut être attribuée à la passivation de certains défauts tels que les dislocations. Avec un recuit sous atmosphère d'hydrogène on devrait donc s'attendre à une amélioration des caractéristiques du dispositif.

La neutralisation des défauts permet aux paires électron-trou créés par le faisceau d'électrons de se recombiner de façon radiative et par conséquent l'intensité du signal de la cathodoluminescence, émise par l'échantillon augmente. Autrement dit, la recombinaison non radiative due aux défauts diminue.

Il est intéressant de noter que le recuit thermique permet de diminuer considérablement la concentration de défauts dans un matériau CdTe, ce qui a, aussi, pour effet d'augmenter l'efficacité de recombinaisons radiatives de paires électron-trou.

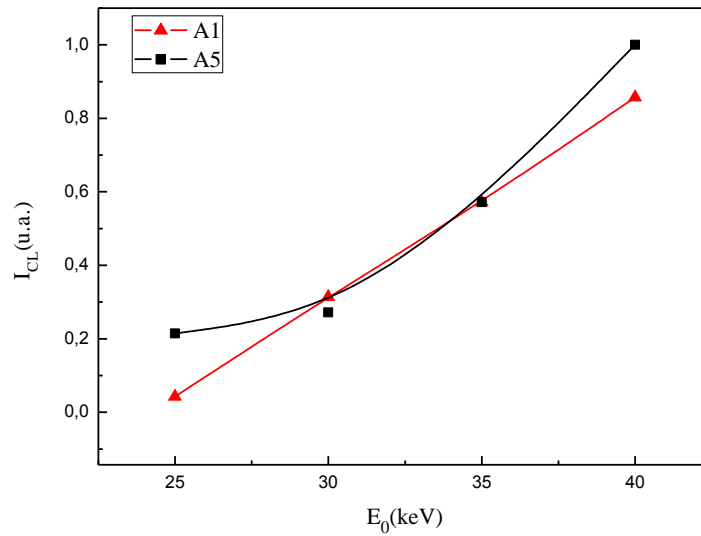


Figure V.28: Effet du recuit sur l'intensité de cathodoluminescence des échantillons de CdTe indentés. A1: indenté recuit sous air, A5 : indenté hydrogéné.

b) Etude de l'effet de la polarité

La figure V.29 montre l'effet de la face de l'échantillon sur l'intensité du signal de cathodoluminescence I_{CL} . On observe clairement une différence importante entre les deux courbes représentatives des deux faces différentes.

L'intensité I_{CL} dépend de la face bombardée. Ce phénomène trouve son explication dans le fait que l'indentation de la face Te ($\overline{111}$) engendre plus de dislocations comparativement à la face Cd (111).

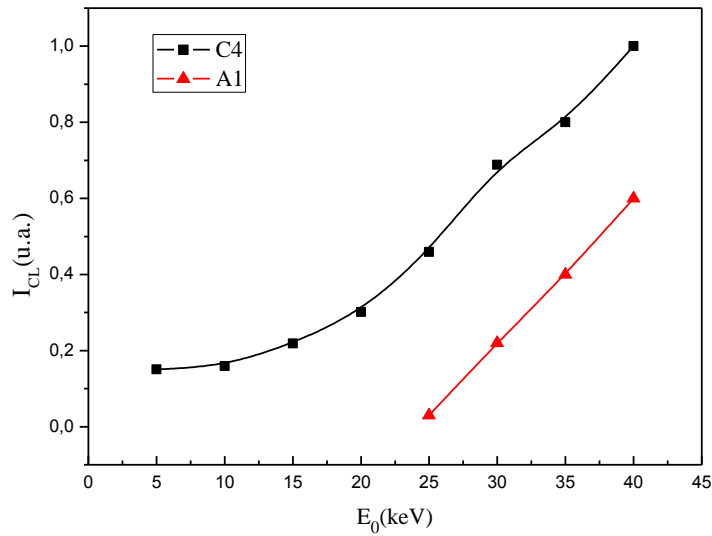


Figure V.29: Effet de la polarité sur l'intensité de cathodoluminescence des échantillons de CdTe indentés recuits. A1: face Te, C4: face Cd.

c) Etude de l'effet du zinc

L'ajout de Zn dans la matrice de CdTe renforce le réseau grâce aux liaisons plus courtes dans le ZnTe (0.2643 nm) que dans le CdTe (0.2794 nm), et est dotée d'une plus forte énergie (4.7 eV pour ZnTe et 4.3 eV pour CdTe). En effet, K. Guergouri [186] a confirmé, dans son travail sur $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ que l'addition de 4% de Zn réduit la densité de dislocation à moins de $5 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$, comparée à $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ dans CdTe synthétisé dans les mêmes conditions.

La figure V.30 montre l'effet de l'addition de zinc sur l'intensité I_{CL} . Pour des échantillons déformés et recuits, on constate que l'intensité CL de l'échantillon B5 ($Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$) est supérieure à celle de l'échantillon A5(CdTe). Ceci peut s'expliquer par la diminution du taux de dislocations dans CdTe quand on ajoute du Zinc. Ces dislocations peuvent créer des niveaux énergétiques profonds dans la bande interdite donc responsables des transitions non radiatives, qui vont diminuer la luminescence mesurée.

On sait que l'introduction de Zn élargit le gap et augmente la résistivité intrinsèque. Cependant, l'ajout de dopant doit être maîtrisé pour éviter l'introduction de beaucoup de pièges pour les électrons et les trous, qui réduiraient les propriétés de transport.

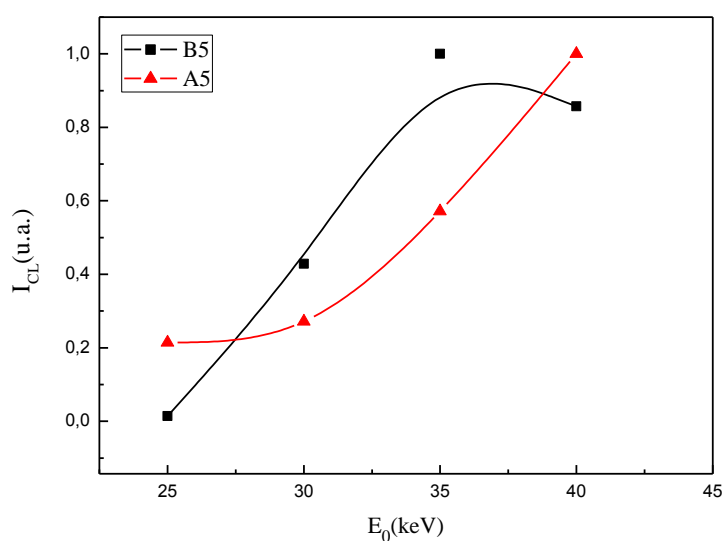


Figure V.30: Effet du zinc sur l'intensité de cathodoluminescence des échantillons indentés recuits. A5(CdTe), B5(Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te)

V.6. Validation du modèle

V.6.1. Confrontation avec un modèle mathématique

Le modèle que nous avons établi dans notre travail est un modèle physique de calcul de la cathodoluminescence que nous confrontons dans ce paragraphe au modèle proposé par Kovtunova et al. [187], qui est un modèle de calcul mathématique. Il permet le calcul de la dépendance de l'intensité de la cathodoluminescence avec l'énergie du faisceau électronique incident pour identifier les paramètres des matériaux semiconducteurs. Cette dépendance est décrite en utilisant un modèle de sources indépendantes et une approximation des séries entières des intégrales.

Sur l'ensemble des courbes ci-dessous, on note un bon accord entre nos résultats de simulation et ceux publiés dans la littérature [187]. Le bon ajustement est réalisé, cas du CdTe, pour les valeurs suivantes : ($I_p = 10^{-9}$ A, $E_t = 1.3$ eV, $L_n = 12 \cdot 10^{-5}$ cm, $Z_d = 5 \cdot 10^{-8}$ cm, $N_a = 10^{17}$ cm⁻³, $\sigma = 10^{-14}$ cm², $\alpha = 7 \cdot 10^3$ cm⁻¹).

Nos résultats basés sur les calculs numériques sont, en grande partie, en bon accord avec ceux de la littérature (Figure V. 31). Si l'on compare les courbes obtenues par les deux modèles on remarque que, pour les faibles énergies des électrons incidents, une déviation entre les deux modèles de simulation, pour des énergies incidentes inférieures à 17 keV, c'est-à-dire proche de la surface du matériau, où existe la zone de déplétion. Il est intéressant de noter que la prise en

compte de la zone de déplétion dans notre modèle est quasiment la seule cause pouvant provoquer la différence avec le modèle proposé par Kovtunova et al.

