

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MENTOURI-CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :

Série :

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme de Magister

En Physique des Solides

THEME

**Contribution à l'étude théorique de la cathodoluminescence dans
p-CdTe**

Influence des différents paramètres physiques de surface et de volume

OPTION :

PHYSIQUE DES SEMICONDUCTEURS

Par :

KENIECHE DAOUD

Soutenue le : 17/04/2001

Devant le jury :

Président	: A. Djemel	Prof. Univ. Mentouri-Constantine
Rapporteur	: K. Guergouri	Prof. Univ. Mentouri-Constantine
Examineurs	: S. Hamzaoui	Prof. Univ. U. S. T. O - Oran
	M. S. Aida	Prof. Univ. Mentouri-Constantine
	A. Zamouche	M. C. Univ. Mentouri-Constantine

Dédicace

A mes parents

A mes chers frères Omar, Elyes, Antar et Lamine

A mes chères sœurs Houria, Cherifa, Sadjia, Akila et Nawal

A mes neveux Walid et Houda

Daoud ...

Remerciements

Le présent travail a été effectué au laboratoire de Physique- chimie des Semiconducteurs (Département de physique, Faculté des sciences, Université Mentouri-Constantine).

J'exprime mes sincères remerciements et ma profonde gratitude à mon directeur de thèse, Monsieur, **K. Guergouri**, Professeur à l'Université Mentouri de Constantine qui m'a initié à la recherche, et pour son aide efficace, ses remarques utiles, et ses fructueux conseils qu'il n'a cessé de donner tout au long de mon travail.

J'adresse mes remerciements les plus respectueux à Monsieur **A. Djemel**, Professeur à l'Université Mentouri de Constantine pour l'honneur qu'il m'a fait d'accepter de juger ce travail et de présider le jury de ma thèse, et également pour les discussions très instructives que j'ai eu avec lui.

Messieurs, **S. Hamzaoui**, Professeur à l'Université d'Oran (U. S. T. O), **M. S. Aida**, Professeur à l'Université Mentouri de Constantine, **A. Zamouche**, M. C. à l'Université Mentouri de Constantine, ont accepté d'examiner ce travail, qu'ils trouvent ici ma profonde reconnaissance et mes remerciements les plus sincères.

Je ne saurais oublier dans mes remerciements, Monsieur **A. Nouiri**, Maître assistant à l'Université Mentouri de Constantine pour son aide permanente, ses précieux conseils et ses suggestions qui m'ont éclairé dans les moments les plus opportuns.

Mes remerciements vont, également, à tous mes amis ainsi que tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin à réaliser ce travail.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	01
------------------------------------	----

CHAPITRE I : LA CATHODOLUMINESCENCE DANS LES SEMICONDUCTEURS

I.1. Introduction.....	03
I.2. Définition de la cathodoluminescence.....	03
I.3. Techniques de la cathodoluminescence.....	03
I.4. Principe de la cathodoluminescence.....	04
I.5. Applications de la cathodoluminescence.....	04
I.6. Comparaison de la cathodoluminescence avec quelques techniques de caractérisation.....	07
I.7. Le matériau CdTe.....	08
I.7.1. Structure cristalline.....	08
I.7.2. Propriétés physiques.....	09

CHAPITRE II : INTERACTION ELECTRON-MATIERE

II.1. Introduction.....	11
II.2. Volume d'interaction électron-matière.....	11
II.3. Différents signaux émis sous l'impact d'un faisceau d'électrons avec la matière.....	11
II.4. La diffusion élastique.....	14
II.5. La diffusion inélastique.....	14
II.6. La perte d'énergie des électrons incidents.....	14
II.7. Description d'une trajectoire électronique.....	15
II.7.1. Parcours électronique.....	15
II.7.2. Création de paires électron-trou par un faisceau électronique.....	19
II.7.2.1. Energie de création de paires électron-trou.....	19
II.7.2.2. La fonction de génération de paires électron-trou.....	21
II.8. Fonction de dissipation d'énergie normalisée.....	22
II.9. Transitions électroniques dans les semiconducteurs.....	26
II.9.1. Recombinaisons radiatives.....	27
II.9.2. Recombinaisons non radiatives.....	30

II.9.3. Recombinaisons excitoniques.....	31
II.10. Propriétés de surface des semiconducteurs.....	31
II.10.1. Les états de surface.....	31
II.10.2. La vitesse de recombinaison en surface.....	32

CHAPITRE III : MODELISATION DE L'INTENSITE DE CATHODOLUMINESCENCE

III.1. Introduction.....	34
III.2. Les bases physiques du modèle.....	35
III.3. Analyse de la surface libre du semiconducteur.....	36
III.4. Equations de transport des porteurs de charges.....	39
III.4.1. L'équation de continuité.....	39
III.4.2. Résolution de l'équation de continuité dans la région déplétée.....	42
III.4.3. Résolution de l'équation de continuité dans la région neutre.....	44
III.4.4. Conditions aux limites.....	45
III.5. Calcul self-consistent.....	48
III.6. Calcul de l'intensité du signal de cathodoluminescence.....	49
III.7. Organigramme.....	52

CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATIONS

IV.1. Introduction.....	53
IV.2. Variation des concentrations de porteurs en excès à la surface du semiconducteur.....	53
IV.3. Variation de la largeur de la zone déplétée avec les paramètres du faisceau et du matériau.....	54
IV.3.1. Influence de l'énergie incidente.....	55
IV.3.2. Influence du niveau énergétique des défauts de surface.....	55
IV.3.3. Influence de la densité des états de surface.....	57
IV.3.4. Influence de la concentration de dopage.....	58
IV.3.5. Influence de la longueur de diffusion.....	60
IV.4. Dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec les conditions d'excitation et les propriétés du matériau.....	61

IV.4.1. Variation de l'intensité I_{CL} avec les conditions d'excitation du faisceau incident...	61
IV.4.1.1. Influence de l'intensité du courant incident.....	61
IV.4.2. Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de volume.....	62
IV.4.2.1. Influence de la longueur de diffusion	62
IV.4.2.2. Influence du coefficient d'absorption.....	64
IV.4.2.3. Influence de la concentration de dopage.....	66
IV.4.3. Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de surface.....	67
IV.4.3.1. Influence du niveau énergétique des défauts de surface.....	67
IV.4.3.2. Influence de la largeur de la région déplétée.....	67
IV.4.3.3. Influence de la densité des états de surface.....	69
IV.5. Conclusion.....	70
CONCLUSION GENERALE	71
REFERENCES	72
ANNEXES	
Annexe I : Principales propriétés physiques de CdTe à 300 K.....	75
Annexe II : Procédure de calcul des constantes u_0 , Δu , B/A , b pour le cas de CdTe.....	77
Annexe III : Calcul des constantes aux limites	82

INTRODUCTION GENERALE

Durant les dernières années, un intérêt grandissant a été donné à la microscopie électronique à balayage en mode cathodoluminescent, à cause de ses applications qui couvrent une large gamme de matériaux tels que les semiconducteurs, les céramiques, les minéraux, les polymères et même les matériaux biologiques, afin de déterminer leurs différentes propriétés, principalement les propriétés électroniques et optiques.

Les semiconducteurs sont des matériaux solides caractérisés par une bande interdite, région séparant la bande de valence de la bande de conduction, appelée gap, et dont la largeur représente un paramètre essentiel dans l'application des différents semiconducteurs. Ces derniers ont connu un intérêt certain depuis plus d'un demi-siècle et ont été de ce fait, largement étudiés. Cet intérêt est légitime si on se rend compte des services que rendent ces matériaux à notre vie moderne et leur contribution dans les principaux développements technologiques. Ce sont les matériaux de base de l'électronique et de l'optoélectronique.

Le tellure de cadmium appartient à ce groupe de matériaux, il fait partie de la famille des composés semiconducteurs II-IV, caractérisés par une large bande interdite ($E_g > 1.5\text{eV}$) et dont leurs applications couvrent des domaines que d'autres semiconducteurs très connus, tels que le Si le Ge ou encore le GaAs ne peuvent le faire. Ils sont utilisés dans le domaine du visible (dispositifs électroluminescents, cellules solaires), dans l'infrarouge (détection infrarouge, télécommunications, lasers) et dans la détection nucléaire (détection des rayonnements X et γ pour CdTe).

La performance des dispositifs électroniques est reliée directement aux propriétés physiques de volume et de surface du matériau [1], et en outre, les différentes applications exigent une connaissance approfondie des différentes propriétés qui les caractérisent, ce qui demande une étude approfondie de celles-ci.

La cathodoluminescence offre, entant qu'outil d'étude de ces propriétés, une méthode de caractérisation non destructive utilisant l'émission de photon (visible ou proche infra rouge) d'un échantillon soumis à l'irradiation d'un faisceau d'électrons. Elle est applicable en particulier aux matériaux semiconducteurs [2].

Nous avons eu recours dans notre étude à cet outil très important afin de connaître les propriétés et les paramètres gouvernant les comportements électriques et optiques de CdTe, car la cathodoluminescence s'est avérée un puissant moyen de caractérisation qui permet l'étude et l'analyse des propriétés électroniques des matériaux semiconducteurs avec des précisions inférieures au micron [3], elle permet également une haute résolution spatiale, et la variation de

l'énergie d'accélération du faisceau électronique permet d'avoir des informations plus détaillées en profondeur.

La cathodoluminescence peut atteindre plusieurs paramètres [4], à titre d'illustration nous citons la longueur de diffusion, la durée de vie des porteurs minoritaires, la concentration des porteurs etc..., et cela par la caractérisation de la lumière émise, enregistrée sous forme de spectres ou encore par la mesure de l'intensité totale de cathodoluminescence.

Le travail de cette thèse est une contribution à l'étude de la cathodoluminescence dans CdTe ; il est basé sur des calculs théoriques, qui peuvent rendre compte et prédire l'influence de différents paramètres et par la suite de minimiser le coût des manipulations pratiques consacrés à l'étude de ces matériaux.

Nous avons focalisé notre travail sur l'étude de l'influence des paramètres du faisceau incident ainsi que les différents paramètres de surface et de volume sur le signal de cathodoluminescence, ce qui a conduit à notre manuscrit, dont le contenu est divisé en quatre chapitres.

Le premier chapitre présente des notions sur la cathodoluminescence et son application pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs, ainsi que la présentation du semiconducteur binaire CdTe, en faisant apparaître ses propriétés les plus importantes et ayant surtout un impact sur notre étude.

Dans le deuxième chapitre nous exposons, dans sa première partie, un rappel théorique de l'interaction électron-matière, puis les différents modèles décrivant la dissipation d'énergie, le parcours électronique, ainsi que les phénomènes de génération-recombinaison des paires électron-trou. La seconde partie quant à elle est consacrée aux propriétés de surface des semiconducteurs.

Les étapes nécessaires à la modélisation du signal de cathodoluminescence, avec un peu plus détail pour le modèle proposé, l'analyse de la surface libre et la résolution des équations de continuité dans la zone de déplétion et la zone neutre, ainsi que la procédure du calcul self-consistent pour le calcul de l'intensité de cathodoluminescence font l'objet du troisième chapitre.

Les résultats obtenus dans cette étude sont présentés dans le quatrième chapitre, qui comporte les analyses des différentes courbes obtenues ainsi que les interprétations concernant le comportement de la largeur de la zone déplétée soumise à l'influence des différents paramètres, et également les résultats de l'étude de la dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec les différentes propriétés de surface et de volume, en plus de celles du faisceau incident.

Enfin le manuscrit est terminé par une conclusion générale, où sont regroupés les principaux résultats.

CHAPITRE I

LA CATHODOLUMINESCENCE DANS LES SEMICONDUCTEURS

I.1. Introduction

Le phénomène de cathodoluminescence se produit dans les matériaux présentant un gap (bande interdite) entre la bande de valence et la bande de conduction, c'est le cas des solides organiques minéraux et semiconducteurs.

Pour ces matériaux, un électron peut céder une partie de son énergie lors d'une collision avec un atome de la cible pour créer une paire électron trou par transit d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, créant localement une mise hors d'équilibre. La valeur minimale de l'énergie nécessaire pour créer un trou par impact électronique est environ trois fois celle du gap (elle est de l'ordre 5 eV pour CdTe).

Un électron ayant une énergie incidente de 20 keV peut créer un nombre de paires électron-trou de l'ordre de 10^3 à 10^4 cm^{-3} .

L'excitation crée le même nombre Δn et Δp d'électrons et de trous. Ces porteurs libres diffusent séparément, le retour à l'équilibre se fait par recombinaison des porteurs minoritaires Δn dans le matériau de type p. Les recombinaisons peuvent être radiatives (cathodoluminescence), ou non radiatives (émission Auger et émission de phonons).

I.2. Définition de la cathodoluminescence

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

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

I.3. Techniques de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence est une méthode de caractérisation non destructive, elle est applicable aux corps solides, minéraux ou organique et en particulier aux semiconducteurs, qui sont susceptibles d'émettre de la lumière dans le domaine visible et proche infra-rouge.

I. 4. Principe de la cathodoluminescence

Le mécanisme de cathodoluminescence peut être divisé en trois parties :

1) **L'excitation** : l'impact d'un faisceau d'électron sur un semiconducteur génère une grande quantité de paires électron-trou, créant localement une mise 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.

I. 5. Applications de la cathodoluminescence

La cathodoluminescence est un phénomène technologique très important qui, trouve ses applications dans un large domaine d'instruments modernes [5], par exemple les tubes à rayons cathodiques (CRT), les écrans d'affichage (monitor displays), les écrans fluorescents...

Cette technique, couplée à un microscope électronique à balayage, devient une technique très puissante, offrant une double caractérisation spectroscopique et spatiale des semiconducteurs[6], et permettant l'analyse et l'étude des propriétés optiques et électriques des matériaux à l'échelle microscopique.

Les applications de la cathodoluminescence concernent principalement les études de matériaux à gap direct III-V et II-IV [7], on peut citer dans ce contexte, à titre d'exemple, les défauts natifs (les joints et sous joints de grains, les macles, ...) dans ZnTe mis en évidence par cette méthode. L'évolution de ces défauts et l'influence de l'introduction de certaines impuretés au cours de recuit ont également été observées au MEB en mode cathodoluminescent.

Les dislocations, les inhomogénéités de dopage, ainsi que la position d'une jonction p-n ont été visualisées par ce genre d'observations. De plus la (CL) permet de suivre la dégradation des diodes électroluminescentes à base par exemple de GaAs et GaAlAs au cours de leur fonctionnement.

On distingue deux utilisations de la lumière de rayonnement cathodique :

- 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. Les précipités, les inclusions, les joints et sous joints de grain donnent lieu généralement à un fort contraste. La figure (I.1) représente une image correspondant aux différents défauts cristallins.

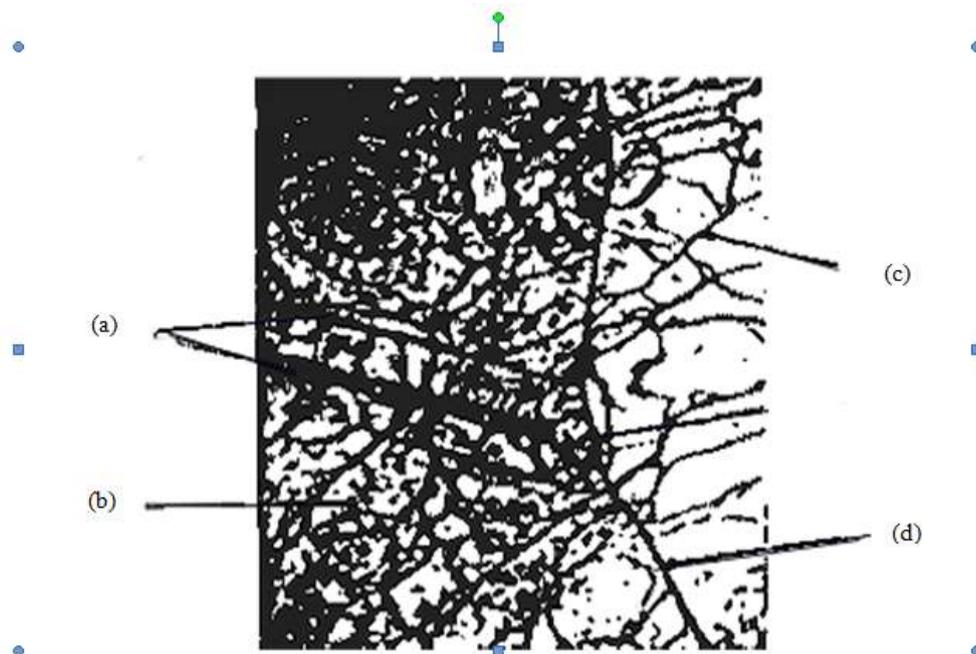


Fig. I.1 : Différents type de défauts cristallins dans CdTe, observés en cathodoluminescence [6].

(a) joint de macles, (b) dislocation, (c) sous joint de grain, (d) joint de grain.

b) Cathodoluminescence sélective

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 des impuretés ou défauts présents dans le semiconducteur.

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.

Le tableau suivant proposé par Smith [8] 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 de dislocations -Profil de diffusion
Variation de la CL en fonction du temps	-Densité des pièges -Temps de relaxation des porteurs

Tableau I.1 : Différentes applications de la CL pour caractériser les matériaux [8].

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

Les mécanismes permettant l'émission de la lumière dans un semiconducteur pour différentes formes de l'énergie d'excitation sont similaires.

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 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.

En plus, de la haute résolution spatiale, la CL permet d'obtenir des informations plus détaillées en profondeur en variant l'énergie d'accélération des électrons incidents.

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 [3].

D'un autre côté l'émission de la photoluminescence dépend fortement de l'énergie d'excitation (photons), qui peut fournir des informations supplémentaires importantes.

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.

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'électron. 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.

L'analyse quantitative de la CL est difficile, car elle n'est pas identifiée par une loi générale telle que celle utilisée par Moseley ($\nu \propto z^2$) pour les rayons X caractéristiques, où on peut relier la fréquence ν d'une raie au nombre atomique z [5].

La CL peut seulement renseigner sur les processus de l'émission radiative, les recombinaisons non radiatives peuvent être déduites par les images de CL, où le contraste entre les emplacements radiatifs et non radiatifs est suffisamment fort [3].

L'analyse quantitative de la CL est encore dans ses débuts à cause de l'absence d'une règle générale d'identification, et le manque d'une théorie quantitative universelle applicable, ce qui impose la limitation du développement de la CL comme technique d'analyse [5].

I.7. Le matériau CdTe

Parmi les matériaux semiconducteurs II-VI le tellure de cadmium (CdTe) est l'un des plus utilisés à cause de ses caractéristiques très importantes, et son utilisation dans différents domaines d'applications tels que :

- le domaine du visible, où CdTe est utilisé pour la fabrication de dispositifs électroluminescents et la fabrication des cellules solaires.
- le domaine de l'infra-rouge (IR) où CdTe est utilisé pour la fabrication de détecteurs de la lumière infra-rouge ou comme fenêtre à laser ou en télécommunication.
- le domaine de la détection nucléaire (détection des rayonnements X et γ).

I.7.1. Structure cristalline

Le composé CdTe peut cristalliser dans deux structures différentes :

- la structure cubique de type sphalérite.
- la structure hexagonale de type wurtzite.

La structure sphalérite est la plus stable à la pression atmosphérique, elle est constituée par deux mailles cubiques à faces centrées, où l'une est décalée 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 (Fig. I.2) :

$$*Cd \quad 0\ 0\ 0, 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$$

$$*Te \quad \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$$

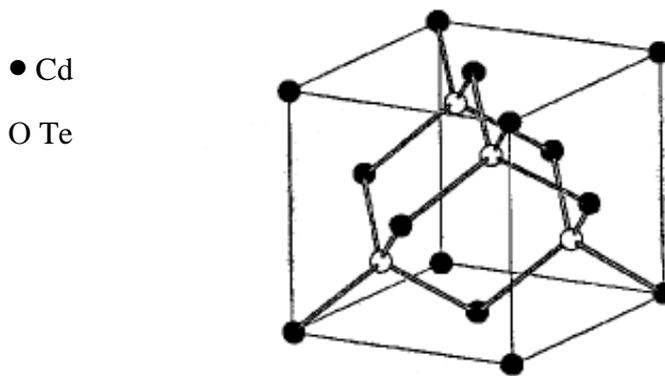


Fig. I.2 : Structure cristalline de CdTe

Chaque atome possède un entourage de quatre atomes de l'autre constituant, placés aux sommets d'un tétraèdre à une distance de $\frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a$ (a est le paramètre de la maille cubique, égale à 6.48Å° à la température ambiante).

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

I.7.2. Propriétés physiques

- CdTe possède une bande interdite directe de largeur ($E_g = 1.52$ eV à 300 K), elle varie en fonction de la température selon la formule empirique : $\frac{dE}{dT} = (2.3 \times 10^{-4} \text{ eV/K})$, la valeur 2.3 peut changer selon les auteurs et peut être égale à 5.0 ou 5.6 [9]. Ceci donne des propriétés optiques s'étendant dans le domaine de l'infra-rouge, et une efficacité radiative importante.

- Les deux types de conductivités électriques n et p peuvent être obtenues avec des niveaux de dopages différents. Le changement de type est possible lors des recuits thermiques [10].

- CdTe est un matériau plastique à la température ambiante et même à température plus basse [11].

- Possibilité de former des alliages ternaires très importants tels que :

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ et $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$.

- Caractère ionique élevé des liaisons de CdTe ; une des plus fortes ionicités des composés II-VI, de l'ordre de 72% [12].

