

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE**

**FACULTE DES SCIENCES**

**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :

Série :

**MEMOIRE**

PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER

SPECIALITE : SCIENCES DES MATERIAUX

OPTION

**SEMICONDUCTEURS**

Titre :

L'effet de la température dans la technique Cathodoluminescence  
par la méthode Monte Carlo

PAR

**BELABED NAOUEL**

Soutenu le :

Devant le jury :

Président :	M-S. Aida	PR	Université Mentouri Constantine
Rapporteur :	A. Nouri	MC	Université Mentouri Constantine
Examineurs :	A. Bouabellou	PR	Université Mentouri Constantine
	K. Mirouh	MC	Université Mentouri Constantine

## Remerciements

Le présent travail a été réalisé au laboratoire de physique et chimie des semiconducteurs (LPCS) à l'université Mentouri Constantine, sous la direction de Monsieur Nouri Abdelkader.

Je tiens à témoigner à Monsieur **Abdelkader Nouri**, Maître de Conférence à l'université Mentouri Constantine dem'avoir confié et dirige ce travail. Grâce à ses conseils toujours sûrs et son soutien constant, il m'a beaucoup apporté et a pris une part essentielle dans la réalisation de ce travail.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Monsieur **M-S. Aida** Professeur à l'université Mentouri Constantine d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire .

Je tiens à remercier Monsieur **A.Bouabellou**, Professeur à l'université Mentouri Constantine, qui a bien voulu accepter de participer au jury.

Je tiens aussi à remercier Monsieur **K.Mirouh**, Maître de conférence à l'université Mentouri Constantine, qui a bien voulu accepter de participer au jury.

Enfin, je remercie tous ceux qui ont contribué à l'ambiance chaleureuse de notre laboratoire.

Je tiens aussi à remercier toutes mes amies pour l'aide qu'ils ont portée durant la réalisation de ce travail.

Il m'est très agréable d'exprimer mes chaleureux remerciements à toute ma famille pour l'encouragement et le soutien moral et matériel, ainsi qu'à tous ceux qui m'ont aidée de près ou de loin.

## *Dédicaces*

*A ma chère mère.*

*A mon cher père.*

*A mes frères lakhdar, Tarek, abdelrahmen, okba.*

*A toute ma famille.*

*A toutes mes amies.*

*Et enfin, à tous ceux qui m'ont aidée à réaliser ce travail.*

*Je dédis ce travail ....*

# Sommaire

<u>Titres</u>	<u>pages</u>
<b>Introduction</b> .....	1
<b>CHAPITRE I :PRINCIPE DE LA TECHNIQUE CATHODOLUMINESCENCE</b>	
<b>I.1 - introduction</b> .....	3
<b>I.2 - Cathodoluminescence</b> .....	3
<b>I.2.1</b> Interaction électron- matière.....	5
<b>I.2.1.1</b> - parcours électronique.....	8
<b>I.2.2.2</b> - volume de génération.....	9
<b>I.2.2</b> - La dissipation et transfert de l'énergie au sein du matériau.....	10
<b>I.2.2.1</b> - Energie de formation d'une paire é-h .....	11
<b>I.2.2.2</b> - Taux de génération locale.....	11
<b>I.2.2.3</b> -Estimation de la densité de porteurs en excès.....	12
<b>I.3 - Phénomène de recombinaison</b> .....	12
<b>I.3.1</b> - Les processus de recombinaison .....	13
<b>I.4 - application de la CL</b> .....	16
<b>I.5 - Phonon et vibration du réseau</b> .....	18
<b>I.6- l'arséniure de gallium GaAs</b> .....	20
<b>I.6.1</b> - structure cristalline.....	20
<b>I.6.2</b> - Structure de bande.....	21
<b>I.6.3</b> – application .....	22
<b>I.7 - la méthode monte Carlo</b> .....	24
<b>I.7.1</b> - Définition .....	24
<b>I.7.2</b> - Application .....	25
<b>a</b> - Interaction Electron- Matière.....	25
<b>b</b> - La marche aléatoire .....	25
<b>CHAPITRE II : MODELISATION.</b>	
<b>II.1 – Introduction</b> .....	27
<b>II.2 - L'ancienne version du modèle analytique</b> .....	28