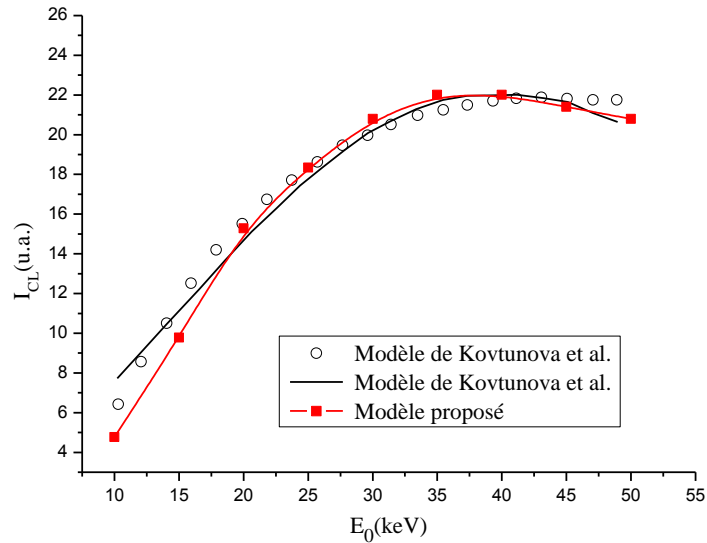


Figure V.31: Comparaison des résultats de simulation obtenus par deux modèles : modèle physique (notre modèle), modèle mathématique (modèle de Kovtunova et al.) [187].

V.6.2. Validation expérimentale des résultats

Un des objectifs de la simulation de l'intensité du signal de la cathodoluminescence est de pouvoir comparer les résultats simulés à ceux obtenus expérimentalement. En effet, pour valider le modèle proposé, les données expérimentales de quelques mesures de cathodoluminescence, qui seront présentées dans les parties suivantes, sont comparées avec les résultats de simulation.

V.6.3. Comparaison et discussion entre les résultats simulés et expérimentaux

Pour procéder à l'ajustement des mesures de CL, nous nous sommes intéressés aux paramètres suivants : intensité du courant du faisceau électronique incident I_p , position énergétique du défaut E_t , section efficace de capture σ , largeur de la zone de déplétion Z_d , densité du dopage N_a , longueur de diffusion L_n et le coefficient d'absorption α . L'ajustement est réalisé entre les courbes des mesures expérimentales et de la simulation, $I_{CL} = f(E_0)$, obtenues à 300 K. Nous avons normalisé le maximum de I_{CL} de la simulation à partir de la valeur maximale expérimentale.

V.6.3.1. Cas des échantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$

Les figures V.32 et V.33 représentent la comparaison entre les résultats obtenus en simulation et les résultats expérimentaux pour deux échantillons de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$. Nous avons pris en compte divers paramètres : I_p , E_t , σ , L_n , Z_d , N_a et α afin d'optimiser l'ajustement des courbes de l'intensité I_{CL} . Nous observons un bon accord entre les courbes simulées et expérimentales.

Les paramètres du modèle utilisés dans la comparaison avec les mesures expérimentales sont présentés dans le tableau V.1 suivant :

paramètres	I_p (A)	E_t (eV)	σ (cm^2)	Z_d (cm)	L_n (cm)	N_a (cm^{-3})	α (cm^{-1})
Echantillons							
$\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ (B7)	10^{-9}	1.28	$2.10 \cdot 10^{-17}$	$2.10 \cdot 10^{-7}$	$9.10 \cdot 10^{-5}$	10^{16}	7.10^3
$\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ (B6)	10^{-9}	1.20	$4.10 \cdot 10^{-17}$	$2.10 \cdot 10^{-7}$	10^{-4}	10^{16}	9.10^3

Tableau V.1: Paramètres de la simulation de l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération du faisceau d'électrons incidents pour le cas du $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$.

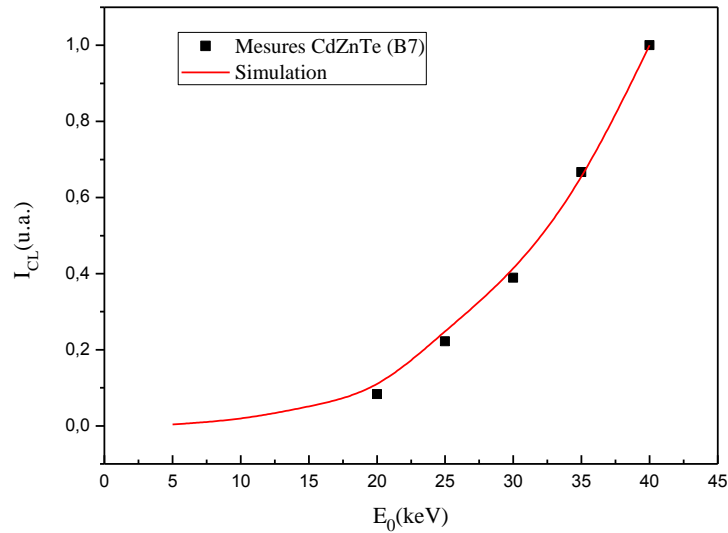


Figure V.32: Comparaison entre les mesures expérimentales et les résultats de la simulation pour l'échantillon de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ (B7). ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.28$ eV, $L_n=9.10 \cdot 10^{-5}$ cm, $Z_d=2.10 \cdot 10^{-7}$ cm, $N_a=10^{16} \text{cm}^{-3}$, $\sigma=2.10 \cdot 10^{-17} \text{cm}^2$, $\alpha=7.10^3 \text{cm}^{-1}$)

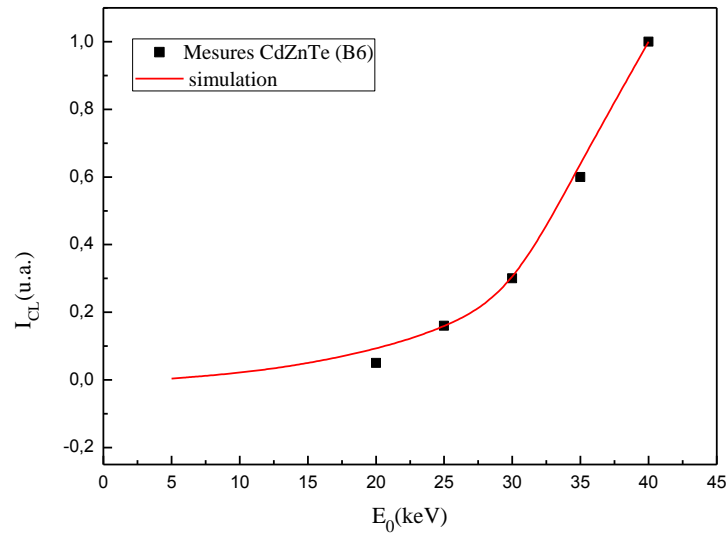


Figure V.33: Comparaison entre les mesures expérimentales et les résultats de la simulation pour l'échantillon de $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ (B6). ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.20$ eV, $L_n=10^{-4}$ cm, $Z_d=2.10^{-7}$ cm, $N_a=10^{16}\text{cm}^{-3}$, $\sigma=4.10^{-17}\text{cm}^2$, $\alpha=9.10^3\text{cm}^{-1}$).

V.6.3.2. Cas des échantillons de CdTe

Les résultats expérimentaux et ceux de la simulation en utilisant notre modèle sont montrés dans les figures V.34 et V.35. Ces dernières présentent le tracé expérimental et simulé de l'intensité de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie du faisceau des électrons incidents pour des échantillons de CdTe. On observe que les résultats expérimentaux concordent avec ceux de la simulation théorique de l'intensité I_{CL} .

Plusieurs remarques importantes peuvent être faites. La première est que la simulation numérique confirme nos résultats expérimentaux, à savoir que le même comportement de l'intensité I_{CL} se produit pour les échantillons, la seconde remarque est que la simulation numérique nous a permis également de confirmer nos hypothèses développées au chapitre IV.

Les paramètres de la simulation des échantillons, A5 et C4 du CdTe, sont présentés dans le Tableau V.2.

paramètres	I_p (A)	Et (eV)	σ (cm ²)	Z_d (cm)	Ln (cm)	Na (cm ⁻³)	α (cm ⁻¹)
Echantillons							
CdTe (A5)	10^{-9}	1.30	2.10^{-17}	2.10^{-7}	10^{-4}	10^{16}	9.10^3
CdTe (C4)	10^{-9}	1.20	4.10^{-17}	10^{-7}	10^{-4}	10^{16}	8.10^3

Tableau V.2: Paramètres de la simulation de l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération du faisceau d'électrons incidents pour le cas du CdTe.