Le tableau (I.2) donne quelques caractéristiques de CdTe à 300 K, importantes dans le cadre de notre étude. D'autres propriétés physiques sont données dans l'annexe I.

Caractéristique	Valeur	Référence
Largeur de la bande interdite E_g (eV)	1.52	[13]
Densité ρ (g/cm ³)	6.1	[13]
Energie de formation d'une paire (e-h) ϵ_{e-h} (eV)	4.90	[13]
Coefficient d'absorption α (cm ⁻¹)	10^4	[9]
Constante diélectrique relative ϵ_r	10.9	[9]
Concentration des porteurs intrinsèques n_i (cm ⁻³)	$6.9 \cdot 10^5$	[14]
Mobilité électronique μ_n (cm ² . V ⁻¹ .S ⁻¹)	1200	[14]
Mobilité des trous μ_p (cm ² . V ⁻¹ .S ⁻¹)	80	[14]
Densité d'états de surface N_t (cm ⁻²)	$10^4 - 10^{13}$	[15]

Tableau I.2 : Quelques caractéristiques de CdTe à 300 K.

CHAPITRE II

INTERACTION ELECTRON-MATIÈRE

II.1. Introduction

Quelques connaissances de base sur l'interaction des électrons avec la matière sont nécessaires pour avoir une meilleure compréhension des phénomènes physiques se produisant à l'intérieur du matériau.

Nous exposons donc, dans ce chapitre, le bilan des interactions électron -matière, les plus importantes se rapportant à notre étude, et qui sont, en l'occurrence, la perte d'énergie, la fonction de génération des paires (e-h), la pénétration des électrons, la fonction de dissipation d'énergie et la génération -recombinaison des paires (e-h).

II.2. Volume d'interaction électron-matière

L'enveloppe des trajectoires des électrons primaires pénétrant dans le matériau constitue la limite du volume d'interaction électron-matière. Ce volume n'a pu être visualisé que dans certains matériaux plastiques, où le bombardement électronique modifie la nature chimique du matériau, et le rend sensible à une attaque dans un solvant approprié [16].

En ce qui concerne la microscopie électronique à balayage, utilisé en mode cathodoluminescent ; elle est liée aux dimensions latérales du volume d'interaction, donc à l'énergie incidente (E_0), et à la longueur de diffusion des porteurs (L). Pratiquement dans les semiconducteurs, la résolution spatiale offerte par la cathodoluminescence est de l'ordre de quelques microns, et se dégrade lorsque l'énergie du faisceau augmente [17].

Le volume de génération prend différentes formes, selon le nombre atomique de la cible considérée, variant d'une poire pour un faible nombre atomique ($Z < 15$) à une forme sphérique pour ($15 < Z < 40$) à une forme hémisphérique pour ($Z > 40$) [5].

La figure (II.1) illustre la résolution spatiale de la microscopie électronique à balayage [6].

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

Le bombardement par faisceau d'électrons d'un semiconducteur donne naissance dans celui-ci à divers phénomènes (Fig. II.2) ; chaque phénomène est déterminé par sa probabilité de production, qui est décrite par une section efficace.

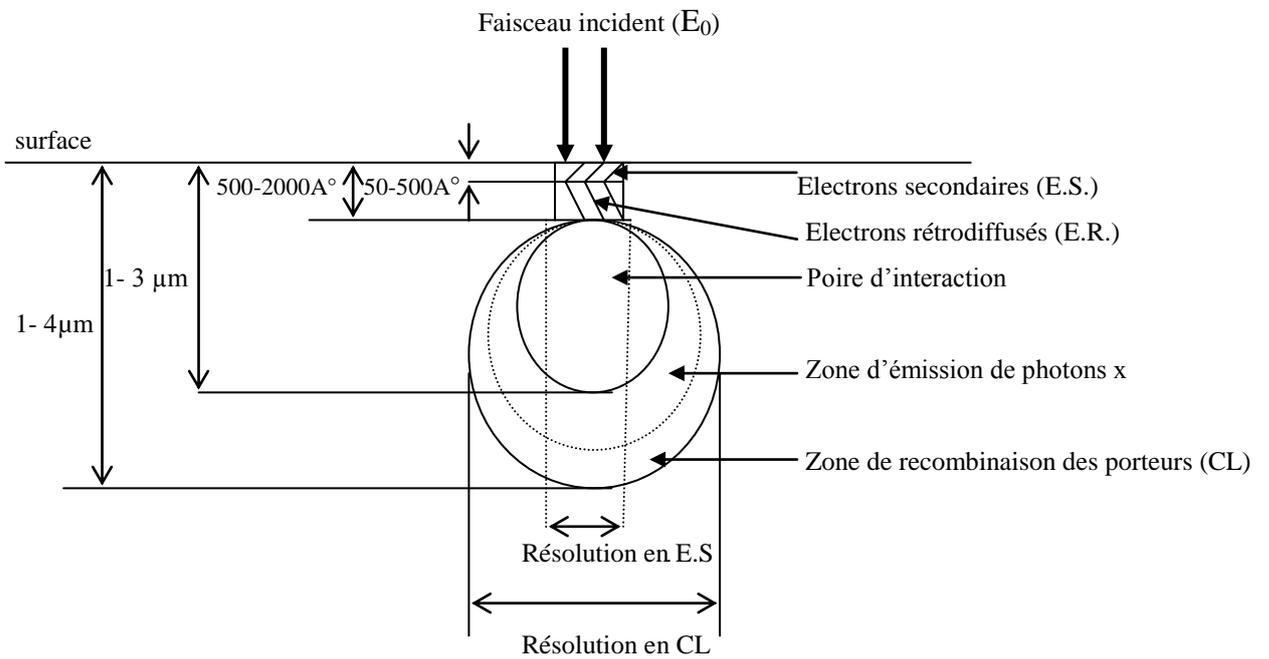


Fig. II.1 : Résolution spatiale de la microscopie électronique à balayage [6].

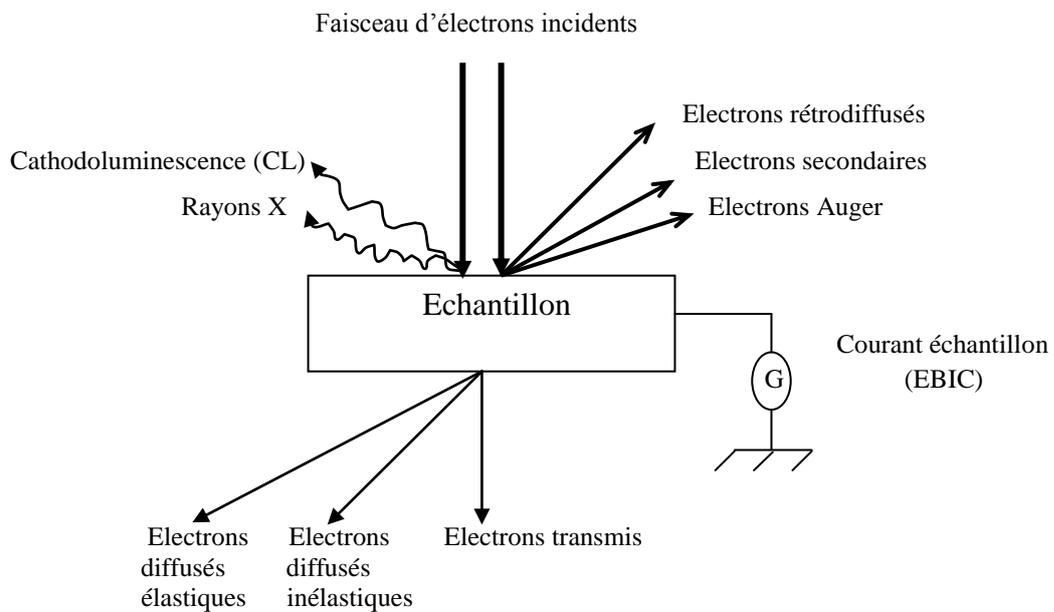


Fig. II.2 : Phénomènes d'interaction des électrons avec une cible semiconductrice.

a) Electrons secondaires

Ils sont produits au cours de collisions des électrons primaires avec les électrons de valence des atomes de la cible, ces électrons sont utilisés principalement pour obtenir un contraste topographique de la surface en microscope électronique à balayage (MEB).

b) Emission de rayons X caractéristiques

Les électrons incidents peuvent avoir une énergie suffisante pour arracher, les électrons les plus liés aux noyaux des atomes de la cible. Si un électron est arraché, les électrons des niveaux plus élevés vont transiter vers un niveau plus bas, cette transition peut libérer une énergie sous forme d'un photon X.

c) Cathodoluminescence

Le faisceau d'électrons peut céder une partie de son énergie aux atomes de la cible pour créer une paire électron-trou, par transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. L'excitation crée un certain nombre d'électrons et de trous ; ces porteurs libres diffusent séparément, et le retour à l'état d'équilibre se fait par recombinaison radiative (cathodoluminescence) ou non radiative (émission Auger et émission des phonons).

Les photons visibles sont utilisés pour caractériser les niveaux dans le gap en mode spectre ou en mode image filtrée (MEB et MEBT).

d) Courant induit

Les porteurs de charges créés par le faisceau d'électrons peuvent subir l'influence d'un champ électrique appliqué au semiconducteur. Ils peuvent être séparés par ce champ et générer un courant, Le courant EBIC (Electron Beam Induced Current) caractéristique des paramètres physiques du semiconducteur. Il permet de visualiser dans un semiconducteur les zones de recombinaison préférentielles de paires électron-trou (e-h), comme les défauts, qui affectent les propriétés électriques du matériau.

e) Electrons rétrodiffusés

Les électrons primaires peuvent être rétrodiffusés à la suite de quelques collisions élastiques ; ils ressortent de la cible avec ou sans perte d'énergie.

f) Les électrons transmis

Dans le cas d'un échantillon mince les électrons traversent la cible. Ces électrons peuvent diffuser élastiquement (avec perte d'énergie) ou inélastiquement (pas de perte d'énergie) avant d'avoir perdu toute leur énergie ; l'énergie de sortie est d'autant plus voisine de l'énergie incidente que l'épaisseur de la cible est plus faible.

g) Les électrons Auger

Ce sont des électrons émis à la suite de transitions Auger, après excitation de la cible. Ils ont également une énergie faible, mais caractéristique de la composition chimique des zones superficielles.

Tous ces processus conduisent à l'obtention d'informations pouvant être utilisés dans la caractérisation structurale, chimique, et la détermination des propriétés électroniques du matériau.

II.4. La diffusion élastique

La diffusion élastique, qui résulte de l'interaction de l'électron incident avec le noyau de l'atome, conduit à de fortes déviations de l'électron, sans perte d'énergie. Elle est en particulier, responsable des phénomènes de rétrodiffusion.

II.5. La diffusion inélastique

Les phénomènes de collisions successives, de changements progressifs de direction et de vitesses des électrons le long de leur parcours dans la cible, traduisent le transfert d'énergie de l'électron incident et ne produisent qu'une faible déviation de l'électron.

II.6. La perte d'énergie des électrons incidents

Les chocs inélastiques des électrons incidents avec les électrons des couches profondes et de valence des atomes, engendrent une perte d'énergie des électrons incidents au cours de leur trajectoire ; ce processus qui a lieu de façon discrète, peut être décrit de façon continue par la loi

de Bethe [3]. Cette loi traduit la perte d'énergie moyenne (dE) subie par un électron d'énergie (E) le long de l'élément de parcours (dS), elle est donnée par la loi de Bethe :

$$\frac{dE}{dS} = -2 \cdot \pi \cdot e^4 \cdot N_A \cdot \frac{Z\rho}{A \cdot Z} \ln \left(1.166 \frac{E}{J} \right) \quad (2.1)$$

Où on a :

ρ : la densité du matériau.

Z : le numéro atomique.

N_A : le nombre d'Avogadro.

A : la masse atomique.

e : la charge de l'électron.

J : le potentiel moyen d'ionisation, donné habituellement dans la littérature par l'expression suivante [18], utilisée pour un nombre atomique $Z > 25$:

$$J \text{ (eV)} = 11.5 Z \quad (2.2)$$

A partir de cette relation nous obtenons une valeur de $J=575$ eV pour le CdTe.

Une autre formule de potentiel J est donnée par Berger et Seltzer [19] :

$$J \text{ (keV)} = (9.76 Z + 58.5 Z^{-0.19}) 10^{-3} \quad (2.3)$$

II.7. Description d'une trajectoire électronique

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

II.7.1. Parcours électronique

A cause de la diffusion, la trajectoire d'un électron peut être schématisée par une ligne brisée, dont les segments de droite d'inégales longueurs représentent le libre parcours entre deux collisions.

La longueur de chaque segment et l'angle entre deux segments consécutifs dépendent de la nature de la cible, du type de collision et de l'énergie de l'électron à l'instant du choc. Etant donné le caractère aléatoire de la diffusion, deux trajectoires n'ont qu'une faible possibilité d'être identiques.

Il existe trois possibilités d'avenir pour un électron atteignant une cible avec une énergie E_0 :

- Electron absorbé : sa trajectoire est complètement contenue dans la cible, son énergie finale E_f est celle de l'électron en équilibre thermique.
- Electron rétrodiffusé : après quelques collisions élastiques ; il ressort de la cible avec une énergie ($E_0 > E > E_f$).
- Electron transmis : pour le cas d'un échantillon mince l'électron traverse la cible avant d'avoir perdu toute son énergie ; l'énergie de sortie est plus voisine de E_0 ($E \approx E_0$).

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.

Pour déterminer le parcours électronique, on inverse puis on intègre la perte d'énergie de Bethe (2.1) entre les valeurs limites de l'énergie ($E_0, 0$). On obtient le parcours de Bethe [20].

$$R_B (cm) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dS}\right)} \quad (2.4)$$

On peut utiliser la profondeur massique (masse-range) de Bethe notée (ρR_B) qui est une grandeur plus significative que R_B :

$$\rho R_B (g/cm^2) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/d(\rho S)} \quad (2.5)$$

Où ρ est la masse volumique du matériau en (g/cm^3).

Plusieurs définitions de la profondeur de pénétration sont données par de nombreux auteurs sous la forme générale donnée par [5] :

$$R = \left(\frac{K}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad (2.6)$$

K et α sont des constantes dépendant du numéro atomique du matériau et de l'énergie des électrons incidents.

ρ est la densité du matériau et E_0 est 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 [21].

Nous donnons dans ce qui suit quelques résultats de la littérature.

- **Grüen** trouve l'expression de R 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 [22] :

$$R_G(\mu g / cm^2) = 4.57 E_0^{1.75} \quad (2.7)$$

E_0 est exprimée en keV.

- **Everhart et Hoff** ont proposé une expression du parcours obtenue à partir d'une étude de la génération des paires électron- trou dans le silicium, elle a la forme suivante [23] :

$$R(\mu g/cm^2) = 3.98 E_0^{1.75} \quad (2.8)$$

E_0 est mesurée en keV.

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

- **Kyser** a proposé l'expression du parcours électronique, en utilisant une étude sur l'émission X dans le cuivre. Son expression est donnée par [21] :

$$R(mg / cm^2) = 2.56 \left(\frac{E_0}{30}\right)^{1.68} \quad (2.9)$$

E_0 est mesurée en keV.

- **Kanaya et Okayama** donnent le parcours électronique par [20] :

$$R(\mu\text{g}/\text{cm}^2) = 276.10^{-6} \frac{A}{Z^{0.889}} E_0^{1.67} \quad (2.10)$$

où on a :

A : la masse atomique en (g/mole).

Z : le nombre atomique.

E_0 est l'énergie incidente exprimée en keV.

Cette relation est valable pour des énergies d'incidences comprises entre 10 et 1000 keV, et pour un large domaine de numéro atomique Z.

La figure (II.3) montre une comparaison entre le parcours obtenu par le modèle d'Everhart et Hoff et de Kanaya et Okayama.

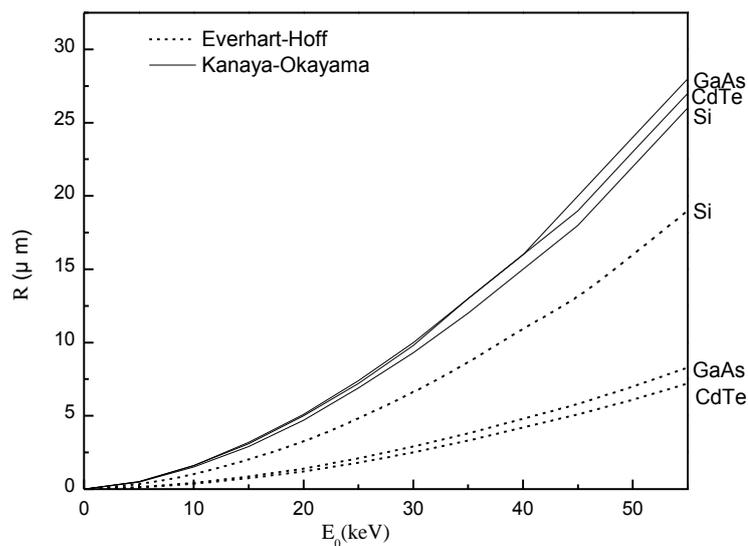


Fig. II.3 : Variations des parcours électroniques (R) en fonction de l'énergie incidente (E_0), dans Si, GaAs et CdTe, calculée selon les modèles de Kanaya-Okayama relation (2.10) et Everhart-Hoff relation (2.8).

II.7.2. Création de paires électron-trou par un faisceau électronique

II.7.2.1. Energie de création de paires électron-trou

Un faisceau de particules (électrons, particules nucléaires, ...) de haute énergie ($E_0 > E_g$, E_g : énergie du gap) perd son énergie dans un semiconducteur en produisant des paires (e-h) et des phonons.

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

$$\varepsilon_{e-h} = \frac{E_A}{N} \quad (2.11)$$

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

La formule de ε_{e-h} donnée par Klein [2] s'écrit sous la forme :

$$\varepsilon_{e-h} = E_g + \bar{E}_R + \bar{E}_K \quad (2.12)$$

E_g : l'énergie de la bande interdite du semiconducteur.

\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.

Klein a lié l'énergie moyenne due aux vibrations du réseau (\bar{E}_R) à l'énergie du gap (E_g) par l'équation [24] :

$$\bar{E}_K = \frac{9}{5} E_g \quad (2.13)$$

Shockley [25] a écrit la perte d'énergie moyenne pour la génération de phonons optiques (\bar{E}_R) comme une fonction de quantum de Raman ($\hbar\omega_R$) qui s'écrit sous la forme :

$$\bar{E}_R = r\hbar\omega_R \quad (2.14)$$

r est le nombre moyen de phonons optiques générés par paire électron-trou.

$\hbar\omega_R$: le quantum de Raman.

En introduisant (2.13) et (2.14) dans (2.12) on aura :

$$\varepsilon_{e-h} = \frac{14}{5} E_g + r\hbar\omega_R \quad (2.15)$$

En théorie ε_{e-h} est indépendante de la nature des particules ionisantes et de leur énergie [5].

La figure (II.4) illustre la dépendance de l'énergie ε_{e-h} en fonction de l'énergie du gap E_g [3].

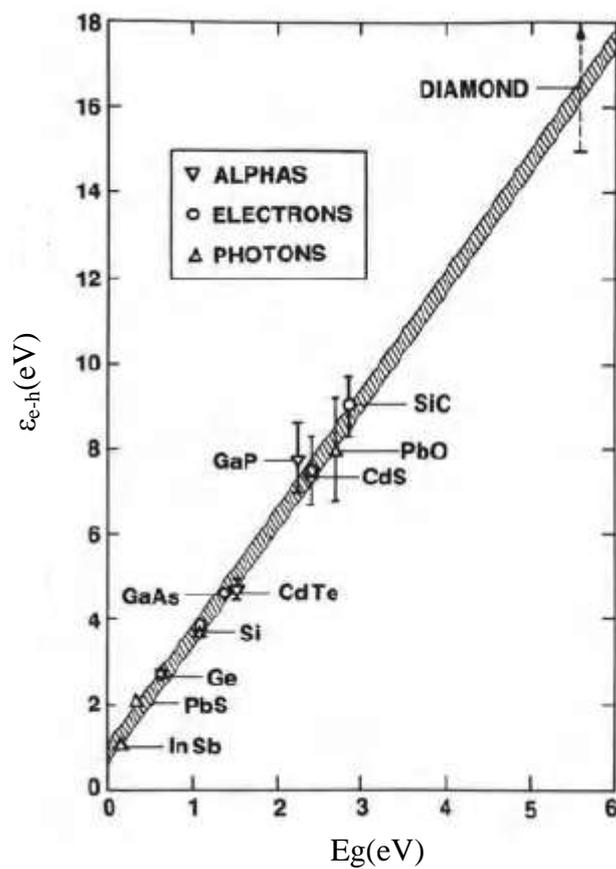


Fig. II.4 : Variation de l'énergie de génération de paires électron-trou ε_{e-h} avec l'énergie du gap E_g pour différentes sources d'irradiation [3].

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

Un faisceau d'électrons d'énergie incidente E_0 , cède une quantité d'énergie au matériau semiconducteur donnée par :

$$E_{eff} = N_0 E_0 (1 - f) \quad (2.16)$$

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.

E_{eff} est l'énergie à utiliser pour créer des porteurs libres dans le semiconducteur, cette création est caractérisée par un paramètre g' ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) mesurant le nombre de porteurs créés par unité de volume et unité de temps.