<b>II.3 - Modification du modèle analytique</b> .....	30
<b>II.3.1 - Dépendance de la luminescence de la température</b> .....	30
<b>II.3.2 - Ecriture des paramètres du matériau en fonction de température</b> .....	31
<b>a- La bande interdite (<math>E_g</math>)</b> .....	31
<b>b - La concentration intrinsèque</b> .....	31
<b>c - La longueur de diffusion</b> .....	32
<b>II.3.3 - Introduction de l'influence de <math>\Delta T</math></b> .....	33
<b>II.4 – Modèle proposé</b> .....	36
<b>II.4.1 - Détail du modèle</b> .....	37
<b>II.4.2 - Séquence de calcul</b> .....	39
<b>II.4.3 - Programme de simulation</b> .....	43
<b>II.4.4 - Organigramme</b> .....	45

## CHAPITRE III : RESULTATS ET DISCUSSION

<b>III.1 - Introduction</b> .....	46
<b>III.2- Influence des paramètres du faisceau(<math>I_p, E_0</math>) sur le volume d'interaction</b> .....	47
<b>III.2.1 - Influence de <math>E_0</math></b> .....	47
<b>III.2.2 - Influence de <math>I_p</math></b> :.....	50
<b>III.3 - Distribution de <math>\Delta T</math> en fonction de la profondeur de pénétration</b> ..	52
<b>III.3.1 - Influence de l'intensité du faisceau <math>I_p</math> sur la variation de <math>\Delta T</math></b> .....	54
<b>III. 3.2 - influence de l'énergie d'accélération sur la variation de <math>\Delta T</math></b> .....	55
<b>III. 3.3 - Influence du diamètre de faisceau sur <math>\Delta T</math></b> .....	56
<b>III.4 - Le signal de la cathodoluminescence</b> .....	57
<b>III.4.1 - Influence de <math>\Delta T</math> sur le signal de la cathodoluminescence</b> .....	58
<b>III.4.2 - comparaison avec l'expérience</b> .....	61
<b>Conclusion</b> .....	62
<b>Références</b> .....	63

# **Introduction**

## Introduction :

L'industrie a des besoins croissants en matériaux performants à caractéristique bien définie. Ces besoins ont suscité le développement de méthodes d'études et de contrôle de plus en plus sophistiquées basées sur l'interaction de divers rayonnements avec la matière. Les rayonnements qui s'y présentent le mieux sont les électrons car ils sont faciles à produire, à accélérer et à focaliser. Dans ce cadre on parle de la cathodoluminescence, qui a été utilisée depuis longtemps dans les dispositifs comportant des écrans fluorescents (tube cathodique, microscope électronique, etc).

Ce phénomène consécutif à l'excitation des matériaux luminescents par un faisceau électronique qui conduit à l'émission de photon. Cette dernière est soumise aux lois de la transition. On distingue généralement la luminescence intrinsèque (transition bande à bande ou fondamentale, exciton libre) et la luminescence extrinsèque relatives aux impuretés et défauts (exciton lié à un donneur ou à un accepteur, transition bande-niveau et transition niveau-niveau).