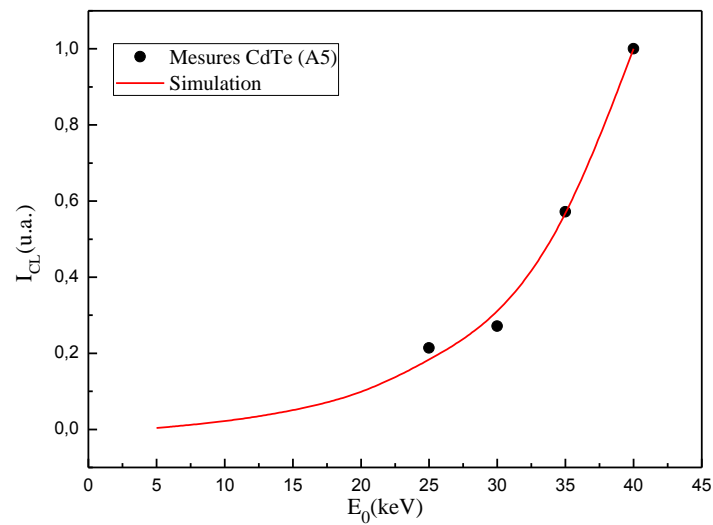


Figure V. 34: Comparaison entre les mesures expérimentales et les résultats de la simulation pour l'échantillon de CdTe (A5). ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.3$ eV, $L_n=10^{-4}$ cm, $Z_d=2.10^{-7}$ cm, $N_a=10^{16}$ cm⁻³, $\sigma=2.10^{-17}$ cm², $\alpha=9.10^3$ cm⁻¹)

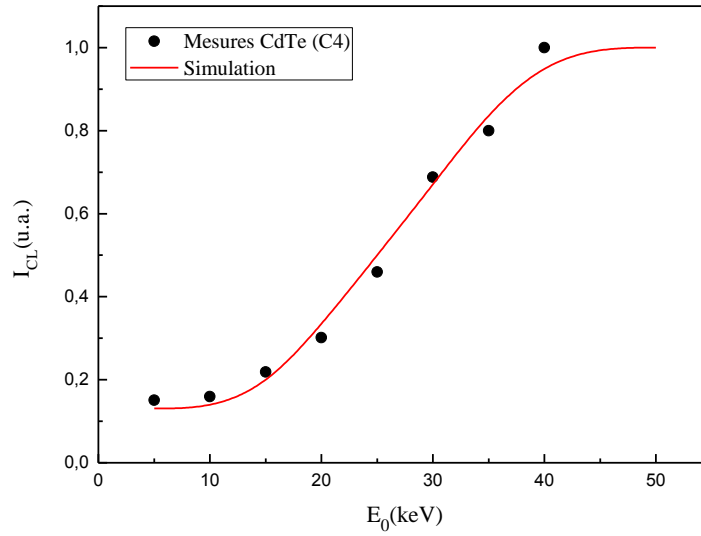


Figure V.35: Comparaison entre les mesures expérimentales et les résultats de la simulation pour l'échantillon de CdTe (C4). ($I_p=10^{-9}$ A, $E_t=1.2$ eV, $L_n=10^{-4}$ cm, $Z_d=10^{-7}$ cm, $N_a=10^{16}$ cm $^{-3}$, $\sigma=4.10^{-17}$ cm 2 , $\alpha= 8.10^3$ cm $^{-1}$).

Conclusion

Dans cette étude nous avons établi un modèle physique prédictif, qui calcule l'intensité du signal de cathodoluminescence d'un semiconducteur CdTe. Les résultats importants obtenus par nos calculs nous ont permis d'étudier et de déterminer le rôle et la contribution des différents paramètres physiques (paramètres de surface et de volume du faisceau d'électrons ainsi que la température) sur l'intensité du signal de cathodoluminescence. La position et le déplacement du maximum, ainsi que l'allure générale des courbes $I_{CL} = f(E_0)$ ont également été élucidés.

Une observation est à généraliser dans cette étude, ça concerne l'intensité I_{CL} qui garde le même comportement, en l'occurrence, elle croît, passe par un maximum, puis décroît quand l'énergie augmente. De plus, la variation de chaque type de paramètres modifie différemment ces courbes, ce qui donne la possibilité de déterminer, de façon certaine, l'origine des variations locales de l'intensité I_{CL} .

L'étude de I_{CL} à faibles énergies du faisceau nous a permis de conclure que la contribution des paramètres de surface dominant, alors qu'à des énergies élevées la contribution des paramètres du volume dominant.

La simulation numérique nous a, également, permis une meilleure compréhension, des variations de l'intensité I_{CL} avec la température de l'échantillon $I_{CL} = f(T)$: I_{CL} diminue lorsque la température augmente.

Il a été, également, question dans cette étude d'effets thermiques ; nous avons mis en évidence que ceux-ci se produisent au cours du bombardement électronique de la surface du matériau, phénomène qui se traduit par l'élévation de la température (échauffement local). Nous avons étudié l'influence de ces effets sur la variation de l'intensité I_{CL} .

Parmi les phénomènes étudiés, il y a la dépendance de la hauteur de barrière, à la surface, avec les différents paramètres. Les résultats ont été analysés et discutés en détail : la variation de la hauteur de barrière avec le courant du faisceau d'électrons incidents, $E_b = f(I_p)$, a permis de mettre en évidence l'influence des paramètres physiques relatifs au matériau. L'ensemble des résultats obtenus de la simulation numérique a montré que la hauteur de la barrière présente le même comportement avec tous les paramètres ; elle reste constante pour les faibles valeurs de l'intensité du courant du faisceau ($I_p \leq 10^{-7}$ A) et diminue pour les valeurs les plus élevées de I_p .

Pour être complet, il était essentiel pour nous de confirmer expérimentalement notre simulation. Pour cela, des mesures de l'intensité I_{CL} ont été réalisées. Nous avons réalisé une étude expérimentale, à 300 K, sur la mesure de l'intensité de cathodoluminescence. Les résultats expérimentaux obtenus sur différents échantillons ont été soumis à différentes interprétations. En effet, nous avons effectué une étude comparative entre les courbes expérimentales, $I_{CL} = f(E_0)$, dans le cas du CdTe et $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$, sous des conditions expérimentales différentes telles que : atmosphère de recuit, déformation plastique, hydrogénation, ...).

Pour valider, également, le modèle physique proposé, nous avons comparé les résultats obtenus avec ceux d'un modèle mathématique publié dans la littérature.

Enfin, le point le plus important qui ressort de cette étude est le fait que nos résultats expérimentaux se trouvent être en bon accord avec nos simulations et permettent d'expliquer les différences de comportement liés à l'intensité I_{CL} dans CdTe et $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$.

Nous concluons donc que la comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques, démontre clairement la validité et la performance du modèle proposé, et de ce fait justifie l'intérêt de l'étude de l'intensité CL dans les semiconducteurs.

Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse nous avons présenté une étude théorique et expérimentale des propriétés de cathodoluminescence dans le tellure de cadmium. Notre objectif principal était la détermination de l'influence des différents paramètres physiques intrinsèques (paramètres de surface: N_t , E_t , σ , V_s et de volume : N_a , L_n , α) et extrinsèques (paramètres d'injection du faisceau incident: E_0 , I_p , diamètre d et la température T) sur le comportement de l'intensité du signal de cathodoluminescence, en faisant varier les grandeurs de ces paramètres.

Pour ce faire et pour plus de rigueur et de précision nous avons choisi une longue démarche, consistant à étudier quantitativement ou à défaut qualitativement l'influence de chacun de ces paramètres, indépendamment des autres, sur l'évolution de la cathodoluminescence.

La modélisation de l'intensité de cathodoluminescence, que nous avons proposé, a été appliquée à un échantillon massif de CdTe, matériau semiconducteur de la famille II-VI, en régime de faible injection.

Notre étude étant basée sur le modèle théorique, nous avons établi et résolu les équations de continuité, dans la zone de déplétion et neutre du matériau, pour chaque type des porteurs de charges à l'aide d'une méthode de calcul auto-cohérent.

Le modèle physique que nous avons présenté au chapitre IV explique qualitativement le comportement du signal de cathodoluminescence. Vu le grand nombre de paramètres et leur interdépendance, nous nous sommes trouvés en face de nombreux phénomènes régi par un grand nombre de paramètres qu'il fallait prendre en compte.

Les résultats de la simulation numérique obtenus grâce à ce modèle simplifié de la cathodoluminescence, montrent que toutes les courbes de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents E_0 ($I_{CL} = f(E_0)$) présentent le même comportement général ; elles augmentent à basse énergie, atteignent un maximum et puis diminuent à haute énergie. Ceci est dû à deux processus compétitifs et prédominants qui sont la recombinaison de porteurs en excès à basse énergie et l'absorption optique à haute énergie.

L'étude précise de la variation de l'intensité I_{CL} en fonction de la température de l'échantillon, exige la bonne connaissance de la variation des propriétés physiques propres du matériau en fonction de la température à savoir: le coefficient d'absorption optique, la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, la mobilité des porteurs et leur durée de vie, la largeur du gap, la densité de porteurs libres intrinsèques, etc.