Ce paramètre résulte de deux types de génération, le premier est appelé la génération spontanée de porteurs ; due à l'agitation thermique, que caractérise un taux de génération thermique g_{th} , le deuxième est la génération due à l'excitation du semiconducteur par des sources extérieures, l'excitation optique, l'irradiation par des particules,... . Ce type est spécifique du processus, il est caractérisé par un paramètre g .

On peut écrire donc :

$$g' = g_{th} + g \quad (2.17)$$

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

$$N' = \frac{N_0 E_0}{\varepsilon_{e-h}} (1 - f) \quad (2.18)$$

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 projection $g(z)$ sur un plan xy par exemple, c'est le cas lorsqu'on a une symétrie autour du faisceau incident, on écrit donc :

$$g(z) = \int_{x,y} g(x, y, z).dx.dy \quad (2.19)$$

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

$$g(z) = \frac{I_P}{q \varepsilon_{e-h}} \cdot \frac{dE_A}{dz} \quad (2.20)$$

Où I_P est l'intensité du faisceau primaire, q la charge élémentaire, E_A l'énergie absorbée par le semiconducteur à la profondeur z .

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

$$G_0 = \int_0^{\infty} g(z)dz \quad (2.21)$$

Soit, compte tenu de l'équation (2.18) :

$$G_0 = \frac{I_P}{q} \cdot \frac{(1-f)E_0}{\varepsilon_{e-h}} \quad (2.22)$$

II.8. Fonction de dissipation d'énergie normalisée

On peut décrire la variation de la perte d'énergie d'un faisceau d'électrons pénétrant dans le matériau, par une fonction dite fonction de dissipation d'énergie $\phi(u)$, donnée par l'expression suivante :

$$\phi(u) = \frac{d\left(\frac{E_A}{E_0}\right)}{du} \quad (2.23)$$

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

Z : la profondeur.

R : la profondeur de pénétration.

E_A : l'énergie absorbée en fin du parcours et qui s'écrit [20] :

$$E_A = E_0 - \eta_T E - \eta_B \bar{E}_B \quad (2.24)$$

où on a :

E : l'énergie des électrons transmis, η_T : la fraction des électrons transmis, \bar{E}_B l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés et η_B : 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 [26] :

$$\frac{\bar{E}_B}{E_0} = 0.5(1 + \eta_B) \quad (2.25)$$

où η_B est donné par Neubert et al [27] :

$$\eta_B(Z, E_0) = F_1 \left[1 + F_2(Z) \ln \frac{E_0}{20} \right] \quad (2.26)$$

où :

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

$$F_2(Z) = 0.2043 - 0.6543 Z^{-0.3}$$

Le coefficient de rétrodiffusion d'un alliage homogène se calcule à partir des concentrations massiques C_i des divers constituants [28] :

$$\eta_{Ball} = \sum_i C_i \eta_{Bi} \quad (2.27)$$

La figure (II.5) illustre la variation du coefficient de rétrodiffusion de CdTe en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons incidents, calculée à partir de la relation (2.26).

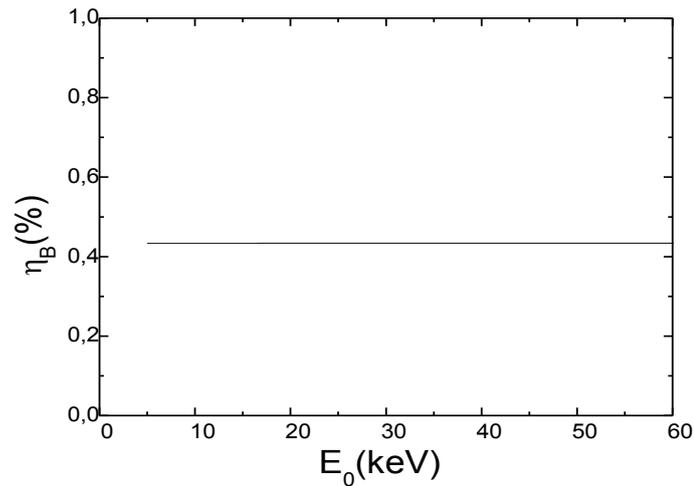


Fig. II.5 : Variation du coefficient de rétrodiffusion η_B en fonction de l'énergie du faisceau incident (E_0) pour CdTe.

Plusieurs modèles de fonction de dissipation d'énergie ont été obtenus par différents auteurs, parmi ces modèles on trouve essentiellement :

- **Modèle d'Everhart-Hoff** : il propose une expression analytique polynomiale de la fonction $\phi(u)$ [23] :

$$\phi(u) = (1 - f)\lambda(u) \quad (2.28)$$

avec : $f = \eta_B \frac{\bar{E}_B}{E_0}$ (2.29)

f est la fraction d'énergie rétrodiffusée des électrons incidents.

u est la pénétration réduite et normalisée du parcours d'Everhat-Hoff.

$\lambda(u)$ est une fonction qui s'écrit sous la forme polynomiale :

$$\lambda(u) = 0.6 + 6.21 u - 12.4 u^2 + 5.69 u^3 \quad (2.30)$$

- Modèle de Kanaya et Okayama

La fonction de dissipation $\Phi(u = \frac{Z}{R})$ obtenue par Kanaya et Okayama est donnée par [20] :

$$\phi(u) = \frac{1}{(1-u)^{2/5}} \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5} \right) \exp \left[- \left(\frac{\gamma \cdot u}{1-u} \right) \right] + \left[\frac{1}{2^{5/6}} - (1-u)^{5/6} \right] \left[\frac{E_B}{E_0} \cdot \frac{61,9}{5} \cdot \frac{\gamma}{(1-u)^2} \right] \exp \left(- \frac{1,9 \gamma u}{1-u} \right) \quad (2.31)$$

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

Z est le nombre 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 [9].

- Modèle de Wittry et Kyser

Wittry et Kyser (1967) ont proposé une approximation de la fonction de dissipation d'énergie à partir d'une étude de la cathodoluminescence dans le matériau GaAs.

Kyser (1972) apporte une modification à cette fonction par l'introduction d'un autre terme en exponentiel grâce à une étude de l'émission X dans une cible de cuivre.

La forme finale de la gaussienne modifiée qui est proposée est donnée alors par l'expression [29] :

$$\phi(u) = A \cdot \exp \left[- \left(\frac{u-u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \cdot \exp \left(- \frac{b \cdot u}{u_0} \right) \quad (2.32)$$

où A et B sont des constantes, les constantes ($\Delta u=0.35$, $u_0=0.125$, $B/A=0.4$ et $b=4$) ont été utilisées par Wu et Wittry pour le cas de GaAs.

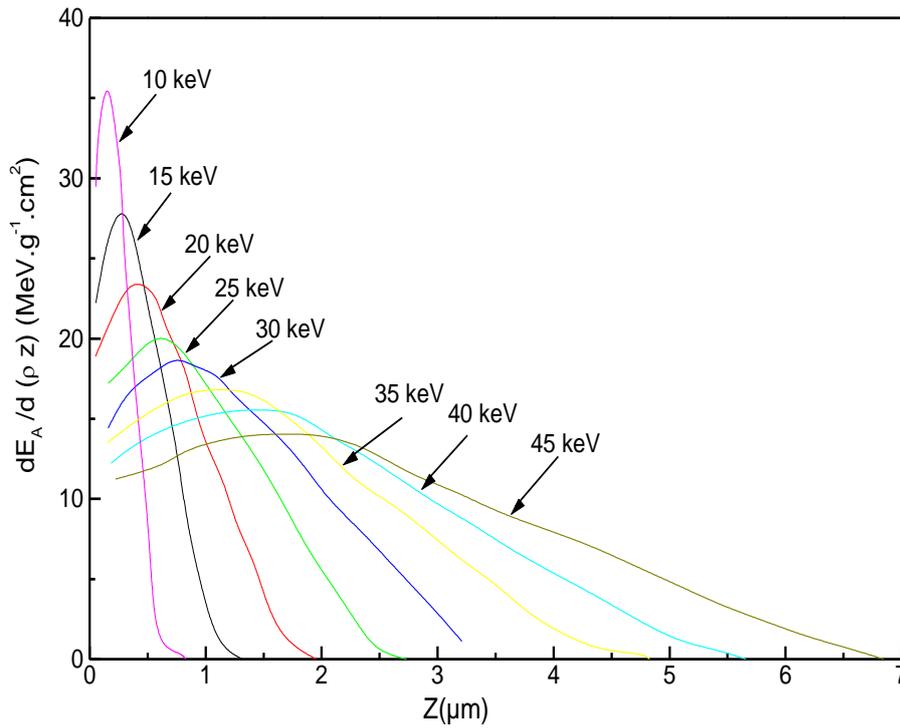


Fig. II.6 : Courbe de dissipation d'énergie en fonction de la profondeur, calculée pour CdTe d'après le modèle de Kanaya et Okayama [9].

II.9. Transitions électroniques dans les semiconducteurs

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, avant de se recombiner est donnée par :

* Pour les électrons :
$$L_n = (D_n \tau_n)^{1/2} \quad (2.33a)$$

* Pour les trous :
$$L_p = (D_p \tau_p)^{1/2} \quad (2.33b)$$

D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous respectivement

On caractérise la recombinaison des porteurs par un paramètre r' , qui mesure le nombre de porteurs qui disparaissent par unité de volume et unité de temps ($\text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$). Le bilan de la recombinaison r' et la génération thermique g_{th} qui est spécifique du matériau est représenté par un paramètre, appelé taux de recombinaison r :

$$r = r' - g_{\text{th}} \quad (2.34)$$

II.9.1. Recombinaisons radiatives

Le retour à l'état d'équilibre du matériau se fait recombinaison de l'électron avec le trou, de façon directe ou indirecte.

i) Transition directe

Dans ce cas le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au même vecteur d'onde k . (Fig. II.7a).

La recombinaison (verticale) directe de l'électron et du trou se fait avec émission d'un photon d'énergie $h\nu \approx E_g$ où E_g , est l'énergie du gap directe du semiconducteur considéré.

2i) Transition indirecte

Pour les matériaux à gap indirect (Fig. II.7b), la transition n'est plus verticale, et la différence du moment cinétique entre les deux états ne peut pas être prise en compte par le photon, et pour satisfaire le principe de conservation des quantités de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, le " phonon " de vecteur d'onde k_1 .

La figure (II.8) montre les différentes transitions radiatives possibles.

On distingue généralement la lumière intrinsèque correspondant à la transition bande à bande ou fondamentale, ne faisant intervenir que les propriétés du semiconducteur parfait, de la luminescence extrinsèque relative aux impuretés et défauts (exciton lié à un donneur ou un accepteur, transition bande-niveau et transition de paires donneur-accepteur) [30].

a/ Cas de la luminescence intrinsèque

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

$$r' = k.n.p \quad (2.35)$$

En tenant compte de la relation (2.34) on obtient:

$$r = k.n.p - g_{th} \quad (2.36)$$

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

$$r = 0, \quad n = n_0, \quad p = p_0.$$

où n et p sont les concentrations des électrons et des trous respectivement.

Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$r = k.(n.p - n_i^2) \quad (2.37)$$

n_i est la concentration de porteurs intrinsèques.

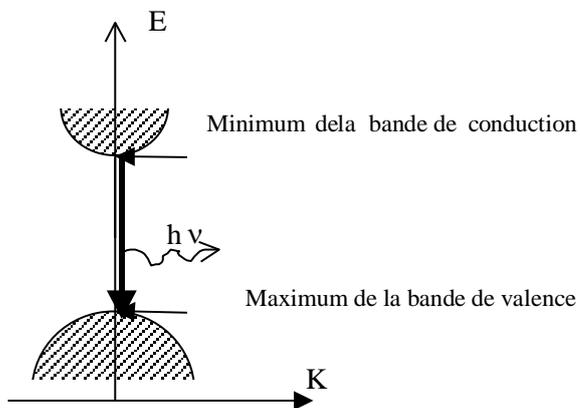


Fig. II.7a : Transition directe

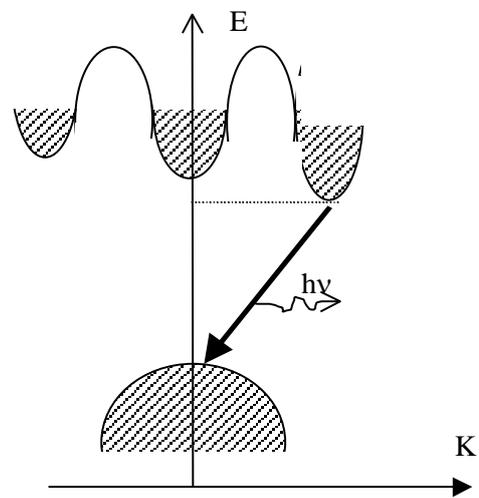


Fig. II.7b : Transition indirecte

Fig. II.7 : Transitions électroniques dans les semiconducteurs.

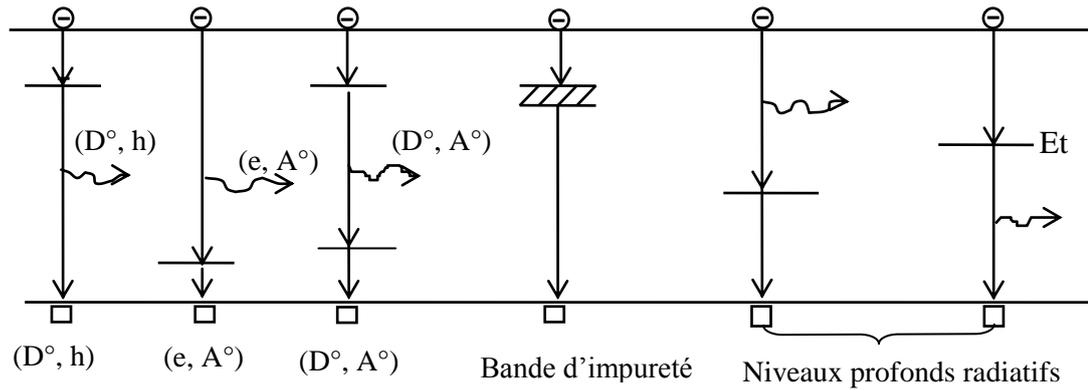


Fig. II.8 : Transitions radiatives à partir de niveau d'impureté dans le gap [17].

En régime hors équilibre ($n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta p$, $\Delta n = \Delta p$) ; où Δn et Δp représentent respectivement l'excès d'électrons et de trous créés par excitation. L'expression de r devient :

$$r = \frac{\Delta n}{\tau(\Delta n)} = \frac{\Delta p}{\tau(\Delta p)} \quad (2.38)$$

Avec :
$$\tau(\Delta p) = \frac{1}{k(n_0 + p_0 + \Delta p)} \quad (2.39)$$

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

b/ Cas de la luminescence extrinsèque

La luminescence pour les semiconducteurs contenant des impuretés est liée à celle-ci ; car elles jouent un rôle non négligeable dans le processus de recombinaison, et sont considérées comme des centres de piégeages ou de recombinaison des porteurs.

Nous nous limiterons ici aux centres de recombinaison. Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres fait l'objet de la théorie de Shockley-Read-Hall, qu'on peut résumer de la sorte :

Soit (N_t) la densité de centre de recombinaison, (E_t) le niveau d'énergie qu'ils introduisent dans le gap, et (f) la probabilité d'occupation de ce niveau.

A l'équilibre thermodynamique, la probabilité d'occupation du niveau (E_t) par un électron est donnée par [31] :

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp[(E_t - E_F)/KT]} \quad (2.40)$$

Une excitation extérieure crée des paires électron-trou, et le centre de recombinaison est le siège de la recombinaison des paires (e-h). La probabilité d'occupation du centre s'écrit [32] :

$$f = \frac{c_n \cdot n + c_p \cdot n_i \cdot \exp[-(E_t - E_{Fi})/KT]}{c_n (n + n_i \cdot \exp[(E_t - E_{Fi})/KT]) + c_p (p + n_i \exp[-(E_t - E_{Fi})/KT])} \quad (2.41)$$

Le taux de recombinaisons sera alors donné par l'expression :

$$r = c_n c_p N_t \frac{np - n_i^2}{c_n (n + n_i \exp[(E_t - E_{Fi})/KT]) + c_p (p + n_i \exp[-(E_t - E_{Fi})/KT])} \quad (2.42)$$

E_{Fi} est le niveau de Fermi intrinsèque.

C_n, C_p sont respectivement les coefficients de capture des électrons et des trous.

II.9.2. Recombinaisons non radiatives

Les transitions non radiatives sont représentées dans la figure (II.9). Les mécanismes Auger qui impliquent simultanément plusieurs porteurs libres sont essentiellement non radiatifs, et se produisent surtout pour de forts dopages [17]. La luminescence est généralement atténuée par les défauts, tels que les précipités, qui perturbent fortement la périodicité du réseau, les dislocations et les joints de grains sont sans doute intrinsèquement non radiatifs, mais la ségrégation d'impuretés radiatives souvent associées peut être responsable à leur voisinage de l'augmentation de la luminescence.

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

II.9.3. Recombinaisons excitoniques

L'interaction coulombienne d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence peut donner naissance à une "quasi-particule" liée, nommée exciton [6].

A basse température, ces excitons, sont libres de se déplacer dans le cristal (excitons libres), mais peuvent également être piégés sur les impuretés (excitons liés aux impuretés). Les recombinaisons d'excitons sont à l'origine de transitions radiatives très fines qui dominent la luminescence.

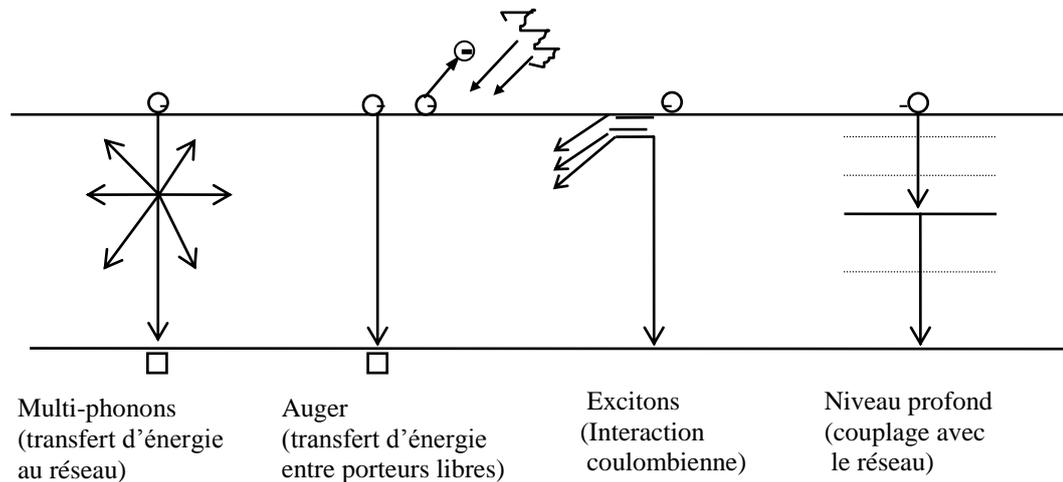


Fig. II .9 : Transitions non radiatives dans les semiconducteurs [17].

II.10. Propriétés de surface des semiconducteurs

II.10.1. Les états de surface

Tout solide est terminé par une surface qui délimite son volume. Le rôle de cette surface est primordial puisqu'il régit les interactions du milieu environnant avec le solide.

La surface d'un solide est un cas particulier de l'interface du solide avec le vide. Cette surface présente un arrangement du motif perturbé par rapport à l'arrangement périodique situé dans le volume. Les propriétés physiques de la surface sont fortement modifiées, comparées aux propriétés du volume ; cette modification concerne la structure cristallographique et la structure électronique. La surface des semiconducteurs est caractérisée par des états, appelée 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 courant sont les atomes d'oxygène qui entraînent une oxydation de la surface du semiconducteur [32]

En l'absence des états de surface, le diagramme énergétique est représenté par la figure (II.10a).

Au voisinage de la surface la bande de conduction et de valence sont courbées vers le bas, ainsi que le niveau de Fermi, le gap restant évidemment constant (Fig. II.10 b). La courbure des bandes montre qu'il existe une différence de potentiel entre la surface et le volume appelée potentiel de surface.

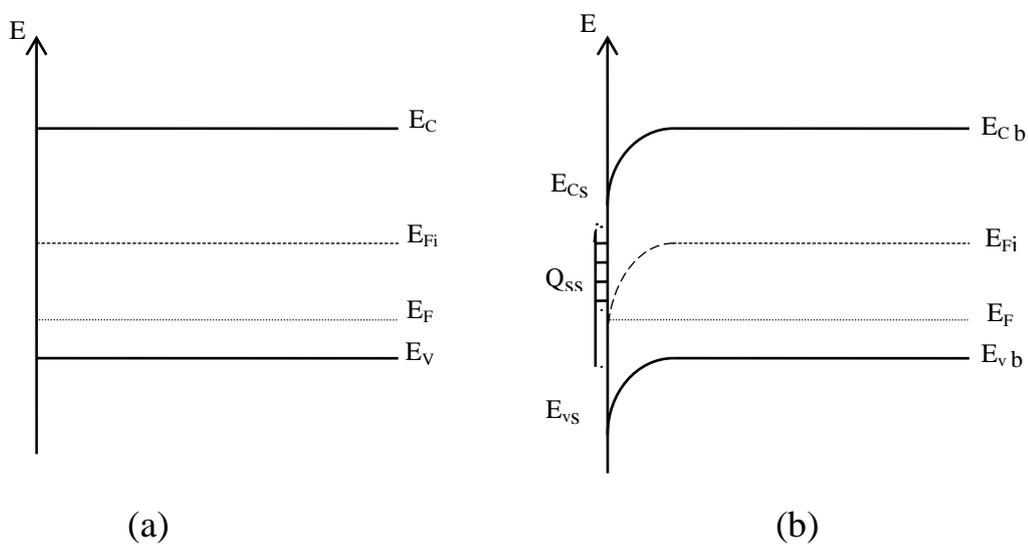
L'état électronique de la surface dépend de la densité des états de surface, de leur type et de leur position énergétique dans la bande interdite. Le nombre et la nature dépendent du traitement de la surface du cristal (polissage, revêtement, ...), et des conditions extérieures (composition de l'atmosphère, température, ...) [33].