Pour identifier les propriétés des matériaux il faut faire une analyse spectrale sur le photon émis. Notamment dit que dans la pratique, le photon émis par l'échantillon est analysé par un spectromètre associé à un système de détection. La analyse du photon peut avoir lieu directement sous forme d'une intensité de courant électrique, aussi bien que le spectre reçu par le système de mesure est représenté par une fonction  $I(\lambda)$ . Mais dans la simulation, on exploite le fait que le photon émis est soit dû à la recombinaison des porteurs créés pendant l'excitation (transition électronique entre la bande de conduction et la bande de valence, et les niveaux situés dans le gap du semi-conducteur). Et on remplace le spectromètre par un système de langage fortran qui fait le comptage de nombres de paires (électron-trou) créés au cours des trajectoires aléatoires des électrons dans un échantillon pour calculer l'intensité de CL en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$ ;  $I_{CL}(E_0)$ . Il s'agit d'effectuer, à l'aide du modèle désigné, des expériences artificielles permettant de restituer des valeurs pour certaines variables qui soient conformes aux lois de probabilité observées dans un cas réel.

Le modèle de calcul de l'intensité de cathodoluminescence qui a été proposé par Nouiri et al [13, 18, 19, 22, 23] néglige l'influence de la température sur le signal CL et tous les calculs ont été faits à la température ambiante ( $T=300K$ ).

Dans la plupart de modèle de (CL), les chercheurs supposent que la température de l'échantillon est constante. Mais en réalité l'effet de l'irradiation a une grande importance dans le microscope électronique, en raison de l'interaction très intense entre les électrons et

la matière, ce qui illustre l'effet le plus spectaculaire (effet thermique). C'est l'effet le plus couramment observé et le plus gênant dans le cas de travaux sur des matériaux fragiles. Cet effet augmente avec l'intensité incidente du faisceau d'électrons. En général, on cherche à éviter l'erreur de fitting pour que les résultats d'analyse soient corrects.

Le modèle [11], développé précédemment, étudie l'influence de la température sur le signal (CL) mais ne tient pas compte de la variation de ( $\Delta T$ ) suivant la profondeur de pénétration. Dans ce travail, on va traiter le même problème (l'influence de la température due au faisceau électronique sur le signal de cathodoluminescence) mais cette fois on utilise une technique numérique appelée simulation de Monte Carlo en tenant compte la variation de  $\Delta T$  en fonction de Z (profondeur). Pour cela, on a réalisé un programme de simulation Monte Carlo qui suit la trajectoire électronique pas à pas.

La présente étude est organisée en trois chapitres :

Le premier chapitre concerne le concept théorique et les fondements physiques de l'interaction électron-matière, ainsi qu'une description générale de la méthode Monte Carlo.

Le deuxième chapitre contient les détails de notre modèle proposé, c'est l'intérêt majeur de ce mémoire. A la fin de ce chapitre le lecteur trouvera l'organigramme qui est la représentation synthétique des diverses parties du programme Fortran.

Le dernier chapitre comporte nos résultats de calcul qui décrivent l'influence de la température sur le signal CL.

# **Chapitre I**

## **Principe de la technique cathodoluminescence**

## **I.1 - introduction :**

Les semi-conducteurs présentent une bande d'énergie interdite entre la bande de valence et la bande de conduction ; de l'ordre de l'électron-volt. Un faisceau d'électron incident d'énergie suffisante peut faire passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction, produisant ainsi des paires d'électrons -trous ; le retour à l'état fondamental peut se faire par des transitions non radiatives avec dégagement de chaleur ou par des transitions radiatives avec émission de photon lumineux. Ce retour s'effectue par deux mécanismes (recombinaison directe et recombinaison indirecte).

Dans ce chapitre, on va faire un rappel sur les notions fondamentales et les principes de l'interaction électron-matière ainsi que le phénomène de recombinaison.

## **I.2 - Cathodoluminescence :**

Lorsque l'émission de lumière a lieu sous l'effet d'un faisceau d'électrons incident, on parle de cathodoluminescence, dont les applications sont les écrans des tubes cathodiques (tels que l'oscilloscope, la TV, l'ordinateur, les scintillateurs pour détecteurs d'électrons, etc).

Les photons émis sont les résultats des transitions électroniques entre la bande de conduction et la bande de valence et les niveaux situés dans le gap du matériau.