Au cours de cette étude, nous avons pu déterminer l'importance du rôle, souvent non élucidé dans le phénomène de cathodoluminescence, de l'effet thermique, échauffement de la surface irradiée, induit par l'excitation du faisceau électronique en le modélisant. Notons que cet effet est fonction de la puissance incidente, de la conductivité thermique du matériau et du diamètre du faisceau électronique.

A travers le modèle analytique utilisé, nous avons pu mettre en évidence l'importance de la hauteur de barrière à la surface du matériau. Pour cela, nous avons examiné séparément les effets de la variation des paramètres E_0 , N_t , E_t , σ , Z_d , N_a et L_n , qui jouent un rôle très important dans le comportement de cette barrière. La procédure consiste à introduire tous ces paramètres dans nos calculs, qui sont pris en considération, à notre connaissance, pour la première fois. Ces paramètres n'influent pas sur la hauteur de barrière, qui garde une valeur constante, pour un régime de faible injection, mais la font diminuer pour les grandes valeurs du courant du faisceau incident.

Pour compléter notre étude et être plus concret nous avons confronté les résultats de simulation avec l'expérience. L'étude expérimentale a été réalisée à 300 K, sur des échantillons de CdTe et de $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ sous des conditions expérimentales différentes telles que : hydrogénation, recuit, indentation, etc. En outre, nous avons effectué une étude comparative des courbes expérimentales de l'intensité I_{CL} , les résultats expérimentaux obtenus ont été confrontés aux différentes interprétations.

Afin de valider les résultats de modélisation nous les avons d'une part, comparés avec ceux d'un modèle mathématique, et d'autre part avec les résultats des mesures expérimentales. Ceci nous a permis de conclure que les résultats théoriques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

La discussion du rôle joué par différents paramètres physiques nous a conduit, à la fin, à proposer quelques suggestions pour améliorer le modèle ainsi que l'environnement expérimental et donner quelques perspectives pour l'amélioration de l'aspect caractérisation physique des semiconducteurs sous irradiation électronique.

En ce qui concerne la simulation, il serait intéressant dans un avenir proche de:

- Trouver comment tenir compte de deux niveaux de défauts et procéder à une étude de I_{CL} émise par recombinaison aux défauts profonds.
- D'étudier d'une façon approfondie la dépendance de la cathodoluminescence avec le temps.
- D'élargir le domaine d'application de ce modèle aux autres matériaux semiconducteurs.

Au niveau expérimental il aurait été intéressant de déterminer les effets des paramètres physiques, essentiellement traités dans l'échantillon massif, dans les cas d'homo ou d'hétérostructures (couches minces), ce qui permettra de mieux comprendre l'effet de la taille sur l'intensité de cathodoluminescence.

Enfin il serait également intéressant de prendre en compte le rôle de quelques paramètres annexes, mais influents, tel que la qualité du vide d'un microscope électronique à balayage entraînant l'inévitable contamination de la surface du semiconducteur.

Références

- [1] A. Rogalski, Rep. Prog. Phys. 68, 2267 (2005).
- [2] P. Norton, Opto-Electron. Rev. 10, 159 (2002).
- [3] Y. Eisen, A. Shor and I. Mardor, IEEE Trans. Nucl. Sci. 51, 1191 (2004).
- [4] T. Takahashi and S. Watanabe, IEEE Trans. Nucl. Sci. 48, 950 (2001).
- [5] K. Zanio, Semiconductors and semimetals, Vol. 13: Cadmium Telluride, Academic Press, New York (1978).
- [6] D. J. Williams, in Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds, EMIS Data reviews Series No. 10, edited by P. Capper INSPEC, London, 399 (1994).
- [7] J. C. Phillips, Bonds and Bands in Semiconductors, Academic Press, New York (1973).
- [8] T. H. Myers, S. W. Edwards and J. F. Schetzina, J. Appl. Phys. 52, 4231 (1981).
- [9] S. A. Semiletov, Sov. Phys. Crystallogr. 1, 236 (1956).
- [10] L. C. Allen., Phys. Rev. 98, 993 (1955).
- [11] J. C. Phillips, Phys. Rev. 112, 685 (1958).
- [12] R. A. Smith, Semiconductors, 2nd Ed., Cambridge University Press, London (1979).
- [13] R. Legros, Thèse de doctorat d'état, université de Paris VI (1980).
- [14] J. T. Benhlal, K. Strauch, R. Granger and R. Triboulet, Opt. Mater. 12, 143 (1999).
- [15] R. Pässler, Phys. Status Solidi B, 216, 975 (1999).
- [16] R. Pässler, J. Appl. Phys. 89, 6235 (2001).
- [17] B. Segall, Phys. Rev. 150, 734 (1966).
- [18] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 14, 556 (1976).
- [19] H. Kobori, T. Ohyama and E. Otsuka, Solid State Commun. 84, 383 (1992).
- [20] L. S. Dang, G. Neu and R. Romestain, Sol. Stat. Commu. 44, 1187 (1982).
- [21] R. Romestain, C. Weisbuch, Phys. Rev. Lett. 45, 2067 (1980).
- [22] F. A. Selim, V. Swaminathan, F. A. Kröger, Phys. Stat. Sol. A 29, 465 (1975).
- [23] D. de Nobel, Philips Res. Rep. 14, 361 (1959).
- [24] S. Adachi, Handbook on physical properties of semiconductors, Vol. 3: II-VI compound semiconductors, Kluwer Academic Publishers, Boston (2004).
- [25] F. Lévy, Traité des matériaux : Tome 18, Physique et technologie des semiconducteurs, 1^{ère} édition, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, (1995).
- [26] D.R. Wight, D. Bradley, G. Williams, M. Astles, S.J.C. Irvine, J. Cryst. Growth 59, 323 (1982).
- [27] J. Gautron and P. Lemasson, J. Cryst. Growth 59, 332 (1982).

- [28] R. Triboulet and P. Siffert, CdTe and Related Compounds, Physics, Defects, Hetero- and Nano- Structures, Crystal Growth, Surface and Application, part1 : Physics, CdTe-Based Nanostructures, Semimagnetic Semiconductors, and Defects ,1^{ère} édition, Elsevier, (2010).
- [29] S. P. Albright, V. P. Singh, J. F. Jordan, Sol. Cells 24, 43 (1988).
- [30] K. Mitchell, A. L. Fahrenbruch, R. H. Bube, J. Appl. Phys. 49, 829 (1977).
- [31] M. Chu, A. L. Fahrenbruch, R.H. Bube, J. F. Gibbons, J. Appl. Phys. 49, 322 (1978).
- [32] D.R. Wight, D. Bradley, G. Williams, M. Astles, S. J. C. Irvine, J. Cryst. Growth 59, 323 (1982).
- [33] D. R. Wight, D. Bradley, G. Williams, M. Astles, S. J. C. Irvine, J. Cryst. Growth 59, 323 (1982).
- [34] S. Adachi, Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Numerical Data and Graphical Information, Kluwer Academic Publishers, Boston (1999).
- [35] A. N. Pikhtin and A. D. Yaskov, Sov. Phys. Semicond. 12, 622 (1978).
- [36] D. J. Chadi, J. P. Walter, M. L. Cohen, Y. Petroff, and M. Balkanski, Phys. Rev. B 5, 3058 (1972).
- [37] A. J. Strauss, Rev. Phys. Appl. 12, 167 (1977).
- [38] P.Baranski, V.Klotchkov, I. Potykévitch, Electronique de semiconducteurs, 2^{ème} partie, Edition Mir- Moscou (1978).
- [39] K. Ranchandran, P. Philominathan, Applied Surface Science 255, 5736 (2009).
- [40] K. A. Jackson, W. Schroter, Handbook of Semiconductor Technology, Volume 1, Wiley-VCH Verlag GmbH, Germany (2000).
- [41] D. Ohlmann, M. Mazilu, R. Levy, B. Hönerlage, J. appl. Phys. 82,1355 (1997).
- [42] R. Triboulet, G. Didier, J. Cryst. Growth 28, 29(1975).
- [43] M. Aven and J. S. Prener. Physics and Chemistry of II-VI Compounds, Eds. North-Holland, Amsterdam; Interscience (Wiley), New York (1967).
- [44] L. Wenyi, C. Xun, C. Qiulong, Z. Zhibin, Materials Letters 59, 1 (2005).
- [45] C.Y. Yeh, Z.W. Lu, S. Froyen, A. Zunger, Phys. Rev. B 46, 10086(1992).
- [46] M.T.S. Nair, P.K. Nair, R.A. Zingaro, E.A. Meyers, J. Appl. Phys. 75, 1557 (1994).
- [47] N. S. Kozhenikova, A. A. Rempel, F. Hergert, A. Magerl. Thin Solid Films 517, 2586 (2009).
- [48] A. Partovi, J. Millerd, and Elsa M. Garmire, M. Ziari, W. H. Steier, S. B. Trivedi and M. B. Klein, Appl. Phys. Lett. 57, 846 (1990).
- [49] M. Ohmori and Y. Iwase, Materials Science and Engineering, B16, 283 (1993).