II.10.2. La vitesse de recombinaison en surface

La recombinaison en surface est caractérisée en plus du taux de recombinaison, par une quantité appelée la vitesse de recombinaison, qui a un effet sur la variation de l'intensité émise par un échantillon. Pour tenir compte de son influence, il suffit de résoudre l'équation de continuité à trois dimensions, et d'introduire une condition aux limites supplémentaires qui s'exprime pour un semiconducteur de type p par [34] :

$$D_n \cdot \left. \frac{\partial (\Delta n(x, y, z))}{\partial z} \right|_{z=0} = s \cdot \Delta n(x, y, z) \Big|_{z=0} \quad (2.43)$$

où Δn est la concentration des électrons en excès en surface, z e la profondeur, et s la vitesse de recombinaison en surface (cm/s), qui est souvent exprimée sous la forme réduite ($S=s/v_d$), $v_d=L_n/\tau_n$ est la vitesse de diffusion des porteurs.



E_{Vb}, E_{Cb} : énergies de la bande de valence et de conduction du volume du semiconducteur.
 E_{Vs}, E_{Cs} : énergies de la bande de valence et de conduction de la surface du semiconducteur.
 E_{Fi}, E_F : énergies du niveau intrinsèque et pseudo niveau de Fermi .

Fig. II.10: Diagramme des bandes d'énergie d'un semiconducteur de type p [31].

(a) absence d'états de surfaces.

(b) présence d'états de surfaces de type donneurs (charge de surface Q_{ss} positive).

CHAPITRE III

MODELISATION DE L'INTENSITE DE CATHODOLUMINESCENCE

III.1. Introduction

Les défauts de surface dans les matériaux semiconducteurs dus, en particulier à la rupture de la périodicité du réseau cristallin, ont une charge électrique [35].

Les états électroniques de la surface d'un cristal agissent considérablement sur les propriétés des matériaux [36], la corrélation entre l'intensité de cathodoluminescence I_{CL} et les propriétés de surface a été interprétée en introduisant la notion de (dead layer), qui est une zone de surface sans recombinaisons radiatives, afin d'ajuster les mesure de CL avec la théorie de Wittry et Kyser [37]. Il manque ainsi une description détaillée, en particulier, la relation entre la largeur de cette zone et les caractéristiques du faisceau incident (énergie E_0 , intensité de courant I_p) [38].

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

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

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

A l'aide d'un programme de simulation, nous traçons les courbes calculées, et présentons l'influence des paramètres physiques de surface (Z_d , E_t , N_t) ou de volume (L_n , α_b) sur le comportement de l'intensité de cathodoluminescence (I_{CL}) en fonction des paramètres du faisceau (E_0 , I_p). Z_d représente la largeur de la région déplétée, E_t le niveau d'énergie des défauts de surface et N_t la concentration de ces défauts, L_n la longueur de diffusion des électrons dans la zone neutre p et α_b le coefficient d'absorption du matériau.

III.2. Les bases physiques du modèle

Dans ce paragraphe nous décrivons les bases physiques du modèle proposé, ainsi que les approximations et les suppositions de l'analyse que nous utiliserons dans le calcul :

- L'échantillon considéré est le tellure de cadmium de type p.
- La forme analytique de la fonction de génération choisie est celle proposée par Wu et Wittry [29], c'est une gaussienne modifiée de variance $(\Delta Z)^2$, centrée en Z_0 à partir de la surface (Fig. III.1). A, B, b sont des constantes, le rapport B/A est connu (ces paramètres seront explicités ultérieurement). 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'électron incident est normal à la surface, ce qui provoque une résolution symétrique autour de l'axe du faisceau incident.
- La profondeur de pénétration R des électrons a été calculée d'après le modèle de Kanaya et Okayama (relation 2.10) [20].
- Les défauts pris en compte sont les défauts de surface possédant un niveau énergétique unique E_t , de densité N_t , et de charge Q . Ce niveau est situé, en générale pour un semiconducteur de type p au-dessus du niveau de Fermi intrinsèque E_i .
- La recombinaison des porteurs en surface est non radiative, elle est telle que la probabilité d'occupation d'un niveau énergétique E_t soit contrôlée par le mécanisme de Shockley-Read-Hall pour les conditions de non-équilibre.
- Les sections 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 semi-infini et séparé en deux régions (Fig. III.1), que nous traitons séparément dans le calcul, la région déplétée et la région neutre. Dans la région déplétée, on suppose que la recombinaison des porteurs en excès, ainsi que la diffusion des porteurs est négligeable, dans la région 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.

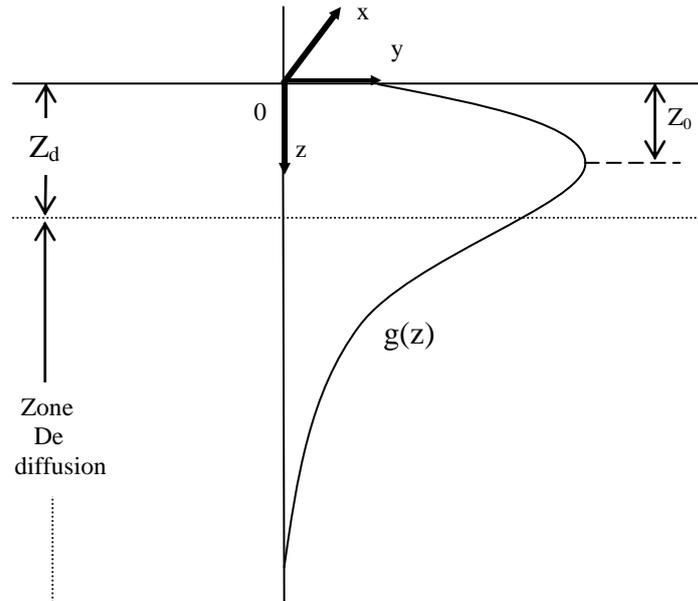


Fig. III. 1 : Configuration utilisée pour notre modèle. L'origine du référentiel est fixée en haut de la zone déserte, de largeur Z_d . La zone de diffusion est semi-infinie, $g(z)$ est la fonction de perte d'énergie.

III.3. Analyse de la surface libre du semiconducteur

La compréhension des propriétés électroniques de surface libre d'un semiconducteur est nécessaire pour une étude plus précise des paramètres physiques caractérisant cette surface.

On considère un matériau semiconducteur de CdTe de type p, avec une concentration d'accepteurs (N_a), et une densité de défauts de surface (N_t) ayant un niveau d'énergie (E_t). L'existence d'une région déplétée de largeur Z_d , donne une barrière énergétique d'une hauteur (E_b) entre la surface et le volume.

On explique l'apparition d'une région déplétée en surface comme suit : pour un semiconducteur de type p, les états de surface pleins agissent tant que donneurs, qui peuvent se vider et donner leurs électrons au volume du semiconducteur [39], et par conséquent modifier les concentrations des porteurs dans les bandes permises. Le transfert d'un nombre convenable d'électrons et de trous entre les densités d'états de volume et de la surface est nécessaire, cela se traduit par l'existence d'une charge électrostatique de surface exactement compensée par une charge égale et opposée dans le volume. Comme la densité de charges libres est très faible vis-à-vis du nombre d'atomes, la charge superficielle est compensée par une région de charge d'espace [40].

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

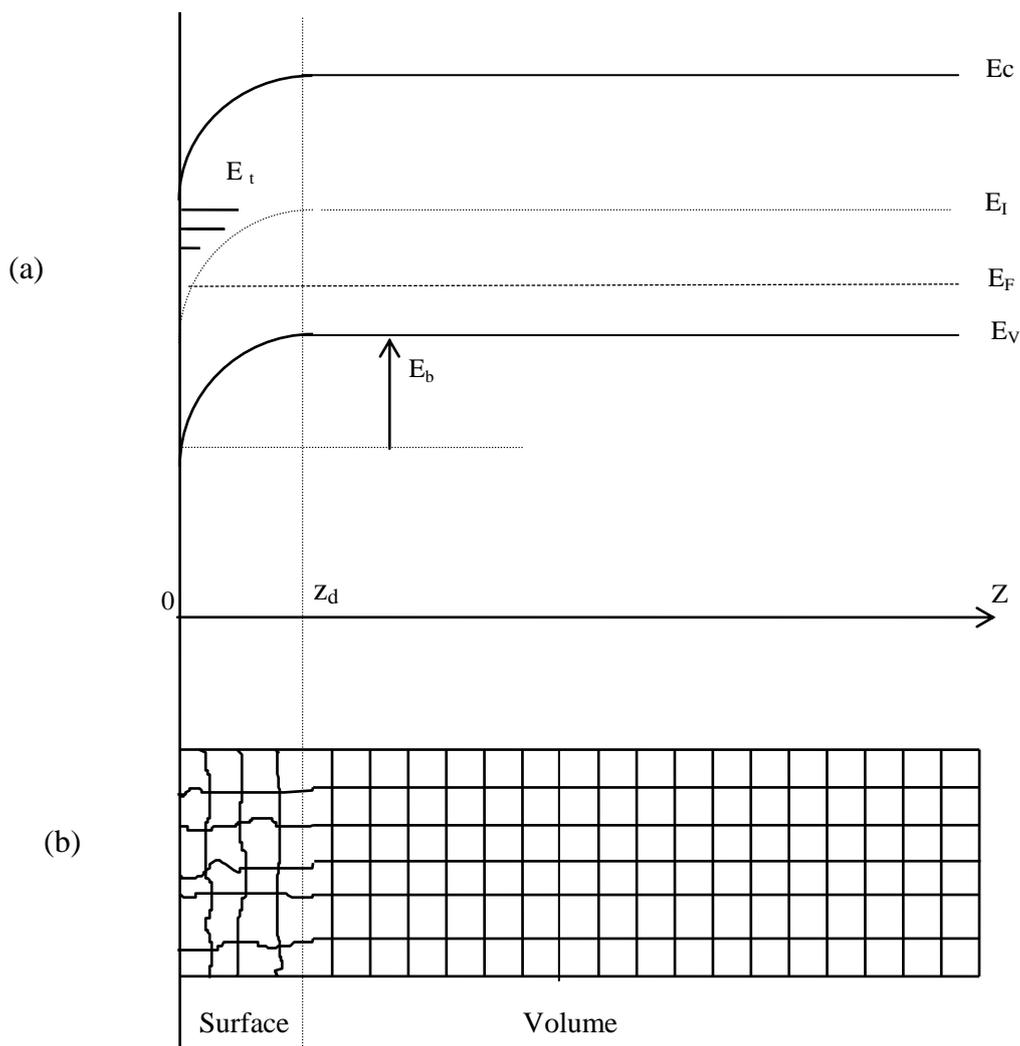


Fig. III.2: (a) Illustration de la courbure de bandes énergétiques en surface due aux états de surface chargés, pour un semiconducteur de type p.
 (b) Perturbation de l'arrangement périodique entre la surface et le volume.

La charge absolue (Q) qui s'accumule à la surface a pour Expression [41] :

$$Q = e.N_a.Z_d = e.N_t.(1-f) \quad (3.1)$$

A partir de cette relation on peut déduire la largeur de la région déplétée :

$$Z_d = \frac{N_t(1-f)}{N_a} \quad (3.2)$$

f étant la probabilité d'occupation du niveau d'énergie des donneurs, elle est donnée par l'expression suivante [42] :

$$f = \frac{\Delta n(0) + n_0 + n_i \cdot \exp\left(\frac{E_i - E_t}{KT}\right)}{\Delta n(0) + n_0 + \Delta p(0) + p_0 + 2n_i \cdot \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{KT}\right)} \quad (3.3)$$

où on a :

$\Delta n(0)$ 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 de trous à la surface dont les expressions sont données par :

$$n_0 = \frac{n_i^2}{N_a} \cdot \exp(E_b/KT) \quad (3.4a)$$

$$p_0 = N_a \cdot \exp(-E_b / KT) \quad (3.4 b)$$

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

$$E_b = \frac{e.N_a.Z_d^2}{2.\epsilon} \quad (3.5)$$

La figure (III.3) représente la variation de la probabilité d'occupation en fonction du niveau d'énergie associé aux défauts de surface.

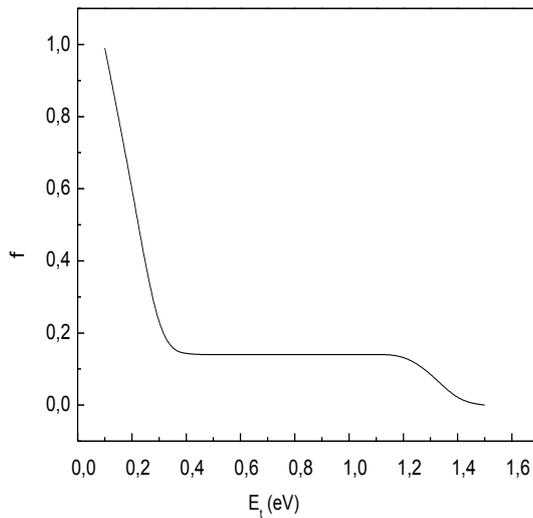


Fig. III.3: Probabilité d'occupation f en fonction du niveau des défauts E_t .

III.4. Equations de transport des porteurs de charges

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

III.4.1. L'équation de continuité

L'équation de continuité traduit le bilan de charges au cours du temps et gouverne leur distribution, son expression s'écrit, à trois dimensions, sous la forme :

- pour les électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (3.6a)$$

- pour les trous :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (3.6b)$$

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

$G_n - R_n$ ($G_p - R_p$) représente la différence des taux de générations et de recombinaisons pour les électrons (trous).

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

$$G_n = G_p = G \quad (3.7)$$

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 :

$$R_n = R_p = R \quad (3.8)$$

En appliquant l'équation de continuité (3.6) à un modèle unidimensionnel (la profondeur z), et en régime stationnaire, on aboutit à la forme classique suivante :

$$\text{div} \vec{J} = G(z) - R(z) \quad (3.9)$$

Le taux de génération est relié à la fonction de dissipation d'énergie $\phi(u)$ par l'équation suivante [41] :

$$G(z) = \frac{\rho}{R} \phi(u) \quad (3.10)$$

La fonction de dissipation de l'énergie $\phi(u)$ a la forme d'une gaussienne modifiée donnée par Wu et Wittry [29] sous la forme :

$$\phi(u) = A \cdot \exp \left[- \left(\frac{u - u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \exp \left(- \frac{bu}{u_0} \right) \quad (3.11)$$

où $u = (\rho/R) \cdot z$ est la pénétration réduite et normalisée du parcours de Kanaya et Okayama, ρ la densité du semiconducteur en (g/cm^3) et R est la profondeur de pénétration des électrons, exprimée en (g/cm^2) proposée par Kanaya et Okayama [20] sous la forme :

$$R (\mu\text{g/cm}^2) = 276 \cdot 10^{-6} \frac{A}{Z^{0.889}} E_0^{1.67} \quad (3.12)$$

E_0 étant l'énergie du faisceau d'électrons incident en (keV).

Les constantes A , B , b , u_0 , Δu , existant dans l'expression de $\phi(u)$ sont calculées pour le cas de CdTe à l'aide d'un programme de simulation de Monté-carlo. Après le fittage des courbes expérimentales et théoriques de $\phi(u)$ (voir annexe II), on aboutit aux valeurs suivantes :

$$\Delta u = 0.17$$

$$u_0 = 0.057$$

$$b = 3$$

$$B/A = 0.5$$

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

$$\int_0^{+\infty} \phi(u) du = G_0 \quad (3.13)$$

G_0 est le taux de génération total ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$), donné par :

$$G_0 = \frac{J_b \cdot E_0 \cdot (1 - f)}{e \cdot \mathcal{E}_{e-h}} \quad (3.14)$$

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

Le calcul de l'intégral de $\phi(u)$ (relation 3.13) entre 0 et $+\infty$ donne :

$$\int_0^{+\infty} \phi(u) du = A \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \Delta u \right) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{u_0}{\Delta u} \right) \right] - B \left(\frac{u_0}{b} \right) \quad (3.15)$$

La constante A peut être calculée à partir des deux relations (3.14) et (3.15), on obtient la valeur suivante :

$$A = \frac{2 \cdot J_b \cdot E_0 (1 - f)}{e \cdot \varepsilon_{e-h} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \Delta u \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{u_0}{\Delta u} \right) \right] - B \left(\frac{u_0}{b} \right)} \quad (3.16)$$

III.4.2. Résolution de l'équation de continuité dans la région déplétée

Dans cette région, et de manière générale, les flux des porteurs de charge résultant simultanément de la conduction électrique et de la diffusion s'expriment par :

$$\vec{J}_n = -D_n \operatorname{grad}(\Delta n) - \Delta n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \quad (3.17a)$$

$$\vec{J}_p = -D_p \operatorname{grad}(\Delta p) + \Delta p \cdot \mu_p \cdot \vec{E} \quad (3.17b)$$

où D_n (D_p) et μ_n (μ_p) sont respectivement le coefficient de diffusion et la mobilité des électrons (trous), \vec{E} le champ électrique obtenu par l'intégration de l'équation de poisson, donnée par :

$$\operatorname{div} \cdot \vec{E} = -\frac{e \cdot N_a}{\varepsilon} \quad (3.18)$$

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

$$E(z) = -\frac{e.N_a(z - Z_d)}{\epsilon} \quad (3.19)$$

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

On peut écrire la relation (3.9) pour chaque type de porteurs sous la forme suivante :

$$\frac{dJ_n}{dz} = G_n(z) - R_n(z) \quad (3.20a)$$

$$\frac{dJ_p}{dz} = G_p(z) - R_p(z) \quad (3.20b)$$

Lorsqu'on introduit les équations (3.17), (3.18) et (3.19) dans l'équation (3.20) on aura :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} + \mu_n \frac{e.N_a}{\epsilon} (z - Z_d) \frac{d\Delta n(z)}{dz} + \mu_n \frac{e.N_a}{\epsilon} \Delta n(z) = G_n(z) - R_n(z) \quad (3.21a)$$

$$-D_p \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \mu_p \frac{e.N_a}{\epsilon} (z - Z_d) \frac{d\Delta p(z)}{dz} - \mu_p \frac{e.N_a}{\epsilon} \Delta p(z) = G_p(z) - R_p(z) \quad (3.21b)$$

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

$$R_n(z) = R_p(z) = 0 \quad (3.22)$$

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

$$\alpha = \frac{e^2 . N_a}{2 . \epsilon . KT} \quad (3.23)$$

L'équation de continuité (3.21) devient :

$$-\frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} + 2\alpha(z - Z_d) \frac{d\Delta n(z)}{dz} + 2\alpha \Delta n(z) = \frac{G(z)}{D_n} \quad (3.24a)$$

$$-\frac{d^2\Delta p(z)}{dz^2} - 2\alpha(z - Z_d)\frac{d\Delta p(z)}{dz} - 2\alpha\Delta p(z) = \frac{G(z)}{D_p} \quad (3.24b)$$

La résolution de ces deux équations différentielles du deuxième ordre dans la région déplétée donne :

$$\Delta n(z) = \exp\left[\alpha(z - Z_d)^2\right] \left\{ \begin{array}{l} \theta_n + \xi_n \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] + \int_0^z \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{G(z')}{2.D_n} \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)\right] dz' \\ - \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \frac{G(z')}{2.D_n} dz' \end{array} \right\} \quad (3.25a)$$

$$\Delta p(z) = \exp\left[-\alpha(z - Z_d)^2\right] \left\{ \begin{array}{l} \theta_p + \xi_p F\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{G(z')}{D_p} F\left[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)\right] dz' \\ - F\left[\sqrt{\alpha}(z - Z_d)\right] \int_0^z \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{G(z')}{D_p} dz' \end{array} \right\} \quad (3.25b)$$

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 III.

III.4.3. Résolution de l'équation de continuité dans la région 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 (3.17a) avec un seul terme, celui dû à la diffusion :

$$\vec{J}_n = -D_n \text{grad}(\Delta n) \quad (3.26)$$

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 :

$$R_n = \frac{n - n_0}{\tau_n} = \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \quad (3.27)$$

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 :

$$\tau_n = \frac{L_n^2}{D_n} \quad (3.28)$$

En tenant compte des relations (3.26) et (3.27), on peut écrire l'équation de continuité (3.20a) sous la forme :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} = G - \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \quad (3.29)$$

La solution de cette équation différentielle est donnée par :

$$\Delta n(z) = B_n \exp\left[-\frac{(z - Z_d)}{L_n}\right] + \frac{L_n}{2.D_n} \int_{z_d}^z G(z') \left\{ \exp\left(-\frac{|z - z'|}{L_n}\right) - \exp\left(-\frac{z + z' - 2Z_d}{L_n}\right) \right\} dz' \quad (3.30)$$

Où B_n est une constante représentant la concentration des électrons au point ($z=Z_d$) de la région déplétée.