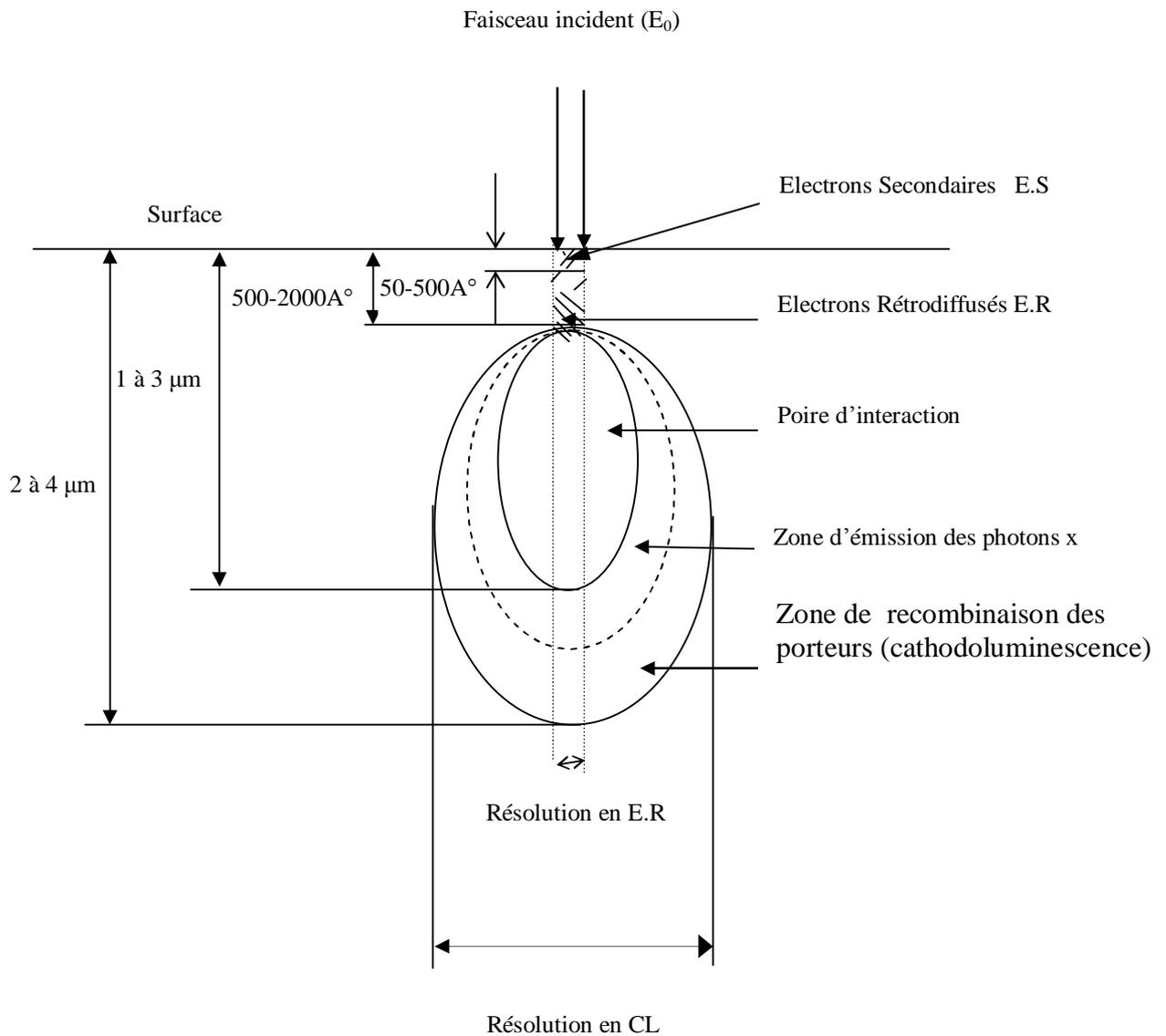
Le signal CL est formé par la détection des photons dans le domaine de l'UV, le visible et l'IR.