- [50] H. Tsutsui, T. Ohtsuchi, K. Ohmori and S. Baba, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, 228(1993).
- [51] A. Kosyachenko, C. P. Lambropoulos, T. Aoki, E. Dieguez, M. Fiederle, D. Loukas, O. V. Sklyarchuk, O. L. Maslyanchuk, E. V. Grushko, V. M. Sklyarchuk, J. Crocco and H. Bensalah, *Semicond. Sci. Technol.* 27, 015007 (2012).
- [52] D. Bonnet, *J. Mater. Res.* 13, 2740 (1998).
- [53] J. Britt and C. Ferekides, *Appl. Phys. Lett.* 62, 2851 (1993).
- [54] R. Pugh, D. Mao, J. G. Zhang, M. J. Heben, A. J. Nelson and A. J. Frank, *J. Appl. Phys.* 74, 2619 (1993).
- [55] C. Eiche, W. Joerger, M. Fiederle, D. Ebling, R. Schwarz, K.W. Benz, *Journal of Crystal Growth* 146, 98 (1995).
- [56] U. Pal, P. Fernández, J. piqueras, N. V. Sochinskii and E. Diéguez, *J. App. Phys.* 78, 1992 (1995).
- [57] I. Turkevych, R. Grill, G. Franc, P. Höschl, E. Belas, P. Moravec, M. Fiederle and K. W. Benz, *Cryst. Res. Technol.* 38, 288 (2003).
- [58] K. Sato, Y. Seki, Y. Matsuda, O. Oda, *J. Crystal Growth* 197, 413 (1999).
- [59] R. Schwarz, W. Joerger, C. Eiche, M. Fiederle, K.W. Benz, *Journal of Crystal Growth* 146, 92 (1995).
- [60] Y. Marfaing, *Journal of Crystal Growth* 197, 707 (1999).
- [61] D. Verstraeten, Thèse de doctorat d'état en sciences physiques, Université de Liège et Bordeaux (2002).
- [62] M. Fiederle, T. Duffar, J. P. Garandet, V. Babentsov, A. Fauler, K. W. Benz, P. Dusserre, V. Corregidor, E. Dieguez, P. Delaye, G. Roosen, V. Chevrier, J. C. Launay, *J. Crystal Growth* 267, 429 (2004).
- [63] M. L. Avenal, Thèse doctorat, Université Paris Sud XI (2012).
- [64] C. Scheiber, G. C. Giakos, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 458, 12 (2001).
- [65] M. Funaki, T. Ozaki, K. Satoh and R. Ohno, *Nucl. Instrum. Methods A* 436, 120 (1999).
- [66] O. Limousin, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 504, 24 (2003).
- [67] V. B. Mazoyer, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux I (1995).
- [68] C. Scheiber, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 380, 385 (1996).
- [69] C. Buis, E. Gros d'aillon, G. Marrakchi, T. A. Lafford, A. Brambilla, L. Verger, *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, 4804 (2011).
- [70] C. Walkons, B. Guralnick, B. M. Candless and R. Birkmire, *IEEE*, 1567 (2014).

- [71] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta and E. D. Dunlop, *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 23, 1 (2015).
- [72] C. S. Ferekides, U. Balasubramanian, R. Mamazza, V. Viswanathan, H. Zhao, D. L. Morel, *Solar Energy* 77, 823 (2004).
- [73] R. Triboulet, A. Tromson-Carli, D. Lorans and T. NguyenDuy, *Journal of Electronic Materials* 22, 827 (1993).
- [74] M. A. Herman and M. Pessa, *J. Appl. Phys.* 57, 2671 (1985).
- [75] B. G. Yacobi, D. B. Holt, *J. Appl. Phys.* 59, R1 (1986).
- [76] D. B. Wittry, D. E. Kyser, *J. Appl. Phys.* 38, 375 (1967).
- [77] A. E. Grünen, *Z. Naturforsch.* 12A, 89 (1957).
- [78] K. Kanaya, S. Okayama, *J. Phys. D : Appl. Phys.* 5, 43 (1972).
- [79] H. A. Bethe, *Handb. de. Phys.* 24, 519 (1933).
- [80] D. C. Joy, *Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis*, Oxford University Press, 57 (1995).
- [81] M. J. Berger and S. M. Selzer, *Nat. Acad. Sci. Natl. Res. Council Publ.* 1133, 205(1964).
- [82] C. Zeller, J. C. R. Coulon, *Hebd. Séan. Acad. Sci.* 295, 431 (1972).
- [83] A. Gustafsson and E. Kapon, *Scanning Microscopy* 12, 285 (1998).
- [84] P. R Edwards and R.W. Martin, *Semicond. Sci. Technol.* 26, 064005 (2011).
- [85] L. J. Brillson, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 45, 183001 (2012).
- [86] B. G. Yacobi et D. B. Holt, *Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids*, Ed. Plenum Press, New York and London (1990).
- [87] www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/mesures-analyses-th1/analyses-de-surface-et-de-materiaux-42383210/cathodoluminescence-p3792.
- [88] J. P. Smith, *Papier N° 38 Présenté à la 3^{ème} Conférence sur "Electron Probe Analysis"*, Chicago, (1968).
- [89] C. A. Klein, *J. Appl. Phys.* 39, 2029 (1968).
- [90] H. J. Fitting, J. Reinhardt, *Phys. Stat. Sol. (a)* 88, 245 (1985).
- [91] G. Neubert and S. Rogaschewski, *Phys. Stat. Sol. (a)* 59, 35 (1980).
- [92] H. J. Hunger and L. Küchler, *Phys. Stat. Sol. (a)* 56, K45 (1979).
- [93] D. F. Kyser. *Poc of the 6th int. conf. on x-rays optics and microanalysis-osaka. Univ. Tokyo Press-Tokyo*, 147 (1972).
- [94] C. J. Wu, D. B. Wittry, *J. Appl. Phys.* 49, 2827 (1978).

- [95] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 4^{ème} ed. , Ed. Masson, Paris (1998).
- [96] P. Kireev, La Physique des Semiconducteurs, Ed. Mir-Moscou (1975).
- [97] A. B. Sproul, J. Appl. Phys. 76, 2851 (1994).
- [98] S. Guha, J. M. DePuydt, M. A. Haase, J. Qiu, and H. Cheng, Appl. Phys. Lett. 63, 3107 (1994).
- [99] R. Bhargava, properties of Wide Bandgap II-VI Semiconductors, Edited by Rameshwar Bhargava Nanocrystals Technology, USA (1997).
- [100] S. Tomiya, T. Hino, S. Goto, M. Takeya and M. Ikeda, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics 10, 1277 (2004).
- [101] S. L. Chuang, M. Ukita, S. Kijima, S. Taniguchi and A. Ishibashi, Appl. Phys. Lett. 69, 1588 (1996).
- [102] P. Capper and J. Garland, Mercury Cadmium Telluride, 1st edition, John Wiley & Sons, United Kingdom (2011).
- [103] S.A. Awadallah, Ph. D. Thesis, Washington state university (2003).
- [104] M. A. Berding, Appl. Phys. Lett. 74, 552 (1999).
- [105] P. Emanuelsson, P. Omling, B. K. Meyer, M. Wienecke, M. Schenk, Phys. Rev. B 47 15578 (1993).
- [106] D. Hennig, M. Hanke, A. Kaschte, J. crystal Growth 101, 355 (1990).
- [107] M. A. Berding, Phys. Rev. B 60, 8943 (1999).
- [108] D. Verstraeten, These doctorat, universités de liège et de bordeaux, France (2002).
- [109] W. Stadler, D. M. Hofmann, H. C. Alt, T. Muschik, B. K. Meyer, E. Weigel, G. Müller-Vogt, M. Salk, E. Rupp, K.W. Benz, Phys. Rev. B 51, 10619 (1995).
- [110] B. K. Meyer, W. Stadler, J. Cryst. Growth 16, 119 (1996).
- [111] M. A. Berding, M. Schiffgaarde, A. Paxton, A. Sher, J. Vac. Sci. Technol. 8, 1103 (1990).
- [112] V. Babentsov, V. Corregidor, K. Benz, M. Fiederle, T. Feltgen, E. Diéguez, Nucl. Instr. Methods A 458, 85 (2001).
- [113] B. Boltaks, Diffusion et défauts ponctuels dans les semiconducteurs, édition MIR (1977).
- [114] L. Svob and C. Grattpain, J. Solid. Stat. Chim. 20, 297 (1977).
- [115] H. J. Bardeleben, T. Arnoux and J. C. Launay, J. Cryst. Growth 197, 718 (1999).
- [116] W. Jantsch, G. Brunthaler, Appl. Phys. Lett. 46, 665 (1985).
- [117] Y. P. Gnatenko, P. N. Bukivski, R. V. Gamernik, I. O. Farina, Sol. Stat. Commun. 93, 465 (1995).