III.4.4. 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 région déplétée/région neutre (z=Z_d)

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

$$\Delta n(Z_d^-) = \Delta n(Z_d^+) \quad (3.31a)$$

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

$$\Delta p(Z_d^-) = \Delta p(Z_d^+) \quad (3.31b)$$

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

$$\Delta n(Z_d^+) = \Delta p(Z_d^+) \quad (3.31c)$$

- Condition de continuité de flux de porteurs minoritaires :

$$J_n(Z_d^-) = J_n(Z_d^+) \quad (3.31d)$$

En remplaçant $J_n(Z_d^-)$ et $J_p(Z_d^+)$ par leur expression (3.17a) et (3.17b) respectivement, la condition (3.31d) devient :

$$\left. \frac{d\Delta n}{dz} \right|_{z=Z_d^-} = \left. \frac{d\Delta n}{dz} \right|_{z=Z_d^+} \quad (3.31e)$$

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) :

$$J_n(0) = J_p(0) = -u(0) \quad (3.31f)$$

Où ; $u(0)$ est le nombre total des porteurs recombinants à la surface par unité de temps et unité de surface ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$), il peut être exprimé par [43] :

$$u(0) = \frac{V_{th} \sigma_n \sigma_p N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_p [p + n_i \cdot \exp[(E_i - E_t)/KT]] + \sigma_n [n + n_i \cdot \exp[(E_t - E_i)/KT]]} \quad (3.32)$$

V_{th} étant la vitesse thermique des porteurs, σ_n et σ_p les sections de captures des électrons et des trous, Et 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 :

$$n = n_0 + \Delta n(0) \quad (3.33a)$$

$$p = p_0 + \Delta p(0) \quad (3.33b)$$

L'hypothèse (§III.2), impose que les sections de capture des deux types de porteurs soient égales ($\sigma_n=\sigma_p$), ainsi que la vitesse thermique des électrons et des trous. La relation liant le coefficient de capture (c) à la vitesse thermique est donnée par [32] :

$$c = \sigma \cdot V_{th} \quad (3.34a)$$

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:

$$c = \frac{1}{\tau \cdot N_t} \quad (3.34b)$$

En introduisant (3.34a) et (3.33) dans (3.32) on obtient :

$$u(0) = \frac{c \cdot N_t [\Delta n(0) \cdot \Delta p(0) + p_0 \cdot \Delta n(0) + n_0 \cdot \Delta p(0)]}{n_0 + \Delta n(0) + n_t + p_0 + \Delta p(0) + p_t} \quad (3.35)$$

où les concentrations n_t et p_t sont données par :

$$n_t = N_c \exp[-(E_c - E_t)/KT] \quad (3.36a)$$

$$p_t = N_v \exp[-(E_t - E_v)/KT] \quad (3.36b)$$

Les équations précédentes (3.31a,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 :

$$K \cdot \theta_n^2 + L \cdot \theta_n + M = 0 \quad (3.37)$$

La solution de cette équation s'écrit :

$$\theta_n = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4.K.L}}{2.K} \quad (3.38)$$

Le calcul de K, L, M, est donné dans l'annexe III.

III. 5. Calcul self-consistent

On a vu précédemment (§III.3) que la largeur de la région déplétée (Z_d) est reliée à la probabilité d'occupation f par :

$$Z_d = \frac{N_t}{Na} (1 - f) \quad (3.39)$$

La probabilité d'occupation f est à son tour reliée aux excès de concentration de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ par :

$$f = \frac{\Delta n(0) + n_0 + n_i \exp[(E_i - E_t)/KT]}{\Delta n(0) + n_0 + \Delta p(0) + p_0 + 2n_i \cosh[(E_t - E_i)/KT]} \quad (3.40)$$

où les expressions de $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ à la surface libre ($Z=0$) sont :

$$\Delta n(0) = \exp(\alpha.Z_d^2) [\theta_n + \xi_n \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha}.Z_d)] \quad (3.41a)$$

$$\Delta p(0) = \exp(-\alpha.Z_d^2) [\theta_p + \xi_p F(\sqrt{\alpha}.Z_d)] \quad (3.41b)$$

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

Le calcul approprié de Z_d se fait d'une façon self-consistente. La procédure de calcul de Z_d est : on introduit une valeur initiale de Z_d dans les équations de transport, pour une énergie E_0 et une intensité de courant I_p du faisceau électronique. Ces équations sont résolues et les excès de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ sont déterminés. Pour ces excès de porteurs $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$, on déduit une nouvelle valeur de Z_d , si la différence de calcul entre cette valeur de Z_d et sa valeur initiale est suffisamment petite, la valeur de 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).

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

L'intensité (I_{CL}) est le nombre total de photons émis par unité de temps par un échantillon, soumis à un bombardement électronique, elle se calcule par l'équation [44] :

$$I_{CL} = (1 - R) \int_V A(z) \eta \cdot \frac{\Delta n(z)}{\tau} dz \quad (3.42)$$

V : volume de l'échantillon

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

η : efficacité de luminescence (rendement radiatif) égale à τ/τ_r . τ est la durée de vie totale et τ_r la durée de vie radiative.

$(1-R)$: facteur appelé 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 [3]:

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 \quad (3.43)$$

$A(z)$: une fonction de profondeur qui tient compte des pertes optiques par l'absorption interne des photons à la profondeur z , et qui s'écrit [45] :

$$A(z) = \int_0^{\theta_c} \exp\left(\frac{-\alpha z}{\cos \theta}\right) \sin \theta d\theta \quad (3.44)$$

α : coefficient d'absorption optique

θ_c : angle critique pour la réflexion totale à la surface interne du semiconducteur.

L'angle critique θ_c est lié à l'indice de réfraction (n) du matériau par la relation:

$$\sin \theta_c = 1/n \quad (3.45)$$

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 $0 < \theta < \theta_c$ [44].

L'expression du terme $A(z)$ a été, de ce fait, approximée par certains auteurs [46, 47], à cause des faibles valeurs de θ_c [47] :

$$A(z) \approx \exp(-\alpha.z) \quad (3.46)$$

L'excitation par un faisceau électronique peut être approximée par un point source localisée à une profondeur h (Fig. III.4), ce qui conduit à une simplification de la solution de l'équation de continuité des porteurs minoritaires (3.6a). 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.

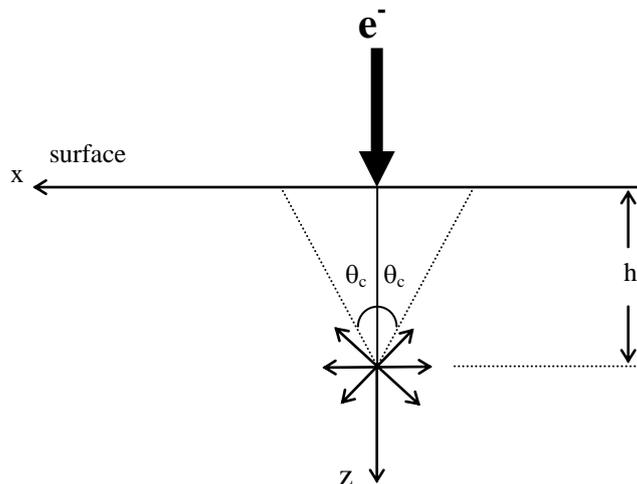


Fig. III.4 : Représentation d'un point source pour le calcul de l'intensité I_{CL} .

Le calcul de l'intensité I_{CL} (relation 3.42) est assujéti aux approximations suivantes :

- 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).

- la fonction de correction des pertes d'énergie utilisée est celle donnée par la relation (3.46).

- les processus radiatifs et non radiatifs sont absolument indépendants, leurs probabilités de recombinaison s'ajoutent, alors : $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}}$. 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 déplétée 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 suivante :

$$I_{CL} \approx \int_{Z_d}^{+\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_r} \exp(-\alpha \cdot z) dz \quad (3.47)$$

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.

L'intensité de cathodoluminescences dans le matériau considéré (p-CdTe) est obtenue en poursuivant les étapes décrites dans l'organigramme représenté sur la figure (III.5), et en exécutant le programme FORTRAN traduisant cet organigramme.

Le programme élaboré permet de calculer l'intensité de cathodoluminescence I_{cl} en fonction des paramètres du faisceau incident (l'énergie E_0 et l'intensité de courant I_p) dans un semiconducteur de tellure de cadmium de type p. Il donne également d'autres résultats concernant l'influence des autres paramètres sur l'intensité tels que la longueur de diffusion (L), le coefficient d'absorption (α_b) et la largeur de la zone déplétée (Z_d)...

III.7. Organigramme

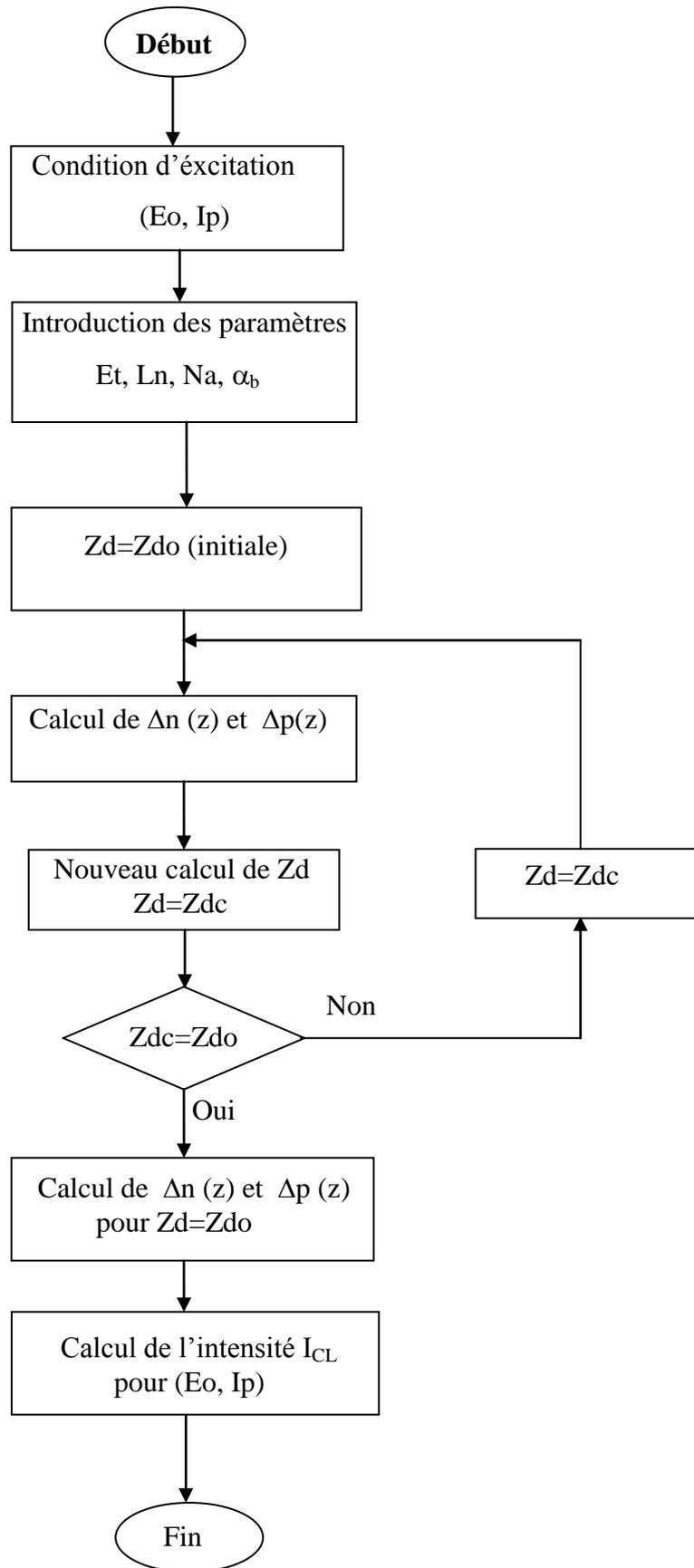


Fig. III. 5 : Organigramme de calcul de l'intensité de cathodoluminescence.

CHAPITRE IV

RESULTATS ET INTERPRETATIONS

IV.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à mettre en revue et à discuter les résultats obtenus dans notre étude, et qui peut être divisés en deux parties.

La première partie concerne l'étude de la variation de la largeur de la zone de déplétion (Z_d) en fonction de l'intensité du faisceau incident (I_p) pour différents paramètres gouvernants les propriétés de surface, en l'occurrence la concentration (N_t) des défauts de surface, ainsi que leur énergie (E_t) dans le gap, et du volume ; en l'occurrence la longueur de diffusion des électrons (L_n) et la concentration des accepteurs (N_a).

Nous avons également étudié, dans cette première partie, l'influence de l'énergie incidente (E_0).

La deuxième partie de notre analyse des résultats est liée à l'étude de l'influence des paramètres de surface et de volume sur le signal de cathodoluminescence.

Pour les paramètres de volume nous avons rajouté un paramètre, qui d'après des travaux antérieurs [46,48] sur d'autres matériaux, influe considérablement sur I_{CL} , c'est la coefficient l'absorption optique α .

Nous avons, en plus, observé la variation de I_{CL} en fonction de I_p pour différentes énergies d'accélération E_0 , et la variation de I_{CL} en fonction de E_0 pour différents I_p .

IV.2. Variation des concentrations de porteurs en excès à la surface du semiconducteurs

La figure (IV.1) montre les variations des porteurs excédentaires $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ à la surface du semiconducteur, en fonction de l'énergie incidente E_0 et pour différentes valeurs de l'intensité de courant I_p .

L'allure des courbes indique le passage, à basse énergie incidente, par un maximum après un accroissement dû tout simplement aux phénomènes de génération. En passant à plus fortes énergies on enregistre une décroissance de $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$, due à l'augmentation du volume de génération, donc au phénomène de recombinaisons dans le volume.

L'influence de I_p est mise en évidence en fixant une valeur de E_0 ; on remarque que $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ augmentent en fonction de I_p , ce qui indique que ce paramètre joue un rôle dans la création de paires électron-trou.

Le dernier point de cette analyse concerne les queues de courbes, qui se superposent pratiquement pour une valeur proche de zéro, ce qui indique que tous les porteurs se sont recombines.

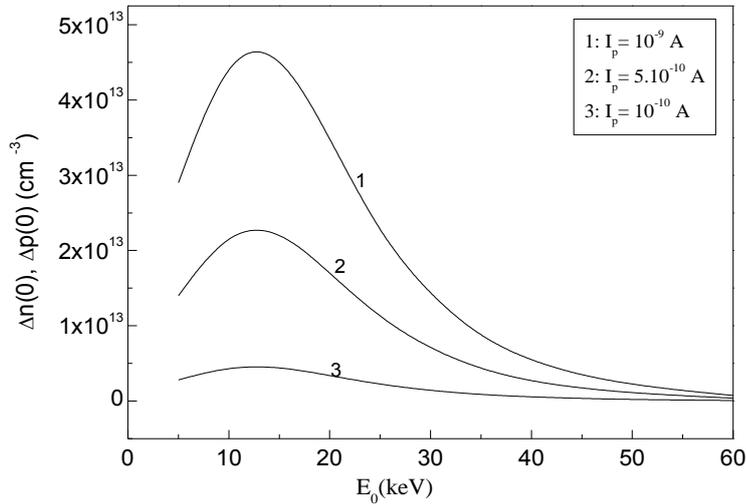


Fig. IV.1 : Variation de la concentration des porteurs en excès à la surface $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ en fonction de l'énergie incidente, pour différentes valeurs de l'intensité du courant.

IV.3. Variation de la largeur de la zone de déplétée avec les paramètres du faisceau et du matériau

Nous étudions dans ce qui suit le comportement de la largeur de la zone déplétée Z_d à la surface du semiconducteur, sous l'influence des conditions d'excitation du faisceau (l'énergie E_0 et l'intensité de courant I_p), les paramètres de la surface (la densité d'états N_t et le niveau énergétique E_t) et les paramètres de volume (la longueur de diffusion L_n , la concentration des accepteurs N_a et le coefficient d'absorption α).

On note que les deux paramètres L_n et N_a influent sur Z_d par l'intermédiaire des concentrations n_0 et p_0 et les conditions aux limites, alors que le coefficient d'absorption α n'a aucune influence sur Z_d .

IV.3.1. Influence de l'énergie incidente

Sur la figure (IV.2), nous avons reporté la variation de la largeur de la zone de déplétion 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 ($I_p \leq 10^{-7} \text{A}$) il n'y a pas de changement dans la valeur de la largeur de la zone déplétée. Ce seuil dépassé elle commence à décroître si 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 Z_d , 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 (Fig. IV.1), 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 Z_d .

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 Z_d , mais d'une façon moins importante que pour les faibles énergies E_0 .

IV.3.2. Influence du niveau énergétique des défauts de surface

La figure (IV.3) montre l'influence du niveau énergétique E_t des défauts de surface sur la largeur de la zone déplétée.

Le niveau E_t ne possède aucune influence sur Z_d pour les faibles intensités I_p , puisque les trois courbes obtenues pour trois valeurs de E_t se rejoignent pour une valeur constante de Z_d 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.

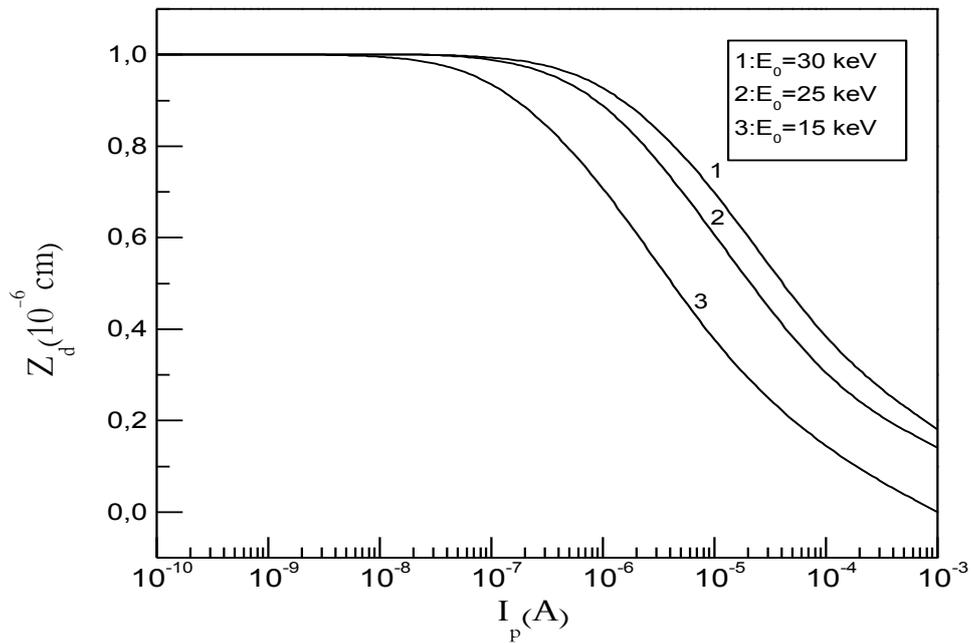


Fig. IV.2 : Influence de l'énergie incidente sur la largeur de la zone déplétée.
 ($E_t = 1.4$ eV, $L_n = 1 \mu\text{m}$, $N_t = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$)

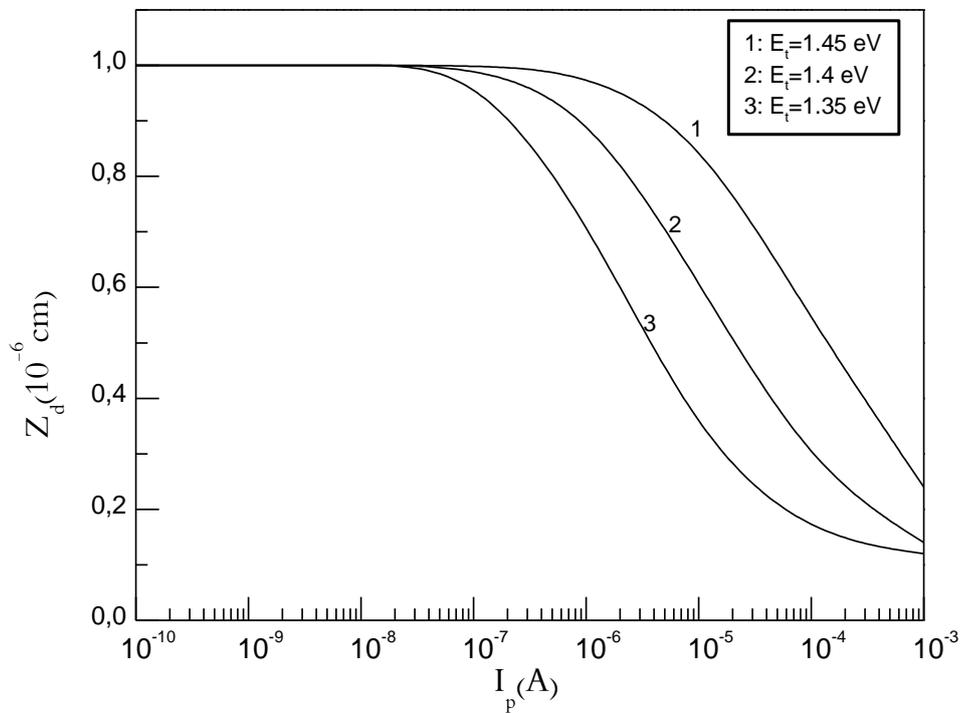


Fig. IV.3 : Influence de l'énergie des défauts (E_t) sur la largeur de la zone déplétée.
 ($E_0 = 25$ keV, $L_n = 1 \mu\text{m}$, $N_t = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$)

Pour des valeurs plus élevées de I_p nous remarquons une diminution de Z_d si I_p augmente. Cette diminution est liée au fait que l'énergie considérée est relativement faible (25keV), 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 en se réfère à la relation $\left(Z_d = \frac{N_t}{N_a}(1-f) \right)$, où la largeur Z_d se trouve liée au niveau énergétique E_t à travers la probabilité d'occupation f .