Elle est particulièrement utile pour l'étude du semi-conducteur (Dussac, 1985) [29].

Ces études ont besoin d'un développement important de l'image et de l'analyse spectrale.

Les dimensions du volume à l'intérieur duquel un élément peut être localisé c'est-à-dire d'où proviennent les photons de (CL) sélectionnés pour l'analyse.

- 1- La région de perte d'énergie élevée ( $\Delta E > 50 \text{eV}$ ) correspondant à l'excitation des niveaux profonds K, L .... donne naissance par désexcitation aux rayonnements caractéristiques X et Auger.
- 2- La région de perte d'énergie faible ( $\Delta E < 50 \text{eV}$ ) correspond à l'excitation des niveaux de valence et de conduction (photon CL) .



**Figure (I.1) :** Résolution spatiale[34].

Les mécanismes les plus importants dans l'analyse de CL dans les semi-conducteurs sont :

- l'interaction électron -solide.
- la dissipation d'énergie.
- la génération des porteurs (é-h).

### **I.2.1 - Interaction électron- matière :**

L'interaction globale des électrons avec la matière est beaucoup plus importante que celle des rayons X. L'électron transporte son énergie sous forme d'énergie cinétique non quantifiée qu'il peut céder par quantités aléatoires, dans des interactions successives, ce qui augmente considérablement la section efficace d'interaction.

Lorsque le faisceau d'électrons accélérés entre en collision avec le matériau de l'échantillon, les électrons incidents subissent du point de vue énergétique des chocs inélastiques ou élastiques avec les atomes qui composent le matériau, c'est à dire avec ou sans perte d'énergie.

#### **a- Interaction élastique :**

L'interaction élastique est de type électron-noyau dont l'énergie transférée est de l'ordre de  $10^{-1}$  eV et elle est à l'origine des électrons rétrodiffusés d'énergie élevée, proche de celle des électrons primaires. La fraction de ces électrons rétrodiffusés est d'autant plus grande que le numéro atomique du semi-conducteur est élevé. Les atomes sont soumis à des oscillations autour de leur position d'équilibre. L'interaction peut avoir lieu par excitation de vibrations individuelles des atomes (effet de Debye) ou par excitation d'oscillations collectives, aux états d'énergie quantifiés appelés phonon. La vibration des atomes se traduit par un dégagement de chaleur. Cet effet est utilisé industriellement dans les fours à bombardement électronique. C'est un phénomène parasite dans les appareillages à faisceau intense d'électrons, par exemple dans les tubes à rayon X et les microscopes électroniques.

#### **b- Interaction inélastique :**

lorsque la distance d'interaction est du même ordre de grandeur que le rayon de l'atome, l'action du nuage électronique de ce dernier l'emporte. Il y a interaction électron-électron. Comme la masse des particules est du même ordre, le transfert relatif d'énergie est appréciable. La structure et l'énergie interne de l'atome sont modifiées. La dispersion inélastique (avec perte d'énergie) donne des signaux utiles tels que :

- les émissions électroniques relatives à des électrons de très faible énergie (typiquement 5 à 10 eV), que l'on appelle « secondaires ». A ces électrons il convient d'ajouter des électrons possédant une énergie spécifique que l'on peut associer à la présence de certains éléments dans la cible, ce sont les électrons Auger.
- les rayonnements électromagnétiques, principalement constitués de rayons X (excitation de niveaux profonds), répartis entre une émission continue (le « fond continu » ou

« rayonnement de freinage ») et un spectre de raies caractéristiques des éléments présents dans la cible. Pour les matériaux isolants ou semi-conducteurs, on observe également un rayonnement électromagnétique de faible énergie, situé dans le visible : c'est le rayonnement de cathodoluminescence.

-les effets d'échauffement.