- [118] J. Kreissl, H. J. Schulz, *J. Cryst. Growth* 161, 239 (1996).
- [119] A. Zerrai, G. Marrakchi, G. Brèmond, *J. Appl. Phys.* 87, 4293 (2000).
- [120] C. Delerue, M. Lannoo and G. Allan, *Phys. Rev. B* 39, 1669 (1989).
- [121] G. Hendorfer, G. Brunthaler, W. Jantsch, J. Reisinger and H. Sitter, *J. Cryst. Growth* 86, 497 (1988).
- [122] W. Hergert, P. Reck, L. Pasemann and J. Schreiber, *Phys. Stat. Sol. (a)* 101, 611(1987).
- [123] S. Achour, *Phil. Mag. Lett.* 59, 205 (1989).
- [124] S. Hildebrandt, J. Schreiber, W. Hergert and V. I. Petrov, *Phys. Stat. Sol. (a)* 110, 283 (1988).
- [125] J. F. Bresse, *Materials Science and Engineering B*42, 199 (1996).
- [126] A. Djemel, R. J. Tarento, J. Castaing, Y. Marfaing and A. Nouri, *Phys. Stat. Sol. (a)* 168, 425(1998).
- [127] J. C. H. Phang, K. L. Pey and D. S. H. Chan, *IEEE Trans. Electron Devices* 39, 782 (1992).
- [128] N. N. Mikheev, *Sov. Phys. Semicond.* 21, 226 (1987).
- [129] R. J. Tarento, Y. Marfaing, *J. Appl. Phys.* 71, 4997 (1992).
- [130] D. Kenieche and K. Guergouri, *J. Mat. Sci. Eng.* 5, 473 (2011).
- [131] S. M. Sze, *Physics of Semiconductors Devices*, 2nd edit., Ed. John Wiley and Sons, New York (1981).
- [132] W. Hergert and L. Pesemann, *Phys. Stat. Sol. (a)* 85, 641 (1984)
- [133] F. Cléton, B. Sieber, R. A. Masut, L. Isnard, J. M. Bonard and J. D. Ganière, *Semicond. Sci. Technol.* 11, 726 (1996).
- [134] Y. P. Varshni, *Physica* 34, 149 (1967).
- [135] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*, edit. John Wiley & Sons, England (2005).
- [136] O. Lopatiuk-Tirpak, L. Chernyak, F. X. Xiu, J. L. Liu, S. Jang, F. Ren, S. J. Pearton, K. Gartsman, Y. Feldman, A. Osinsky, P. Chow, *J. Appl. Phys.* 100, 086101 (2006).
- [137] M. Caillot, *Rev. Phy. Appl.* 12, 241 (1977).
- [138] P. Gaugash and A. G. Milnes, *J. Electrochimi. Soc.* 128, 921(1981).
- [139] A. Etchebery, M. Etman, B. Foutouhi, J. Gautron, J. L. Sculfort and P. Lemasson, *J. Appl. Phys.* 51, 8867 (1982).
- [140] T.L. Chu, S.S. Chu, Y. Pauleau, K. Murthy, E. D. Stokes, P. E. Russel, *J. Appl. Phys.* 54, 398 (1983).

- [141] P. Leturcq et G. Rey, *Physique des composants actifs à semiconducteurs*, édit. Dunod université (1978).
- [142] B. Segall, M. R. Lorenz and R. E. Halsted, *Phy. Rev.* 129, 2471 (1963).
- [143] J. Franc, R. Grill, L. Turjanska, P. Höschl, E. Belas, and P. Moravec, *J. APP. Phys.* 89, 786 (2001).
- [144] V. D. Popovych, F. F. Sizov, O. A. Parfenjuk and Z. F. Tsybrii, *Semicond. Sci. Technol.* 25, 1(2010).
- [145] I. Turkevych, R. Grill, J. Franc, E. Belas, P. Höschl and P. Moravec *Semicond. Sci. Technol.* 17, 1064 (2002).
- [146] B. Sieber, *Thèse de Doctorat Es-Sciences*, Univ. Paris Sud (1985).
- [147] D. Kranzer, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 6, 2977 (1973).
- [148] F. Low and D. Pines, *Phys. Rev.* 98, 414 (1955).
- [149] N. V. Kurik, *phys. stat. sol. (a)* 8, 9 (1971).
- [150] R. K. Ahrenkiel, N. Call, S. W. Johnston and W. K. Metzger, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 94, 2197 (2010).
- [151] D. Kuciauskas, A. Kanevce, P. Dippo, S. Seyedmohammadi and R. Malik, *IEEE J. of Photovoltaics* 5, 366 (2015).
- [152] A. P. Kirk, M. J. DiNezza, S. Liu, X.-H. Zhao and Y.-H. Zhang, In *Proc. IEEE 39th Photovoltaic Spec. Conf.*, 2515 (2013).
- [153] R. Cohen, V. Lyahovitskaya, E. Poles, A. Liu, and Y. Rosenwaks, *Appl. Phys. Lett.* 73, 1400 (1998).
- [154] X.-H. Zhao, M. J. DiNezza, S. Liu, S. Lin, Y. Zhao, and Y.-H. Zhang, *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct.* 32, 040601-1 (2014).
- [155] T. Takebe, J. Saraie and H. Matsunami, *J. Appl. Phys.* 53, 457 (1982).
- [156] L. Reimer, *Scanning Electron Microscopy*, second edit., Springer, Berlin (1998).
- [157] J. Cazaux, *Revue Phys. Appl.* 10, 263 (1975).
- [158] S. J. b. Reed, *Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology*, second edit., Cambridge University Press (2005).
- [159] F. Rossi, G. Salviati, M. Pavesi, M. Manfredi, M. Meneghini, G. Meneghesso, E. Zanoni and U. Straub, *Semiconductor Science and Technology* 21, 638 (2006).
- [160] J. Bok and P. Schauer, *Meas. Sci. Technol.* 25, 075601 (2014).
- [161] D. Lindgren, O. Hultin, M. Heurlin, K. Storm, M. T. Borgström, L. Samuelson and A. Gustafsson, *Nanotechnology* 26, 045705 (2015).

- [162] C. Itoh, T. Suzuki, N. Itoh, *Phys. Rev. B* 41, 3794 (1990).
- [163] A. Djemel , S. Kouissa , R.J. Tarento, *Physics Procedia* 2, 845 (2009).
- [164] S.J. Pennycook, *Ultramicroscopy* 7, 99 (1981).
- [165] V. I. Petrov, *Physica Status Solidi (a)* 133, 189 (1992).
- [166] Y.E. Gagarin, N.N. Mikheev, N.A. Nikiforova, M.A. Stepovich, *International Conference on Advanced Optoelectronics & Lasers*, 09-13 September, Sudak, Ukraine, 344 (2013).
- [167] P.C. Sercel, H.A. Zarem, J.A. Lebens, ; L.E. Eng, A.Yariv, K.J.Vahala, *Electron Devices Meeting*, 3-6 Dec1989. Washington DC, USA, 285.
- [168] H. Guthrey, J. Moseley, J. Burst, W. Metzger, M. Al-Jassim, *Photovoltaic Specialist Conference (PVSC)*, 2014 IEEE 40th, 8-13 June 2014, Denver Colorado, USA, 869 (2014).
- [169] K. Alberi, B. Fluegel, M.J. DiNezza, S. Liu, Y.-H. Zhang, and A. Mascarenhas, *Appl. Phys. Express* 7, 065503 (2014).
- [170] A. Rivi re, B. Sieber, J.P. Rivi re, *Microsc. Microanal. Microstruct.* 2, 503 (1991).
- [171] G. Salviati, P. Franzosi, M. Scaffardi, and S. Bernardi ,*Applied Physics Letters* 65, 3257 (1994).
- [172] T.E. Schlesinger, J. E. Toney, H. Yoon, E.Y. Lee, B. A. Brunett, L. Franks, and R. B. James, *Mater. Sci. Eng. Rep.* 32, 103 (2001).
- [173] V. Babentsov, F. Sizov, J. Franc, P. Fochuk, G. Yang, A. Bolotnikov, and R.B. James, *IEEE/MIC/RTSD Conference Anaheim, California October 29 – November 3*, (2012).
- [174] R. B. James, T. E. Schlesinger, J. C. Lund, and M. Schieber, *Semiconductors for Room Temperature Nuclear Detector Applications*, Academic Press, New York, Vol. 43, 334 (1995).
- [175] C. Donolato , *Optik* 52 ,19 (1978).
- [176] H.S. Leipner, J. Schreiber, H. Uniewski and S. Hildebrandt, *Scanning Microscopy* 12, 149 (1998).
- [177] C. Buis, E. Gros d'Aillon, A. Lohstroh, G. Marrakchi, C. Jeynes, L.Verger, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 735,188 (2014).
- [178] Y.F. Chen, C.S. Tsai, Y.H. Chang, Y.M. Chang, T.K. Chen, Y.M. Pang, *Appl. Phys. Lett.* 58, 493 (1991).
- [179] S. Gurumurthy, H.L. Bhat, B. Sundershesu, B.K. Bagai, V. Kumar, *Appl. Phys. Lett.* 68, 2424 (1996).
- [180] L. Svob and Y. Marfaing, *Solid State Communications* 58, 343 (1986).