Si l'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 .

Comme il a déjà été indiqué (chap. III), la probabilité d'occupation décroît quand l'énergie E_t augmente (Fig. III.3), ce qui veut dire que Z_d croit 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 d'influence sur Z_d .

IV.3.3. Influence de la densité des états de surface

La variation de Z_d en fonction de I_p sous l'influence de la densité d'états de surface est montrée sur la figure (IV.4), sur laquelle on constate que pour une valeur donnée de N_t , Z_d 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 la relation $\left(Z_d = \frac{N_t}{N_a}(1-f) \right)$, où Z_d dépendra seulement de f si N_a est fixe, comme dans notre cas. D'autre part cette dépendance implique une diminution de Z_d 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 Z_d quand N_t diminue, ce qui peut nettement ressortir de la formule de Z_d précédente. Cette diminution est expliquée en fixant une valeur de I_p , donc les concentrations $\Delta n(0)$ et $\Delta p(0)$ et en notant que pour N_t plus faible on a Z_d plus faible, ce qui est complètement logique, car ce sont les états de surface qui créent la zone de charge d'espace.

La troisième constatation concernant cette analyse est que pour les N_t faibles (courbe 3) on enregistre une valeur constante de Z_d en fonction de I_p , et cela est dû au fait que les états de surface sont presque complètement occupés par la concentration des porteurs excédentaires en surface.

IV.3.4. Influence de la concentration de dopage

Sur la figure (IV.5) on a tracé la variation de Z_d en fonction de l'intensité du courant I_p sous l'influence de différentes concentrations de dopage N_a .

Les courbes enregistrées pour ce cas 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 Z_d quand N_a augmente, et N_t garde une valeur fixe.

Bien évidemment cela peut être vu à travers la relation $\left(z_d = \frac{N_t}{N_a} (1-f) \right)$, où Z_d est inversement proportionnelle à N_a .

L'explication donnée précédemment pour l'influence de N_t , en ce qui concerne la constance de Z_d pour les faibles I_p et sa décroissance quand I_p prend des valeurs considérables reste valable ici.

Pour comprendre l'influence de N_a , on est obligé de fixer d'une part N_t et d'autre part I_p , ce qui rend Z_d inversement proportionnelle à N_a , d'une façon directe, 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 Z_d gardera une valeur fixe, comme c'est le cas de la courbe 3.

Enfin il est à remarquer que l'effet de N_a prédomine celui de $(1-f)$.

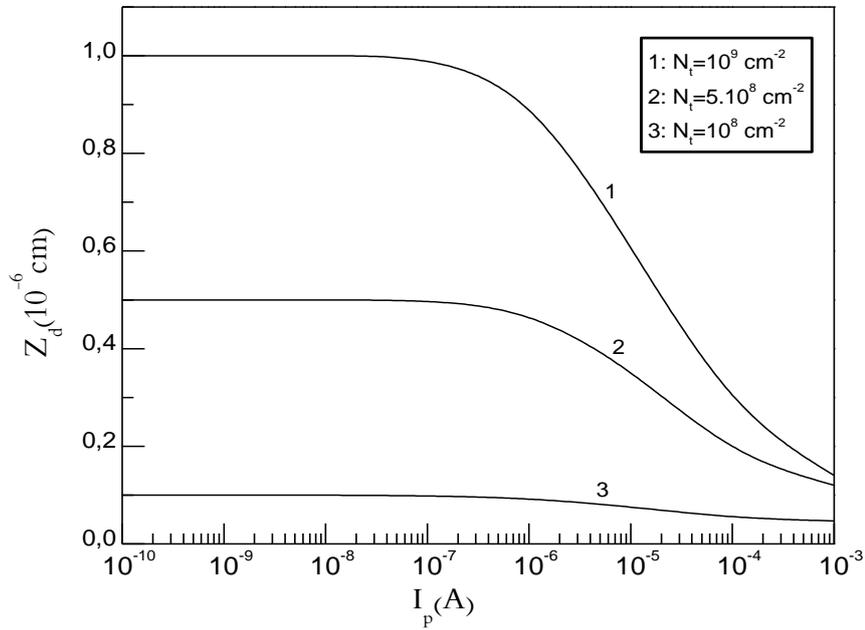


Fig. IV.4 : Influence de la densité des défauts (N_t) sur la largeur de la zone déplétée.

($E_0=25 \text{ keV}$, $E_t=1.4 \text{ eV}$, $L_n=1 \mu\text{m}$, $N_a=10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

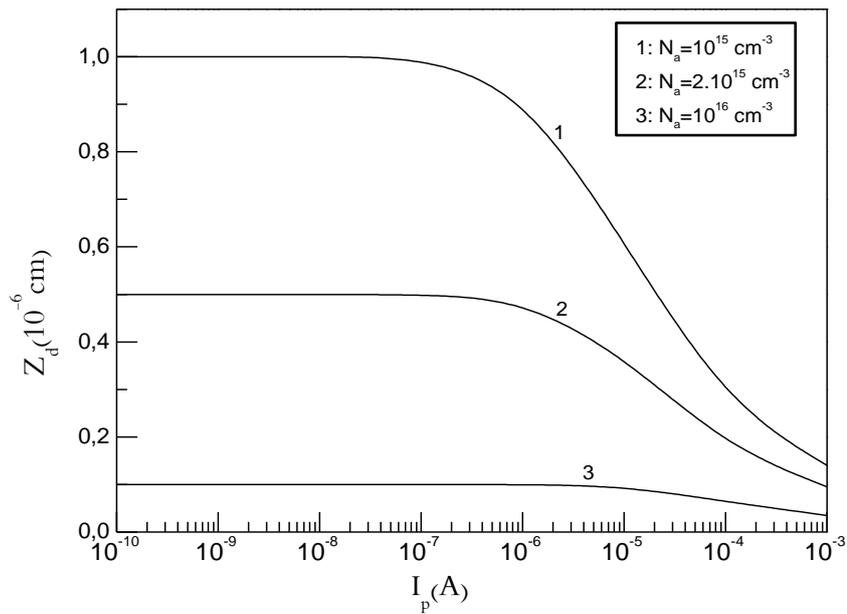


Fig. IV.5 : Influence de la concentration (N_a) sur la largeur de la zone déplétée.

($E_0=25 \text{ keV}$, $E_t=1.4 \text{ eV}$, $L_n=1 \mu\text{m}$, $N_t=10^9 \text{ cm}^{-2}$)

IV.3.5. Influence de la longueur de diffusion

La figure (IV.6) montre l'influence de la longueur de diffusion sur Z_d . Pour les courants inférieurs à 10^{-7} A, les courbes se superposent et donnent une valeur constante de Z_d , 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 il y a changement de Z_d sous l'influence de L_n . Ce changement est une décroissance des trois courbes de I_p et une diminution de Z_d 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 Z_d en fonction de I_p c'est 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 provoque une valeur plus petite de Z_d .

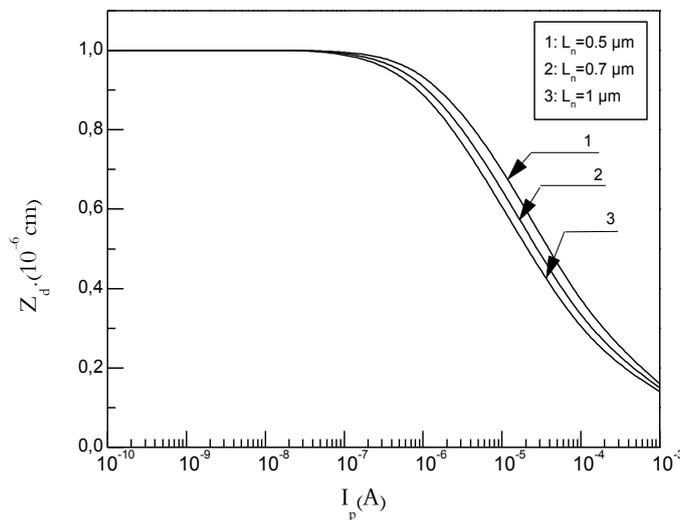


Fig. IV.6 : Influence de la longueur de diffusion sur la largeur de la zone déplétée.

($E_0=25$ keV, $E_t=1.4$ eV, $N_t=10^9$ cm $^{-2}$, $N_a=10^{15}$ cm $^{-3}$)

IV.4. Dépendance de l'intensité de cathodoluminescence avec les conditions d'excitation et les propriétés du matériau

Les courbes théoriques de l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie incidente sont les plus utilisées pour la détermination quantitative des valeurs physiques de volume et de surface, tels que : la longueur de diffusion L , 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.

IV.4.1. Variation de l'intensité I_{CL} avec les conditions d'excitation du faisceau incident

Les paramètres du faisceau incident sont : l'énergie, l'intensité du courant, le diamètre du faisceau. Nous nous limiterons dans ce qui suit aux deux premiers paramètres, qui ont les plus influents.

IV.4.1.1. Influence de l'intensité du courant incident

L'influence de l'intensité du courant du faisceau incident I_p sur les courbes $I_{CL}=f(E_0)$ est représentée sur la figure (IV.7).

On observe sur cette figure, pour les quatre valeurs de I_p choisies, que l'intensité I_{CL} passe par un maximum située dans l'intervalle [30 à 40 keV] de l'énergie du faisceau incident.

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} .

L'influence de I_p , comme on peut s'y attendre, est de faire augmenter I_{CL} avec I_p , avec cependant une remarque concernant la partie de décroissance, où l'on observe une diminution rapide de I_{CL} pour des valeurs relativement élevées de I_p , comparativement à la décroissance concernant les valeurs plus faibles. 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.

L'observation précédente nous permet de dire que l'activité de l'absorption optique est prépondérante pour les intensités relativement élevées de I_p .

IV.4.1.2. Influence de l'énergie incidente

La figure (IV.8) montre l'influence de l'énergie du faisceau incident sur les courbes $I_{CL} = f(I_p)$.

Les courbes présentées dans cette figure indiquent toutes une variation linéaire de I_{CL} en fonction de I_p . Ce résultat est bien conforme à des travaux antérieurs réalisés par Rao-Sahib [34] qui donnent l'expression $I_{CL} \sim I_p^m$, avec $1 < m < 2$, m dépendant de I_p et E_0 .

La linéarité indiquée a été obtenue jusqu'à $E_0 = 35$ keV, au-delà de cette énergie on perd la linéarité, pour rentrer probablement dans des variations de type $I_{CL} \sim I_p^2$ ou autres.

L'influence de E_0 est donc à double effet ; le premier est celui de faire augmenter I_{CL} , le second de permettre une variation linéaire pour les faibles excitations et une variation en puissance pour les fortes excitations.

Une fois encore, c'est les effets de surface et de volume qui font la différence, c'est à dire pour les faibles excitations ce sont les recombinaisons en surface, non radiatives en majorité qui dominant, alors que pour les fortes excitations ce sont les recombinaisons radiatives qui l'emportent.

IV.4.2. Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de volume

IV.4.2.1. Influence de la longueur de diffusion

Sur la figure (IV.9) nous avons représenté la variation de I_{CL} en fonction de E_0 pour différentes valeurs de la longueur de diffusion L_n .

L'analyse de ces courbes indique que :

- I_{CL} décroît quand L_n augmente : 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} .

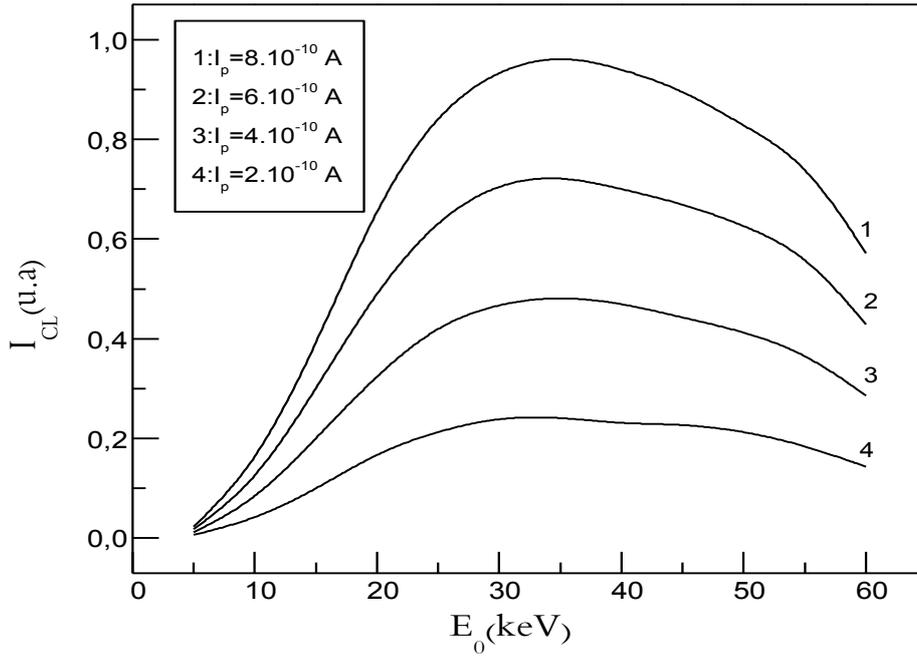


Fig. IV.7 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes intensités du courant. ($L_n=1\mu m$, $E_t=1.3eV$, $N_t=10^8 cm^{-2}$, $N_a=10^{15} cm^{-3}$, $\alpha=10^4 cm^{-1}$)

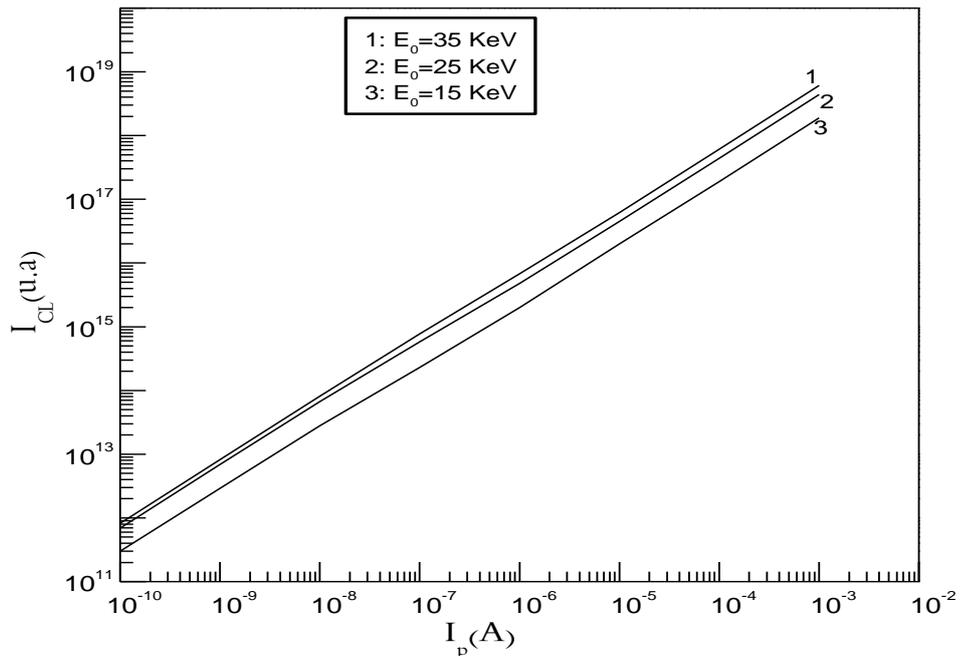


Fig. IV.8 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'intensité de courant pour différentes énergies. ($L_n=1\mu m$, $E_t=1.3eV$, $N_t=10^8 cm^{-2}$, $N_a=10^{15} cm^{-3}$, $\alpha=10^4 cm^{-1}$)

- les courbes admettent un maximum dans la gamme d'énergie [35 à 50 keV] de l'énergie E_0 ; l'explication est identique à celle donnée précédemment pour l'influence de l'intensité du faisceau incident.
- le maximum de I_{CL} se déplace vers les grandes énergies d'accélération quand L_n augmente, 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.

IV.4.2.2. Influence du coefficient d'absorption

La figure (IV.10) montre l'influence du coefficient d'absorption α sur le signal de cathodoluminescence.

Le coefficient d'absorption optique est un paramètre qui caractérise surtout le volume du semiconducteur, il prend une valeur variant entre 10^4 et 10^5 cm^{-1} pour les semiconducteurs à gap direct, comme CdTe [3]. Ce coefficient est également dépendant de l'état cristallin du matériau.

D'après les courbes de la figure (IV.10) on remarque que l'influence de ce paramètre ne devient significative que pour des énergies d'excitations relativement élevées, ce qui signifie bien que c'est un paramètre de volume plus qu'il n'est de surface.

On observe également sur ces courbes une augmentation de I_{CL} lorsque α diminue, ce qui est logique, car la forte absorption optique atténue considérablement la luminescence, comme on peut le remarquer sur la courbe 1.

L'apparition des maximums dans les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ pour différents coefficients d'absorption est liée au fait que les porteurs minoritaires en excès sont générés à une grande profondeur au-dessous de la surface et pour les hautes énergies d'excitation, mais les recombinaisons radiatives à cette profondeur sont absorbées d'une façon assez considérable.

On remarque également que le maximum de l'intensité I_{CL} se déplace vers les grandes énergies incidentes quand le coefficient d'absorption décroît ; ce qui est logique car on a une quantité plus grande de paires (e-h) donc beaucoup plus de recombinaisons radiatives et donc beaucoup plus de luminescence, qui s'accroît par la décroissance du coefficient d'absorption.

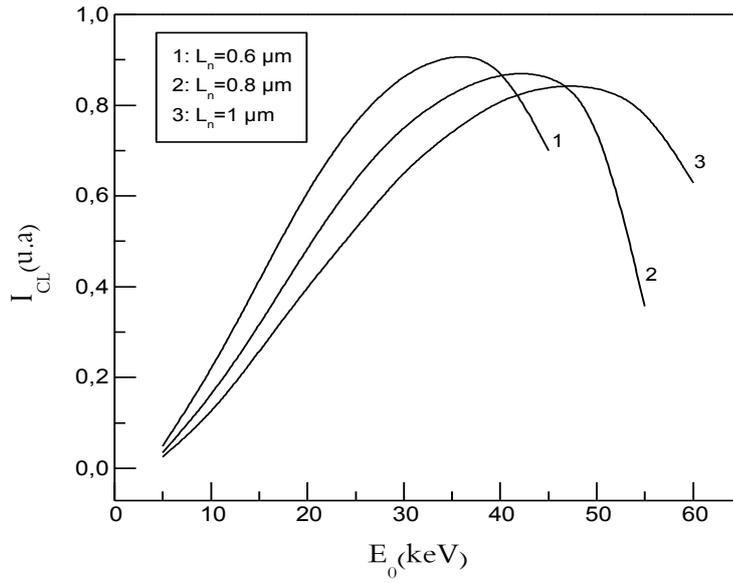


Fig. IV.9 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes longueurs de diffusion ($I_p=10^{-10}\text{A}$, $E_t=1.3\text{eV}$, $N_t=10^8\text{cm}^{-2}$, $N_a=10^{15}\text{cm}^{-3}$, $\alpha=10^4\text{cm}^{-1}$).

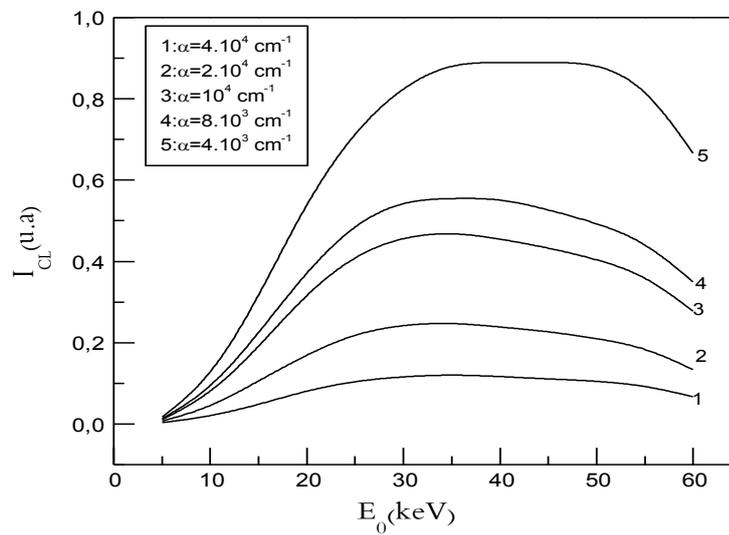


Fig IV.10 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différents Coefficients d'absorption ($I_p=10^{-10}\text{A}$, $E_t=1.3\text{eV}$, $L_n=1\mu\text{m}$, $N_t=10^8\text{cm}^{-2}$, $N_a=10^{15}\text{cm}^{-3}$).

IV.4.2.3. Influence de la concentration de dopage

Les courbes $I_{CL}=f(E_0)$ pour différentes concentrations de dopage (N_a) sont montrées sur la figure (IV.11), où on constate une augmentation de I_{CL} jusqu'à une certaine valeur de E_0 , puis une diminution, avec un déplacement du maximum vers les hautes énergies.

L'explication qu'on donne pour cette allure ainsi que pour le déplacement du maximum est celle qui a été donnée pour tous les autres paramètres.