Ces interactions peuvent être utilisées pour former une image si l'on possède le détecteur qui permettra de capter le résultat de l'interaction (figure I.3).

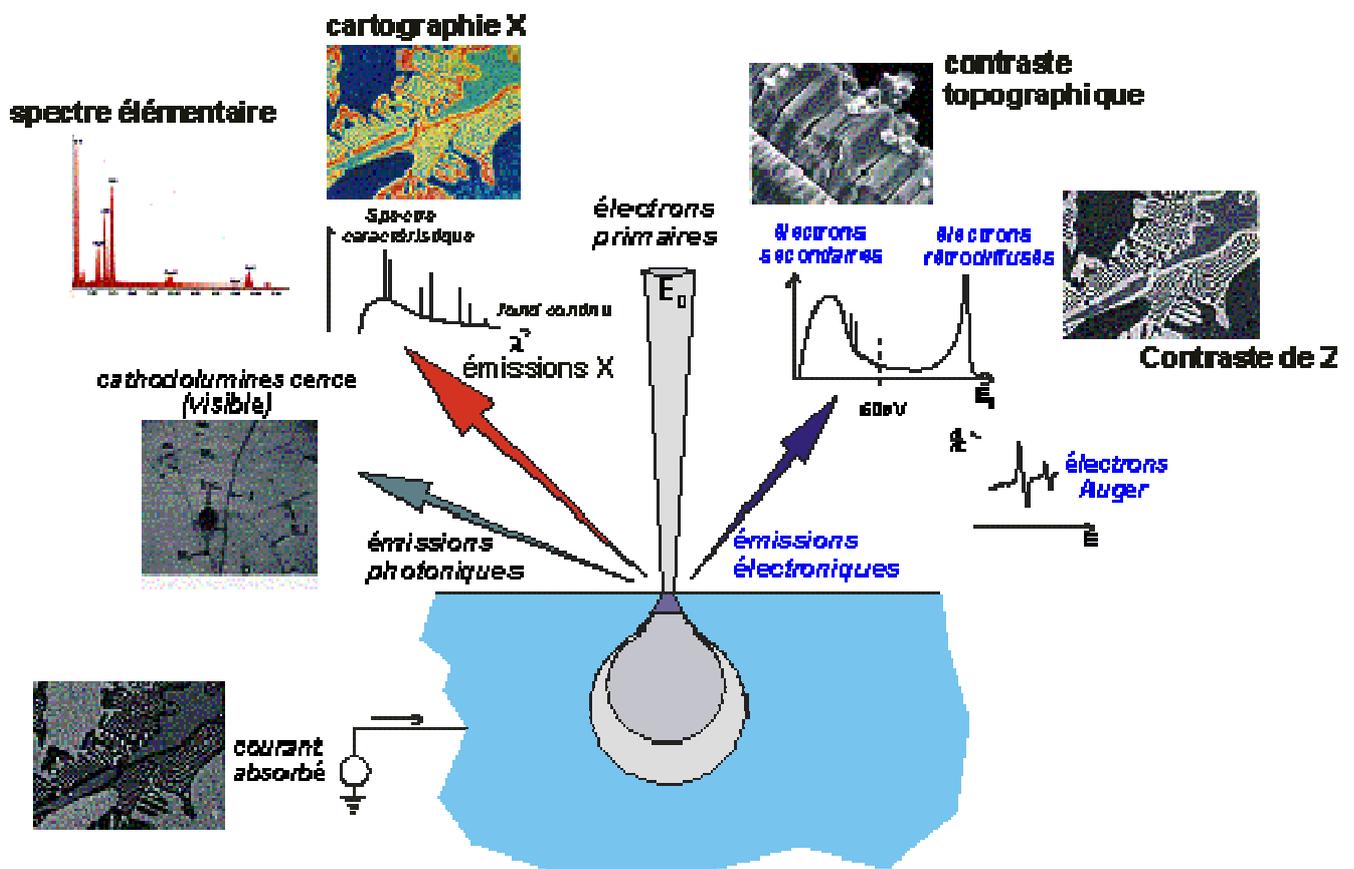
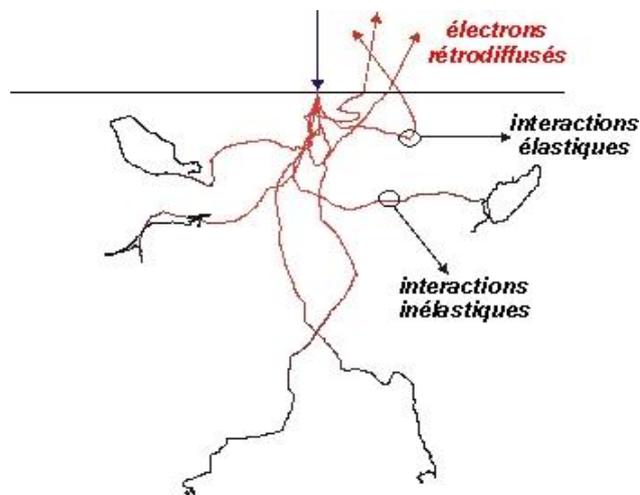