- [181] X.D. Qu, L.Z. Sun, Y.P. Chen, W. Lu, J.X. Zhong, *Physics Letters A* 373, 791 (2009).
- [182] M.D. Kim, T.W. Kang, T.W. Kim, *Applied Surface Science* 137, 57 (1999).
- [183] A. Boudoukha, R. Legros, L. Svob, Y. Marfaing, *J. Crystal Growth* 72, 226 (1985).
- [184] Y. I. Pankove, R. O. Wance, Y.E. Berkeyheiser, *Appl. Phys. Lett.* 45, 1100 (1984).
- [185] S.M. Sze, *VLSI Technology*, McGraw-Hill, New York (1988).
- [186] K. Guergouri, Thèse de doctorat, Univ. Paris VI (1987).
- [187] T. I. Kovtunuva, N.N. Mikheev, A. N. Polyakov, and M. A. Stepovich, *J. Surf. Inv. X-ray, Sync. Neut. Tech.* 4, 778 (2010).

Annexes

Annexe A

Principales propriétés des semiconducteurs: CdTe, ZnTe et CdS

Tableau résumant les propriétés de quelques matériaux des composés binaires II-VI à 300 K.

Propriétés	CdTe	ZnTe	CdS
Energie de la bande interdite (eV)	1.52	2.26	2.45
Type de transition	direct	direct	direct
Numéro atomique Z	50	41	32
Longueur de liaison r_0 (Å°) à l'équilibre	Cd-Cd 4.558 Cd-Te 2.80	Zn-Zn 4.249 Zn-Te 2.602	Cd-Cd 4.19 Cd-S 2.52
Paramètre de maille (Å°) pour :			
- La structure hexagonale: (a, c)	4.57, 7.47	4.27, 6.99	4.14, 6.72
- La structure cubique : a	6.48	6.10	5.82
Masse moléculaire M (g)	240	192.99	144.477 (c-CdS)
Densité (g/cm ³)	6.1	6.0	4.855 (c-CdS)
Point de fusion T_f (°C)	1092	1295	1475
Conductivité thermique K_T (W.cm ⁻¹ .K ⁻¹)	0.075	0.18	0.18 (c-dS)
Chaleur spécifique C_p (Cal. mol ⁻¹ .K ⁻¹)	11.9	11.9	13.2
Diffusité thermique D_{th} (cm ² .s ⁻¹)	10 ⁻⁵ à 800°C	-	-
Coefficient de dilatation linéaire α_L (K ⁻¹)	4.9x10 ⁻⁶	8.4x10 ⁻⁶	5x10 ⁻⁶ (w-CdS)
Module d'Young E (N.m ⁻²)	<111> 5.33x10 ¹⁰ <100> 2.35x10 ¹⁰	7.8x10 ¹⁰ 4.18x10 ¹⁰	6.26x10 ¹⁰ 3.26x10 ¹⁰
Coefficient de Poisson ν	0.41	0.36	0.41
Constantes d'élasticité (C_{11}, C_{12}, C_{44}) (N.m ⁻²)	5.33x10 ¹⁰ 3.65x10 ¹⁰ 2.04x10 ¹⁰	7.13x10 ¹⁰ 4.07x10 ¹⁰ 3.12x10 ¹⁰	7.70x10 ¹⁰ 5.39x ¹⁰ 2.36x ¹⁰
Affinité électronique χ (eV)	4.28	3.5	4.5 (c-CdS)
Ionicité f	0.72	0.526	0.685 (c-CdS)

Travail de sortie (eV)	5.72	5.76	6.92
Longueur d'onde d'émission fondamentale λ (μm)	0.817	0.548	0.506
Densité d'état effective de la bande de valence N_V (cm^{-3})	1.16×10^{19}	1.16×10^{19}	1.4×10^{19}
Densité d'état effective de la bande de conduction N_C (cm^{-3})	7.46×10^{17}	9.12×10^{17}	13.1×10^{17}
Résistivité intrinsèque ρ_i ($\Omega \cdot \text{cm}$)	10^{11} (estimée) $\sim 10^9$ (pratique)	-	10^{10}
Mobilité des électrons μ_e ($\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$)	1200	600	340
Mobilité des trous μ_h ($\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$)	80	100	50
Masse effective en (m_0) :			
- Electrons m_e^*	0.096	0,11	0.14
- Trous m_h^*	0.60	0.6	0.68
Constante diélectrique statique $\epsilon_r(0)$	10.90	10.1	9.5 (w-CdS)
Indice de réfraction n	2.65 à $10.6 \mu\text{m}$ 2.75 à $1.4 \mu\text{m}$	2.44 à $1.5 \mu\text{m}$ 3.39 à $0.80 \mu\text{m}$	2.48 à $0.63 \mu\text{m}$
Coefficient d'absorption α (cm^{-1})	10^4	-	-
Vitesse thermique V_{th} des électrons, trous ($\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$)	3.7×10^7 , 1.5×10^7	3.52×10^7 , 1.5×10^7	3.12×10^7 , 1.40×10^7
Densité des porteurs intrinsèques (valeur théorique) n_i (cm^{-3}).	6.9×10^5	~ 0	~ 0

Remarque : w-CdS : würtzite CdS

c-CdS : cubique CdS

Annexe B

Calcul des constantes aux limites

Les expressions de l'excès de concentration de porteurs et leurs flux à la surface du semiconducteur prennent les formes suivantes :

$$\Delta n(z) = a_1 \cdot \theta_n + b_1 \cdot \xi_n$$

$$\Delta p(z) = a_2 \cdot \theta_p + b_2 \cdot \xi_p$$

$$J_n(0) = c_1 \cdot \theta_n + d_1 \cdot \xi_n$$

$$J_p(0) = c_2 \cdot \theta_p + d_2 \cdot \xi_p$$

Avec :

$$a_1 = \exp(\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$b_1 = -\exp(\alpha \cdot Z_d^2) \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$a_2 = \exp(-\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$b_2 = -\exp(-\alpha \cdot Z_d^2) F(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$c_1 = \left[2 \cdot \alpha \cdot D_n - \frac{e^2 \cdot N_a \cdot D_n}{\varepsilon \cdot K T} \right] \cdot Z_d \cdot \exp(\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$d_1 = -2 \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot D_n - c_1 \cdot \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$c_2 = \left[-2 \cdot \alpha \cdot D_p + \frac{e^2 \cdot N_a \cdot D_p}{\varepsilon \cdot K T} \right] \cdot Z_d \cdot \exp(-\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$d_2 = -\sqrt{\alpha} \cdot D_p - c_2 \cdot F(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

En utilisant les équations faisant intervenir les constantes aux limites (§ IV.1.4), on peut écrire les relations suivantes :

$$B_n = \theta_n + G_n$$

$$\theta_p = \theta_n + G_n - G_p$$

$$\xi_n = \alpha_n + \gamma_n \cdot \theta_n$$

$$\xi_p = \alpha_p + \gamma_p \cdot \theta_n$$

Où :

$$\gamma_n = -\frac{1}{2.L_n} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\alpha_n = -\gamma_n \cdot \left[H_n - G_n - \frac{L_n}{D_n} \cdot J_b^0 \right]$$

$$\gamma_p = \frac{c_1 - c_2 + \gamma_n \cdot d_1}{d_2}$$

$$\alpha_p = \frac{d_1 \cdot \alpha_n - (G_n - G_p) \cdot c_2}{d_2}$$

$$G_n = \int_0^{Z_d} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{1}{2.D_n} \cdot \text{erf}[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)] G(z') dz'$$

$$G_p = \int_0^{Z_d} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{1}{D_p} \cdot F[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)] G(z') dz'$$