En ce qui concerne l'influence de N_a on voit que I_{CL} diminue quand N_a augmente pour, des énergies d'excitation inférieures, à peu de chose près, à 45 keV, ceci est compréhensible car l'augmentation de N_a fait accroître le taux de recombinaisons non radiatives (cas des faibles injections), mais cela ne reste pas vrai pour des fortes énergies où la tendance est inversée, car on rentre dans le cas des fortes injections.

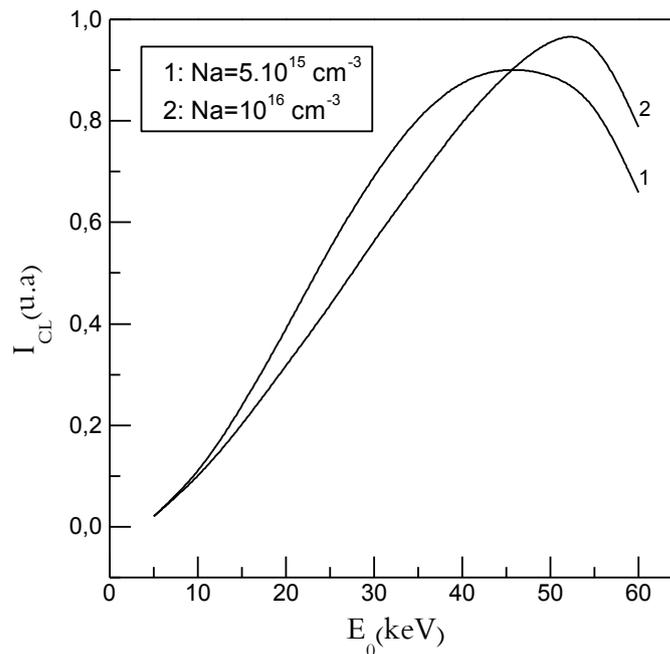


Fig. IV.11 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes concentrations de dopages ($I_p=10^{-10}$ A, $L_n=1\mu\text{m}$, $E_i=1.3\text{eV}$, $N_i=10^8\text{cm}^{-2}$, $\alpha=10^4\text{cm}^{-1}$)

IV.4.3. Variation de l'intensité I_{CL} avec les propriétés de surface

IV.4.3.1. Influence du niveau énergétique des défauts de surface

La figure (IV.12) présente l'influence des différentes valeurs de E_t sur l'intensité I_{CL} .

Les valeurs de E_t choisies dans cette étude sont des valeurs réelles, fréquemment rencontrées dans les spectres de photoluminescence ou de cathodoluminescence.

La première remarque à faire, en analysant les courbes obtenues, est l'augmentation de I_{CL} quand E_t augmente. Cette augmentation est remarquable essentiellement pour les basses énergies, où on observe une assez grande différence d'une courbe à une autre, mais cette différence devient négligeable et les courbes se confondent pour les hautes énergies.

La compréhension de ce phénomène devient assez facile si l'on se rend compte que E_t est un paramètre de surface, donc son influence ne peut apparaître que pour les basses énergies d'excitation du faisceau incident.

Le fait d'avoir un niveau E_t très proche de la bande de valence implique des recombinaisons en surface non radiatives et donc une diminution de I_{CL} .

La deuxième remarque concerne le fait que les courbes possèdent des maximums qui se déplacent vers les faibles énergies quand E_t augmente. Ce déplacement indique une fois encore que pour E_t faible le maximum est atteint un peu plus tard que pour les E_t plus grands.

IV.4.3.2. Influence de la largeur de la région déplétée

L'influence de la zone de déplétion sur les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ est représentée sur la figure (IV.13).

L'allure générale des courbes, croissance pour les faibles énergies puis passage par un maximum et ensuite décroissance, en plus d'un déplacement des maximums vers les hautes énergies a déjà été expliquée dans le paragraphe concernant l'influence de E_t .

Pour l'influence de Z_d on remarque que I_{CL} diminue quand Z_d augmente. Pour expliquer ce résultat il faudra se rappeler que la région déplétée est une région exempte de recombinaisons radiatives, ce qui conduit à imaginer que cette région est une barrière pour les recombinaisons radiatives et que son augmentation entraîne, de ce fait, une diminution de celles-ci et donc une diminution de I_{CL} . Pour des valeurs élevées de E_0 (supérieures à 40 keV) il n'y a plus d'influence de Z_d sur I_{CL} , ce résultat est similaire à celui trouvé par C. H. Jacob et al [48].

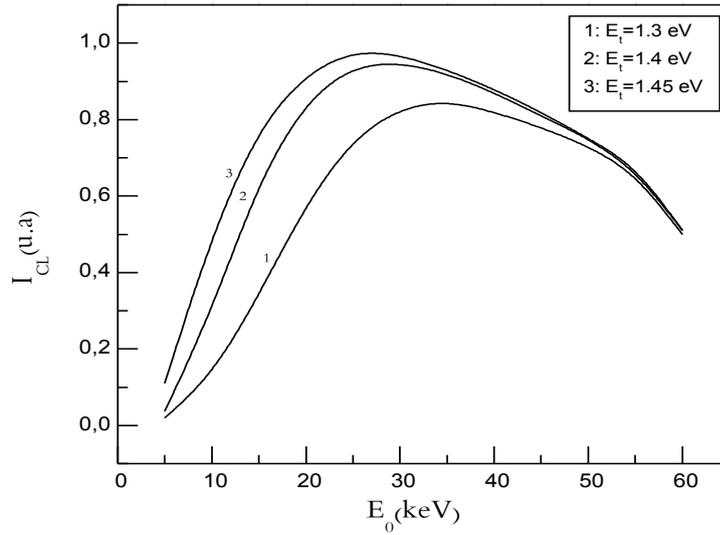


Fig. IV.12 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différents niveaux d'énergies (E_t) associés aux défauts de surface ($I_p=10^{-10}$ A, $L_n=1\mu\text{m}$, $N_t=10^8\text{cm}^{-2}$, $N_a=10^{15}\text{cm}^{-3}$, $\alpha=10^4\text{cm}^{-1}$)

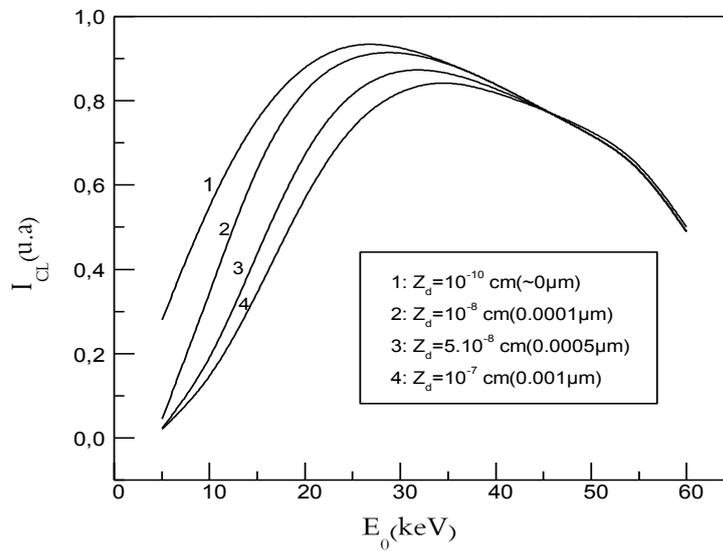


Fig. IV.13 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes largeurs de la région déplétée ($I_p=10^{-10}$ A, $L_n=1\mu\text{m}$, $E_t=1.3\text{eV}$, $\alpha=10^4\text{cm}^{-1}$).

IV.4.3.3. Influence de la densité des états de surface

La figure (IV.14) correspond aux variations de I_{CL} en fonction de E_0 pour différentes valeurs de N_t .

L'explication de l'allure générale reste valable pour ce cas ci. L'influence de N_t sur I_{CL} va dans le même sens que celle de Z_d , c'est à dire que I_{CL} diminue quand N_t augmente, on explique ceci par le fait que l'augmentation de N_t entraîne celle du taux de recombinaisons non radiatives et par conséquent la diminution de I_{CL} .

Pour les hautes énergies, N_t ne possède aucune influence sur I_{CL} car les électrons pénètrent plus profondément dans le volume et c'est l'effet de celui qui prime.

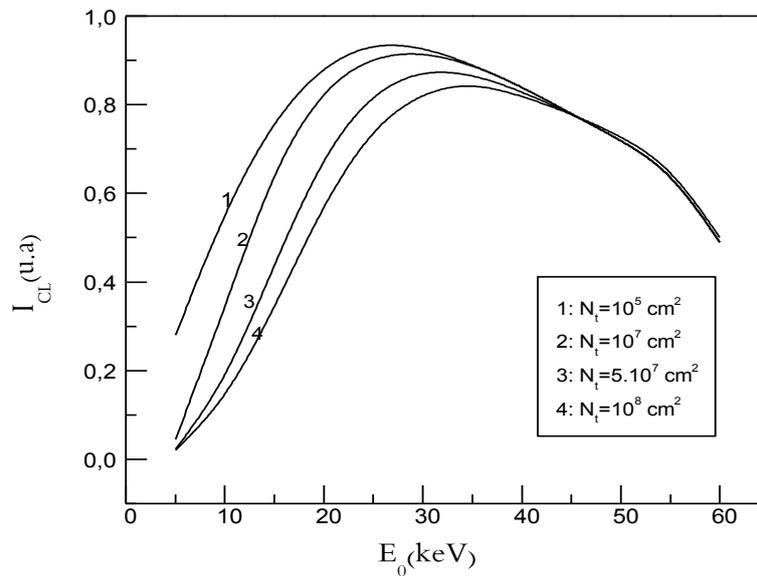


Fig. IV.14 : Variation de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente pour différentes densités de défauts de surface ($I_p=10^{-10} \text{ A}$, $L_n=1 \mu\text{m}$, $E_t=1.3 \text{ eV}$, $\alpha=10^4 \text{ cm}^{-1}$).

IV.5. Conclusion

Le modèle proposé permet de calculer l'intensité de la CL dans un échantillon de CdTe.

Les résultats obtenus à partir de l'étude de la variation de Z_d en fonction de I_p montrent une influence considérable des paramètres de surface N_t et E_t comparée à celle des paramètres de volume N_a et L_n pour les valeurs élevées de l'intensité I_p . Les faibles valeurs de I_p n'ont aucune influence sur Z_d quel que soit le paramètre considéré.

L'ensemble des résultats de l'étude de l'intensité I_{CL} en fonction de l'énergie incidente E_0 montrent que l'ensemble des courbes présente un maximum, dû à des effets de recombinaison pour les faibles énergies, et d'absorption pour les fortes énergies d'accélération, ces résultats indiquent également que l'influence des paramètres de surface N_t et E_t apparaît aux basses énergies, tandis que l'influence des paramètres de volume L_n et N_a n'apparaît que pour les hautes énergies.

Les courbes $I_{CL}=f(E_0)$ pour différentes énergies E_0 montrent une dépendance linéaire entre I_{CL} et I_p .

Les allures des courbes obtenues dans ce travail sont comparables à celles données en littérature, notamment les travaux de A. Djemel et al [41, 49,50], W. Hergert et al [46] pour le GaAs, ainsi V. M. Leonov et al [51], S. Achour [1] pour CdS, de F. Cléton et al [44] pour InP.

Enfin l'observation des différentes variations de l'intensité I_{CL} , nous a permis de dire que la relation entre celle-ci et les paramètres caractérisants le semiconducteur est non linéaire.

CONCLUSION GENERALE

L'étude théorique de la cathodoluminescence appliquée au matériau CdTe de type p a fait l'objet de cette thèse ; elle a permis de mettre en évidence le comportement de luminescence de ce matériau pouvant être influencé par des paramètres extrinsèques ou intrinsèques.

En premier, l'intérêt a été donné à la fonction de génération des porteurs dans CdTe : nous avons choisi comme fonction de génération la fonction appelée gaussienne modifiée, proposée par Wu et Wittry et pouvant être adaptée à notre matériau. Nous avons apporté une certaine modification concernant les constantes de cette fonction. L'ajustement des courbes théoriques à celles trouvées dans la littérature permet l'obtention des constantes propres à CdTe.

L'adoption du modèle théorique proposé pour le calcul de la cathodoluminescence est basée sur le fait que celui-ci décrit parfaitement les phénomènes observés sous certaines conditions expérimentales pour d'autres matériaux.

L'étude entreprise a permis la mise en évidence de l'influence des paramètres du faisceau incident et des paramètres physiques de surface et de volume sur le signal cathodoluminescent.

Il ressort de nos analyses que l'ensemble des courbes $I_{CL} = f(E_0)$ admettent un maximum, due essentiellement à des phénomènes de recombinaisons et d'absorption. Les courbes $I_{CL} = f(I_p)$, quant elles, montrent un caractère linéaire.

L'analyse de la variation de la largeur de la zone de déplétion Z_d en fonction du courant incident I_p indique que les faibles valeurs de celui-ci sont sans influence jusqu'à une certaine valeur où l'on observe une décroissance considérable de Z_d . Cette décroissance est beaucoup plus prononcée sous l'influence des paramètres de surface comparativement à l'influence des paramètres de volume.

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

A la fin de cette étude nous pouvons confirmer que la cathodoluminescence est un outil très puissant pour l'étude et la caractérisation électrique et optique de CdTe en particulier et les semiconducteurs en général.

Il reste cependant à confronter ce travail théorique avec des résultats expérimentaux afin de pouvoir valider ou non le modèle de calcul utilisé. Ça sera la perspective future de ce travail.

REFERENCES

- [1] S. Achour, Thèse Doctorat d'Etat, Univ. Constantine (1989)
- [2] D. B. Holt, M. D. Muir, P. R. Grant, M. Boswarva "Quantitative Scanning Electron Microscopy", Academic Press (1974)
- [3] B. G. Yacobi et D. B. Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids", Ed. Plenum Press, New York and London (1990).
- [4] S. M. Davidson, A. Rasul "Développements in Electron Microscopy and Analysis", Ed. D. L. Misell, 65 (1977)
- [5] B. G. Yacobi, D. B. Hot, J. Appl. Phys. 59(4), R1 (1986)
- [6] J. P. Chamonal, Thèse de 3^e Cycle, Université Scientifique et Médicale, Grenoble (1982).
- [7] J. F. Bresse et M. Dupuy "La Microscopie Electronique à Balayage dans les Semiconducteurs", Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 417 (1978).
- [8] J. P. Smith, Papier N^o 38 Présenté à la 3^{ème} Conférence sur "Electron Probe Analysis", Chicago, (1968).
- [9] B. Sieber, Thèse de Doctorat Es-Sciences, Univ. Paris Sud (1985)
- [10] F. A. Selim, V. Swaminathan, F. A. Kröger, Phys. Stat. Sol. A29, 465 (1975).
- [11] D. Imhoff, F. Gelsdorf, B. Pellisier and J. Castaing, Phys. Stat. Sol. (a) 90, 537 (1985).
- [12] J. C. Philips "Bond and Bands in Semiconductors", Academic Press, New York (1973)
- [13] K. Zanio "Semiconductors and Semimetals", Vol. 13, CdTe, Academic Press New York, San Fransisco and London (1978)
- [14] S. Mergui, Thèse de Doctorat, Univ. Louis Pasteur, Strasbourg (1991)
- [15] I. Gabas and J. Tousek, Phys. Stat. Sol. (a) 43, 351 (1977)
- [16] F. Maurice "Technique de l'Ingénieur", Analyse et Caractérisation, P 885 (1988).
- [17] M. Dussac, Thèse de Docteur Ingenieur, Univ. Grenoble (1985)
- [18] R. Shimisu and K. Murata, J. Appl. Phys. 42 (1), 387 (1971)
- [19] G. Fontaine "Emission Electronique et Contrastes", Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 123 (1978).
- [20] K. Kanaya, S. Okayama, J. Phys. D : Appl. Phys. 5, 43 (1972)
- [21] D. B. Wittry, D. E. Kyser, J. Appl. Phys. 38 (1), 375 (1967)
- [22] A.E. Grün, Z. Naturforsch, 12A, 89 (1957)
- [23] T. E. Everhart, P. H. Hoff, J. Appl. Phys. 42 (13), 5837 (1971)

- [24] C. Klein, J. Appl. Phys. , 39(4), 2029 (1968)
- [25] M. Ledra, Thèse de Magister, Univ. Constantine (1995)
- [26] H. J. Fitting, J. Reinhardt, Phys. Stat. Sol. (a) 88, 245 (1985)
- [27] G. Neubert and S. Rogaschewski, Phys. Stat. Sol. (a) 59, 35 (1980)
- [28] G. Love and V. D. Scott, J. Phys. D : Appl. Phys. 11, 1369 (1978)
- [29] C. J. Wu, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 49(5), 2827 (1978)
- [30] K. Guergouri, Thèse de doctorat, Univ. Paris VI (1987)
- [31] R. Legros " Les semiconducteurs ", T. 1, Ed. Eyrolles, Paris (1974).
- [32] H. Mathieu "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 4^{ème} ed. , Ed. Masson, Paris (1998).
- [33] P. Kireev " La Physique des Semiconducteur ", Ed. Mir-Moscou (1975)
- [34] T. S. Rao-Sahib, D. B. Wittry, J. Appl. Phys. 40 (9), 3745 (1969)
- [35] P. Branski, V. Klotchkov, I. Potykévitch, "Electronique des semiconducteurs", T.1, Ed. Mir- Moscou (1975)
- [36] N. L. Dmitruk, V. G. Litovchenko and G. H. Talat, Surface Science, 72, 321 (1978)
- [37] D. B. Wittry and D. F. Kyser, J. Soc. 21, 312 (1966)
- [38] A. Nouiri, Thèse de Doctorat d'Etat, Univ. Constantine (2000)
- [39] J. Derrien "Technique de l'Ingenieur", traité généralités A 245, 2 (1990)
- [40] C. Sebenne, " Interface Semiconducteur-Vide ", Ecole d'Eté d'Aurssois en Photoélectrochimie, Octobre (1984).
- [41] A. Djemel, R.J.Tarento, J.Castaing, Y.Marfaing and A. Nouiri, Phys. Stat. Sol. (a)168, 425 (1998)
- [42] R. J.Tarento, Y. Marfaing, J. Appl. Phys. 71(10), 4997 (1992)
- [43] S. M. Sze " Physics of Semiconductors Devices ", 2nd edi., Ed. John Wiley et Sons, New York (1981).
- [44] F. Cléton, B. Sieber, R. A. Masut, L. Isnard, J. M. Bonard and J. D. Ganière, Semicond. Sci. Technol. 11, 726 (1996)
- [45] W. Hergert and L. Pesemann, Phys. Stat. Sol. (a) 85, 641 (1984)
- [46] W. Hergert, P. Reck, L. Pasemann, and J. Schreiber, Phys. Stat. Sol. (a) 101, 611(1987)
- [47] S. Achour, Phil. Mag. Let. 59 (4), 205 (1989)
- [48] C. H. Jacob Phang, K. L. Pey and S. H. Daniel Chan, IEEE Transactions on Electron Devices, 39 (4), 782 (1992).
- [49] A. Nouiri, A. Djemel, R. J. Tarento, Algerian Journal of Advanced Materials, 3, 27 (1999)

- [50] A. Nouri, A. Djemel, R. J. Tarento, *Micro. Eng.* 51-52, 1-4, 151(2000).
- [51] V. M. Leonov, A. G. Molchanov, Y. M. Popov, and G. H. Talat, *Sov. Phys. Semicond.* 10(8), 852 (1976)
- [52] D. F. Kyser, *Pro. Of the 6th Int. Conf. On X-Ray Optics and Microanalysis*, 1971 Osaka, Ed. G. Shinoda et al, Univ. Tokyo, Press-Tokyo, 147 (1972).
- [53] G. Oelgart, H. Scholz, *Phys. Stat. Sol. (a)* 75, 547 (1983)

ANNEXES

Annexe I

Principales propriétés physiques de CdTe à 300 K

Propriété	Symbole	Valeur
Numéro atomique	Z	50
Longueur de liaison (Å°) à l'équilibre	r ₀	Cd-Cd 4.558 Cd-Te 2.80
Paramètre de maille (Å°)pour : - La structure hexagonale - La structure cubique (C.F.C)	a, c a	4.57, 7.47 6.48
Masse moléculaire (g)	M	240
Densité (g/cm ³)	ρ	6.1
Point de fusion (°C)	T _f	1092
Conductivité thermique (W.cm ⁻¹ .K ⁻¹)	K _T	0.075
Chaleur spécifique (Cal.mol ⁻¹ .K ⁻¹)	C _p	11.9
Diffusité thermique (cm ² .s ⁻¹)	D _{th}	10 ⁻⁵ à 800°C
Coefficient de dilatation linéaire (K ⁻¹)	α _l	4.9x10 ⁻⁶
Module d' young (N.m ⁻²)	E	<111> 5.33x10 ¹⁰ <100> 2.35x10 ¹⁰
Coefficient de poisson	ν	0.41
Ionicité	f	0.72
Constante d'élasticité (N.m ⁻²)	C ₁₁ C ₁₂ C ₄₄	5.33x10 ¹⁰ 3.65x10 ¹⁰ 2.04x10 ¹⁰
Module de rigidité (N.m ⁻²)	G	(111) 0.88x10 ¹⁰ (100) 1.99x10 ¹⁰

Propriété	Symbole	Valeur
Affinité électronique (eV)	χ	4.28
Travail de sortie (eV)	W_0	5.72
Longueur d'onde d'émission fondamentale (μm)	λ_g	0.817
Densité d'état : bande de valence (cm^{-3})	N_V	7.46×10^{18}
Densité d'état : bande de conduction (cm^{-3})	N_C	1.6×10^{19}
Résistivité intrinsèque ($\Omega \cdot \text{cm}$)	ρ_i	10^{11} estimée $\sim 10^9$ pratique
Mobilité des électrons, trous ($\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$)	μ_n, μ_p	1200, 80
Masse effective des électrons, trous en (m_0)	m_e^*, m_p^*	0.096, 0.60
Constante diélectrique statique	$\epsilon_r(0)$	10.90
Indice de réfraction	n	2.65 à $10.6 \mu\text{m}$ 2.75 à $1.4 \mu\text{m}$
Coefficient d'absorption (cm^{-1})	α	10^4
vitesse thermique des trous, électrons ($\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$)	V_{th}	$1.5 \times 10^7, 3.7 \times 10^7$
Densité des porteurs intrinsèques (valeur théorique) (cm^{-3}).	n_i	6.9×10^5
Densité des porteurs libres valeur moyenne pratique (cm^{-3})	n, p	$\sim 10^{10}$

Annexe II

Procédure de calcul des constantes : $u_0, \Delta u, B/A, b$, pour le cas de CdTe en utilisant la fonction de dissipation d'énergie de Wu et Wittry.

Les fonctions analytiques représentant la perte d'énergie, et disponibles dans la littérature, sont soit, du type polynomial pour les éléments légers [23], soit du type gaussien modifié [52] ou non [53] pour les éléments plus lourds tel que CdTe, GaAs [9].

L'approximation de la gaussienne modifiée de la fonction de dissipation d'énergie est appliquée à tous les semiconducteurs, bien que les constantes dans l'équation de $\phi(u)$ peuvent varier légèrement avec le nombre atomique [29].

Nous avons, dans notre simulation, utilisé la fonction de la perte d'énergie déterminée par Kyser pour GaAs à partir de la génération des rayons X [52], avec un léger changement des paramètres. Cette fonction est également utilisée par Wu et Wittry.

GaAs a un numéro atomique Z plus faible que celui de CdTe ($Z_{\text{GaAs}} = 32, Z_{\text{CdTe}} = 50$), mais il est quand même un élément mi-lourd, si la fonction perte d'énergie est radicalement différente pour GaAs et Si ($Z_{\text{Si}}=14$), elle doit être assez similaire quant à GaAs et CdTe [9].

On peut seulement prévoir que la gaussienne modifiée sera dans le cas de CdTe centrée un peu plus près de la surface (Z_0 plus petit) et que la variance $(\Delta Z)^2$ sera un peu plus grande [9].

Le modèle de Wu et Wittry a été choisi en fonction de la simplicité de sa procédure de calcul et dans le but d'alléger ceux-ci dans le programme utilisé pour le calcul de l'intensité de cathodoluminescence.

Les étapes de calcul de $u_0, \Delta u, B/A$ et b

On rappelle (chapitre II) les expressions des fonctions de dissipation d'énergie normalisée exprimées par les modèles de C.J Wu et D.B Wittry et celui de K. Kanaya et S. Okayama.

-pour le modèle de Wu et Wittry on a :

$$\Phi(u) = A \cdot \exp\left[\left(-\frac{u - u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \cdot \exp\left(\frac{-b \cdot u}{u_0}\right) \quad (\text{A2.1})$$

Pour GaAs : $u_0 = 0.125$, $\Delta u = 0.35$, $B/A = 0.4$ et $b = 4$.

- pour le modèle de Kanaya et Okayama on a :

$$\Phi(u) = \frac{1}{(1-u)^{2/5}} \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5} \right) \exp \left[- \left(\frac{\gamma \cdot u}{1-u} \right) \right] + \left[\frac{1}{2^{5/6}} - (1-u)^{5/6} \right] \cdot \left[\frac{E_B}{E_0} \cdot \frac{6.1,9}{5} \cdot \frac{\gamma}{(1-u)^2} \right] \exp \left(- \frac{1,9 \gamma \gamma \cdot}{1-u} \right) \quad (A2.2)$$

Avec:

$\gamma = 0.187 Z^{2/3}$, Z le nombre atomique, égal à 50 pour CdTe, $u = z/R$ la profondeur réduite et E_B l'énergie des électrons rétrodiffusés.

Il est important de signaler que la fonction de génération $g(z)$, la fonction de dissipation d'énergie normalisée $\phi(u)$ et la fonction de dissipation d'énergie (perte d'énergie) par unité de profondeur (dE/dZ) sont reliées par les relations suivantes :

$$g(z) = \frac{\rho}{R} \cdot \Phi(u) \quad (A2.3)$$

$$g(z) = \frac{I_P}{q \cdot \varepsilon_{e-h}} \cdot \frac{dE_A}{dz} \quad (A2.4)$$

$$\Phi(u) = \frac{d(E_A/E_0)}{du} \quad (A2.5)$$

• La première étape

Cette étape, consiste à représenter la fonction de dissipation d'énergie par unité de profondeur massique $\frac{dE_A}{d(\rho z)}$ en fonction de la profondeur z (Fig. AII.1), utilisée par Kanaya et Okayama, pour des énergies comprises entre 10 et 45 keV.

• La deuxième étape

Nous avons tracé (Fig. AII.2) la variation de la fonction de génération $g(z)$ en fonction de la profondeur à différentes énergies incidentes. Cette variation est calculée par la relation de Wu et Wittry pour une cible de tellure de cadmium.

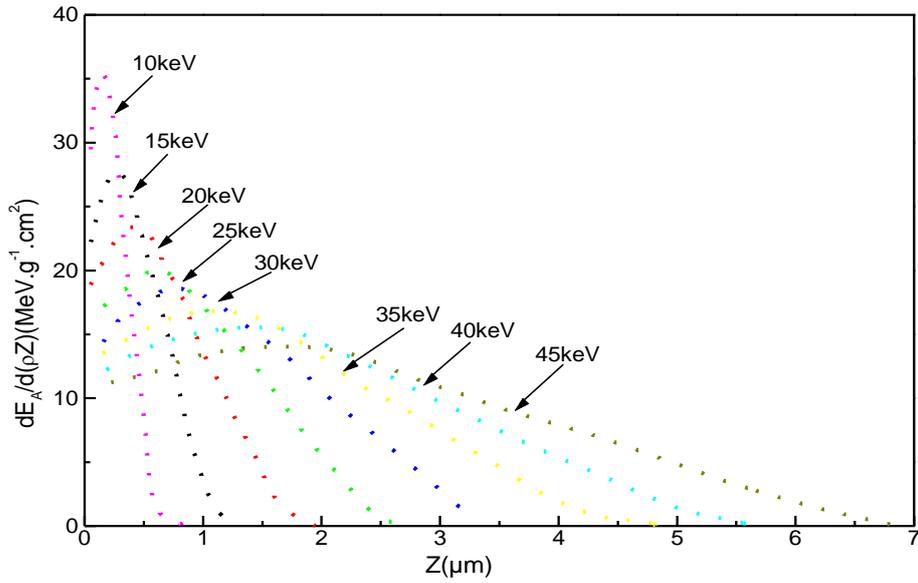


Fig. AII.1 : Courbes de dissipation d'énergie en fonction de la profondeur, calculées pour CdTe d'après le modèle de Kanaya et Okayama [9].

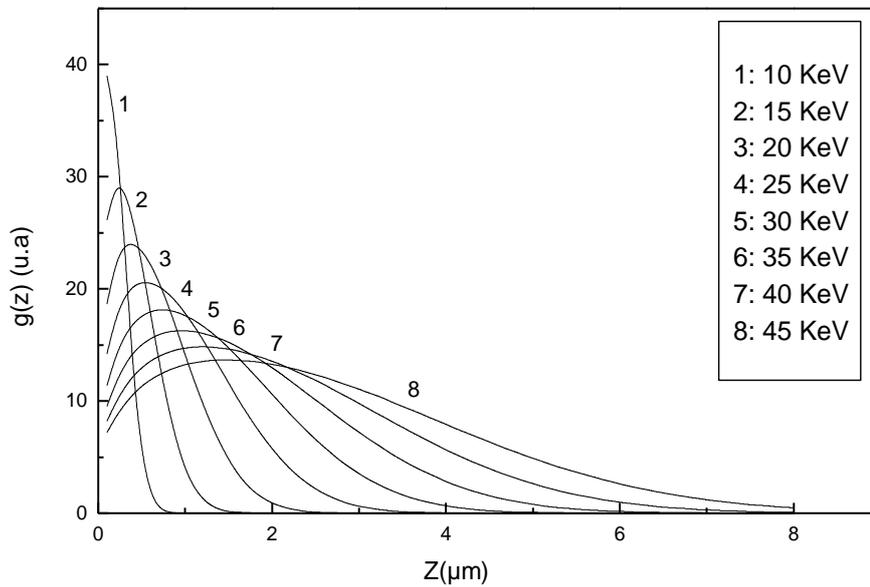


Fig. AII.2 : Variation de la fonction de génération $g(z)$ en fonction de la profondeur z , à différentes energies incidentes dans CdTe. L'expression de $\phi(u)$ utilisée est celle de Wu et Wittry.

• La troisième étape

Elle consiste à établir et utiliser un programme de simulation, nécessaire pour tracer la fonction de génération $g(z)$ de Wu et Wittry en fonction de la profondeur z . Pour cela nous utilisons les étapes suivantes :

1. On introduit une valeur de l'énergie E_0 .
2. On introduit arbitrairement les constantes (u_0 , Δu , B/A et b) de la fonction de $\phi(u)$, ayant des valeurs proches de celle de GaAs.
3. On utilise les valeurs de ses constantes pour calculer la fonction de génération $g(z)$ selon la relation $\left(g(z) = \frac{\rho}{R} \cdot \Phi(u)\right)$, ensuite on trace la courbe correspondante $g(z)$.
4. On compare cette courbe obtenue pour les valeurs bien déterminées (E_0 , u_0 , Δu , B/A et b), avec une courbe calculée par le modèle de Kanaya et Okayama (Fig. AII.1) correspondant à la même valeur d'énergie incidente.

la superposition des deux courbes permet de distinguer deux cas :

- si la différence est relativement grande on est obligé d'effectuer un autre changement des valeurs de (u_0 , Δu , B/A et b), en répétant les étapes (2, 3 et 4) précédentes jusqu'à la superposition des deux courbes.
- si la différence entre ces deux courbes est assez faible, donc les valeurs de (u_0 , Δu , B/A et b) choisies sont les valeurs les mieux adaptées à la fonction de dissipation d'énergie de Wu et Wittry pour le cas de CdTe.

N.B : l'utilisation d'une seule valeur d'énergie incidente (E_0) est suffisante pour déterminer les constantes précédentes. Cependant, dans notre comparaison nous utilisons plusieurs énergies d'incidences pour bien préciser l'ajustement des deux groupes de courbes.

Un bon ajustement (Fig. AII.3) est obtenu pour les valeurs suivantes :

$$u_0 = 0.057, \Delta u = 0.17, B/A = 0.5 \text{ et } b = 3$$

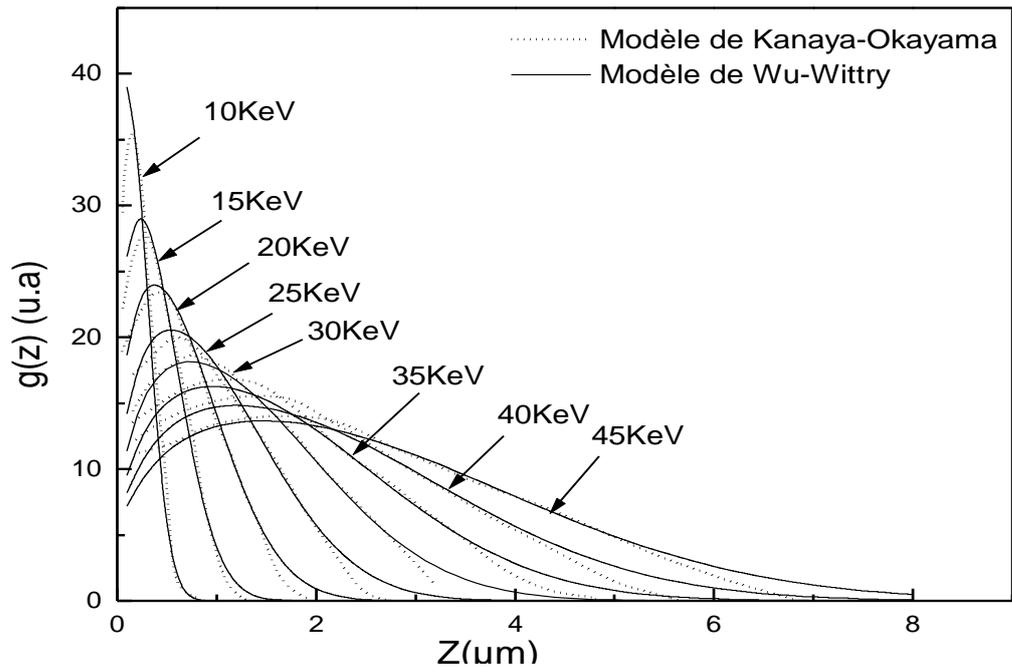


Fig. AII.3 : Ajustement des courbes des fonctions de génération obtenues par le modèle de Wu-Wittry et de Kanaya-Okayama dans CdTe.

Annexe III

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 :

$$a_1 = \exp(\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$b_1 = -\exp(\alpha \cdot Z_d^2) \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$a_2 = \exp(-\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$b_2 = -\exp(-\alpha \cdot Z_d^2) F(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$c_1 = \left[2 \cdot \alpha \cdot D_n - \frac{e^2 \cdot N_a \cdot D_n}{\varepsilon \cdot KT} \right] \cdot Z_d \cdot \exp(\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$d_1 = -2 \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot D_n - c_1 \cdot \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

$$c_2 = \left[-2 \cdot \alpha \cdot D_p + \frac{e^2 \cdot N_a \cdot D_p}{\varepsilon \cdot KT} \right] \cdot Z_d \cdot \exp(-\alpha \cdot Z_d^2)$$

$$d_2 = -\sqrt{\alpha} \cdot D_p - c_2 \cdot F(\sqrt{\alpha} \cdot Z_d)$$

En utilisant les équations faisant intervenir les constantes aux limites (§ III.4.4), 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 :

$$\gamma_n = -\frac{1}{2 \cdot L_n} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\alpha_n = -\gamma_n \cdot \left[H_n - G_n - \frac{L_n}{D_n} \cdot J_b^0 \right]$$

$$\gamma_p = \frac{c_1 - c_2 + \gamma_n \cdot d_1}{d_2}$$

$$\alpha_p = \frac{d_1 \cdot \alpha_n - (G_n - G_p) \cdot c_2}{d_2}$$

$$G_n = \int_0^{Z_d} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot \frac{1}{2 \cdot D_n} \cdot \text{erf}[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)] G(z') dz'$$

$$G_p = \int_0^{Z_d} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \frac{1}{D_p} \cdot F[\sqrt{\alpha}(z' - Z_d)] G(z') dz'$$

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 :

$$u_d = \frac{\rho}{R} \cdot Z_d, \quad w = \frac{R}{\rho \cdot L_n}$$

A partir de l'équation (2.31f), 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 :

$$L = L_1 + L_2 + L_3, \quad M = M_1 + M_2$$

$$L_1 = b_1 \cdot \alpha_n (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) + (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] + (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot p_0 \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot n_0 \cdot s$$

$$L_2 = (c_1 + d_1 \cdot \gamma_n) \{ b_1 \cdot \gamma_n \cdot \tau_p \cdot s + [a_2 \cdot (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot \tau_n \cdot s + [(n_0 + n_t) \cdot \tau_p + (p_0 + p_t) \cdot \tau_n] s^2 \}$$

$$L_3 = (d_1 \cdot \alpha_n) [(a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot \tau_p \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot \tau_n \cdot s]$$

$$M_1 = b_1 \cdot \gamma_n [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] + b_1 \cdot \alpha_n \cdot p_0 \cdot s + [a_2 (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot n_0 \cdot s$$

$$M_2 = (d_1 \cdot \alpha_n) \{ b_1 \cdot \alpha_n \cdot \tau_p \cdot s + [a_2 \cdot (G_n - G_p) + b_2 \cdot \alpha_p] \cdot \tau_n \cdot s + [(n_0 + n_t) \cdot \tau_p + (p_0 + p_t) \cdot \tau_n] s^2 \}$$

$$K = (a_1 + b_1 \cdot \gamma_n)(a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) + (c_1 + d_1 \cdot \gamma_n) [(a_1 + b_1 \cdot \gamma_n) \cdot \tau_n \cdot s + (a_2 + b_2 \cdot \gamma_p) \cdot \tau_n \cdot s]$$

Avec :

$$s = \pi \left(\frac{R}{\rho} \right)^2$$

La solution de cette équation est :

$$\theta_{n1} = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4 \cdot K \cdot M}}{2 \cdot K}$$

$$\theta_{n2} = \frac{-L - \sqrt{L^2 - 4 \cdot K \cdot M}}{2 \cdot K}$$

La solution valable pour l'utilisation dans notre étude est :

$$\theta_n = \theta_{n1} = \frac{-L + \sqrt{L^2 - 4 \cdot K \cdot M}}{2 \cdot K}$$

Contribution to the theoretical study of the cathodoluminescence in p-CdTe

Influence of the different physical parameters of surface and volume

Abstract

The work of this thesis concerns the theoretical study of the cathodoluminescence in the p type CdTe semiconductor.

A physical calculation model of the catholuminescence intensity is proposed; it is based on the phenomena analysis of the surface and of the bulk of the material due to electron beam bombardment.

The continuity equation of both of minority and majority carriers is solved in the depletion and neutral regions.

A self-consistent calculation model is suggested in order to determine the width of the depletion region and the excess carriers concentration at the semiconductor surface.

The results of the study have shown that the intensity of the cathodoluminescent signal depends on parameters of the electron incident (incident energy E_0 and incident current intensity I_p), parameters of the surface (depletion region width Z_d , surface states density N_t and their associated levels E_t) and parameters of the bulk (diffusion length of minority carriers L_n , absorption coefficient α and the doping concentration N_a).

The behaviour of the depletion region has been also studied; we have analyzed the influence of beam, surface and bulk parameters on the width of this region.

Key Words: cathodoluminescence, CdTe, depletion region, surface defects, electron-hole pairs, model.

مساهمة في الدراسة النظرية للتألق المهبطي في نصف الناقل CdTe نوع P

تأثير مختلف المعاملات الفيزيائية السطحية والحجمية

ملخص

يتعلق العمل المنجز في هذه الأطروحة بدراسة نظرية للتألق المهبطي في نصف الناقل CdTe من النوع P.

من أجل ذلك اقترحنا نموذج فيزيائي لحساب شدة التألق المهبطي، يعتمد على تحليل ظواهر سطح و حجم المادة الناتجة عن القذف بواسطة حزمة إلكترونات.

لقد تم حل معادلة الإستمرارية لكل من نوعي الحاملات في المنطقة المجردة و المنطقة المحايدة. كما افترضنا طريقة الحساب الذاتي من أجل تعيين عرض المنطقة المجردة وتركيز الحاملات المضافة على سطح الناقل.

بينت نتائج الدراسة أن شدة إشارة التألق المهبطي تتعلق بمعاملات الحزمة الإلكترونية (الطاقة الواردة E_0 وشدة التيار الوارد I_p) و بمعاملات السطح (عرض المنطقة المجردة Z_d وكثافة حالات السطح N_t و المستويات المرفقة لها E_t) وكذا معاملات الحجم (طول إنتشار الحاملات الأقلية L_n و معامل الإمتصاص الضوئي α وتركيز التطعيم N_a).

لقد درسنا أيضا تصرف المنطقة المجردة؛ قمنا بتحليل تأثير معاملات الحزمة ومعاملات السطح وكذا معاملات الحجم على عرض هذه المنطقة.

كلمات مفتاحية: التألق المهبطي، CdTe، المنطقة المجردة، عيوب السطح، أزواج إلكترون-ثقب، أنموذج.

Contribution à l'étude théorique de la cathodoluminescence dans p-CdTe

Influence des différents paramètres physiques de surface et de volume

Résumé

Le travail entrepris dans cette thèse concerne l'étude théorique de la cathodoluminescence dans le semiconducteur p-type.

Un modèle physique de calcul de l'intensité de cathodoluminescence est proposé ; il est basé sur l'analyse des phénomènes de surface et de volume du matériau dus au bombardement par un faisceau d'électrons.

L'équation de continuité des deux types de porteurs est résolue à la fois dans la région déplétée et la région neutre.

Une méthode de calcul self-consistent est suggérée pour déterminer la largeur de la zone déplétée et la concentration des porteurs en excès à la surface du semiconducteur.

Les résultats de l'étude ont montré que l'intensité du signal cathodoluminescence dépend des paramètres du faisceau électronique (énergie incidente E_0 et intensité du courant I_p), des paramètres de surface (largeur de la zone déplétée Z_d , densité des états de surface N_t et leur niveaux associés E_t) et des paramètres de volume (longueur de diffusion des porteurs minoritaires L_n , coefficient d'absorption α , et concentration de dopage N_a).

Le comportement de la zone déplétée a également été étudié ; on a analysé l'influence des paramètres du faisceau, de la surface et du volume sur la largeur de cette zone.

Mots Clés : Cathodoluminescence, CdTe, zone déplétée, défauts de surface, paires électron-trou, modèle.