Les expressions de H_n et J_b^0 sont :

$$H_n = \int_0^{Z_d} \frac{L_n}{D_n} \cdot G(z') dz'$$

$$J_b^0 = -A \left(\Delta u \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) \cdot \exp \left[(u_d - u_0)w + \left(\frac{w \cdot \Delta u}{2} \right)^2 \right] \cdot \text{erfc} \left(\frac{u_d - u_0}{\Delta u} + \frac{w \cdot \Delta u}{2} \right) + \frac{B}{(b/u_0) + w} \cdot \exp \left(-b \cdot \frac{u_d}{u_0} \right)$$

où :

$$u_d = \frac{\rho}{R_e} \cdot Z_d, \quad w = \frac{R_e}{\rho \cdot L_n}$$

A partir de l'équation (IV.31f), on peut écrire :

$$J_n(0) = -u(0)$$

$J_0(0)$ est le flux des électrons à la surface, donné par :

$$J_n(0) = c_1 \cdot \theta_n + d_1 \cdot \xi_n$$

$u(0)$ est le taux de recombinaison à la surface donné par la relation :

$$u(0) = \frac{c \cdot N_t [\Delta n(0) \cdot \Delta p(0) + p_0 \cdot \Delta n(0) + n_0 \cdot \Delta p(0)]}{n_0 + \Delta n(0) + n_t + p_0 + \Delta p(0) + p_t}$$

Après la simplification de ($J_n(0) = -u(0)$), cette équation conduit à une équation de 2^{ème} degré de θ_n , d'où la forme finale :

$$K \cdot \theta_n^2 + L \cdot \theta_n + M = 0$$

Où :

$$L = L_1 + L_2 + L_3, \quad M = M_1 + M_2$$

$$L_1 = b_1 \cdot \alpha_n (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) + (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \alpha_p] + (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot p_0 \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot n_0 \cdot s$$

$$L_2 = (c_1 + d_1 \cdot \gamma_n) \{ b_1 \cdot \gamma_n \cdot \tau_p \cdot s + [a_2 \cdot (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot \tau_n \cdot s + [(n_0 + n_t) \cdot \tau_p + (p_0 + p_t) \cdot \tau_n] s^2 \}$$

$$L_3 = (d_1 \cdot \alpha_n) [(a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot \tau_p \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot \tau_n \cdot s]$$

$$M_1 = b_1 \cdot \gamma_n [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] + b_1 \cdot \alpha_n \cdot p_0 \cdot s + [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot n_0 \cdot s$$

$$M_2 = (d_1 \cdot \alpha_n) \{ b_1 \cdot \alpha_n \cdot \tau_p \cdot s + [a_2 \cdot (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot \tau_n \cdot s + [(n_0 + n_t) \cdot \tau_p + (p_0 + p_t) \cdot \tau_n] s^2 \}$$

$$K = (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) + (c_1 + d_1 \cdot \gamma_n) [(a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot \tau_n \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot \tau_n \cdot s]$$

Avec :

$$s = \pi \left(\frac{R_e}{\rho} \right)^2$$

La solution de cette équation est :

$$\theta_{n1} = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4.K.M}}{2.K}$$

$$\theta_{n2} = \frac{-L - \sqrt{L^2 - 4.K.M}}{2.K}$$

La solution valable pour l'utilisation dans notre étude est :

$$\theta_n = \theta_{n1} = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4.K.M}}{2.K}$$

Theoretical and practical study of the cathodoluminescence to determine the influence of defects in the II-VI semiconductors

Abstract

The objective of this thesis is the theoretical and experimental study of the cathodoluminescence intensity (I_{CL}) to determine the influence of different physical parameters: material parameters, parameters of the incident electron beam and the temperature.

A theoretical model that allows the calculation of the cathodoluminescence signal, as a function of incident electron beam parameters, adapted to cadmium telluride bulk material p-type has been established. Through this model we were able to evaluate the role and contribution of each of these parameters.

The modeling is based on solving the equations of continuity of both types of charge carriers to both the surface and volume of the material. To do this a method of self-consistent calculation in order to determine the concentration of the charge carriers in excess and the width of the depletion region at the material surface has been used.

The numerical simulation results permitted us to determine the effect of the most important parameters that govern the behavior of cathodoluminescence. The dependence of the cathodoluminescence intensity with the local thermal effect induced by the electron beam has also been studied. Furthermore, the simulation allowed us to analyze deeply the role of defects on properties of the barrier height at the semiconductor surface.

Using experimental measurements of the cathodoluminescence intensity at room temperature on a list of samples of p-type CdTe and $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$, we have been able to clarify, through a comparative study, the effects of various experimental conditions such as: the hydrogenation, the annealing, the plastic deformation, the side effects and addition of zinc.

Our simulation work has been validated by various experimental measurements. These later show a great agreement with the results obtained by simulation.

Keywords: Cathodoluminescence, CdTe, Modeling, Self-consistent calculation, Defects in semiconductors.

دراسة نظرية وتطبيقية للتألق المهبطي من أجل تحديد تأثير العيوب في المواد نصف الناقلية II-VI

ملخص

الهدف من هذه الأطروحة هو الدراسة النظرية والتطبيقية لشدة إشارة التألق المهبطي (ICL)، من أجل تحديد تأثير مختلف الوسائط الفيزيائية عليه : خصائص المادة، خصائص الحزمة الإلكترونية الواردة ودرجة الحرارة.

وبناء عليه تم إنجاز أنموذج نظري يسمح بحساب شدة التألق المهبطي - بدلالة معاملات الحزمة الإلكترونية الواردة - في المادة نصف الناقلية تيلوريد الكاديوم من نوع p. استطعنا بواسطة هذا الأنموذج تقدير مدى تأثير هذه الوسائط الفيزيائية.

ترتكز النمذجة على حل معادلة الإستمرارية لكلا النوعين من حاملات الشحنة فيما يتعلق بسطح وحجم المادة، وذلك باستعمال طريقة حساب ذاتية تسمح بتحديد تركيز نسبة الحاملات الزائدة وكذا عرض المنطقة الناضبة على السطح.

بينت نتائج المحاكاة العددية تأثير أهم الوسائط التي تتحكم في سلوك إشارة التألق المهبطي. كذلك تمت دراسة اعتماد شدة إشارة التألق المهبطي على الأثر الحراري الناتج عن القذف الإلكتروني لسطح المادة. إضافة إلى ذلك، سمحت لنا هذه المحاكاة بالتحليل المعمق لدور خصائص العيوب على علو الحاجز الكموني عند سطح نصف الناقل.

سمحت لنا نتائج القياسات التجريبية لشدة إشارة التألق المهبطي المنجزة على عدة عينات من CdTe و $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ من نوع p في درجة حرارة الغرفة، من خلال دراسة مقارنة، تحديد مدى تأثير مختلف الشروط التجريبية المتمثلة في: الهدرجة، التلدين، التشويه للندن، تأثير الوجه البلوري وكذلك إضافة الزنك. في الأخير تم التحقق من صحة نتائج المحاكاة النظرية بواسطة القياسات التجريبية المخبرية، والتي أكدت فعليا حصول التوافق التام مع نتائجها.

كلمات مفتاحية: التألق المهبطي، CdTe، نمذجة، حساب ذاتي، العيوب في أنصاف النواقل.

Etude théorique et pratique de la cathodoluminescence en vue de la détermination de l'influence des défauts dans les matériaux II-VI

Résumé

L'objectif de ce travail de thèse est l'étude théorique et expérimentale de l'intensité de cathodoluminescence (I_{CL}), en vue de déterminer l'influence de différents paramètres physiques : paramètres du matériau, paramètres du faisceau électronique incidents et la température.

Un modèle théorique qui permet le calcul du signal de cathodoluminescence, en fonction des paramètres du faisceau d'électrons incidents, adapté au matériau massif du tellure de cadmium de type p a été établi. Nous avons pu, grâce à ce modèle, évaluer le rôle et la contribution de chacun de ces paramètres.

La modélisation est basée sur la résolution des équations de continuité des deux types de porteurs de charges à la surface et dans le volume du matériau. On utilise pour cela une méthode de calcul auto-cohérent en vue de déterminer la concentration des porteurs de charges en excès et la largeur de la zone de déplétion à la surface du matériau.

Les résultats de la simulation numérique ont permis de déterminer l'effet des paramètres les plus importants régissant le comportement de la cathodoluminescence. La dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec l'effet thermique local induit par le bombardement électronique a été également étudiée. De plus, la simulation nous a permis une analyse plus approfondie du rôle joué par les propriétés des défauts sur la hauteur de barrière à la surface du semiconducteur.

A l'aide des mesures expérimentales de l'intensité de cathodoluminescence à température ambiante sur une série d'échantillons de CdTe et $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ de type p, nous avons pu mettre en évidence, à l'aide d'une étude comparative, les effets de différentes conditions expérimentales telles que : l'hydrogénation, le recuit, la déformation plastique, l'effet de la face et l'addition du zinc.

Notre travail de simulation a été validé par diverses mesures expérimentales. Celles ci montrent une grande concordance avec les résultats obtenus par simulation.

Mots Clés: Cathodoluminescence, CdTe, Modélisation, Calcul auto-cohérent, Défauts dans les semiconducteurs.