Figure (I.3) : Interactions inélastiques : ionisation et émissions caractéristiques

Origine de ces émissions :

Lorsqu'un électron pénètre dans la cible, il subit de nombreuses interactions inélastiques (c'est à dire avec transfert d'énergie) avec les électrons appartenant aux orbitales atomiques. Ces transferts d'énergie conduisent à une perte progressive de l'énergie de l'électron primaire (et donc à son ralentissement), jusqu'à ce qu'il soit absorbé par la cible.

Au sein de l'atome, cet apport d'énergie se traduit généralement par l'ionisation d'un niveau atomique provoquant l'émission d'un électron (qualifié de « secondaire »), le plus souvent situé sur un des niveaux de valence et donc possédant une très faible énergie cinétique (en moyenne 5 à 10 eV). Le retour à l'équilibre de l'atome ionisé sera accompagné d'une émission, soit électromagnétique (transition radiative, principalement constituée par un spectre de rayons X), soit électronique (transition Auger). Ces deux émissions sont caractéristiques de la composition chimique locale de la cible.



**Figure (I.4) :** Trajectoire électronique simulée par la méthode Monte Carlo.

### I.2.1.1 - Parcours électronique :

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersions élastiques et inélastiques dans le semi-conducteur, et ont alors des trajectoires aléatoires (figure I.4). Leur profondeur de pénétration ( $R_e$ ) est donnée par plusieurs expressions :

La relation générale de parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie du faisceau incident  $E_0$  sous la forme suivante [ 1 ] :

$$R_e = \left[ \frac{K}{r} \right] E_0^a \quad (\text{I.1})$$

où  $r$  est la densité du matériau.  $a$ ,  $K$  dépendent du nombre atomique du matériau et aussi de l'énergie  $E_0$ .

D'autres formules ont été également proposées par d'autres auteurs :

En 1957, les travaux de Gruen ont conduit à un parcours électronique donné par [14] :

$$R_G = 4.57 E_0^{1.75} \quad (\text{I.2})$$

où  $R_G$  est exprimé en  $\text{g}/\text{cm}^2$  et  $E_0$  est exprimé en keV, ( $5 < E_0 < 25 \text{KeV}$ ).

En 1971, Everhart et Holf propose de leur part pour les matériaux qui ont un numéro atomique  $Z$  tel que  $10 < Z < 15$  et pour des énergies d'excitation  $E_0$  tel que  $5 < E_0 < 35$  (keV) la relation suivante [15] :

$$R_{EH} (\mu\text{m}) = (0.0398/\rho) E_0^{1.75} \quad (\text{I.3})$$

$\rho$  est exprimé en  $\text{g}/\text{cm}^3$  et  $E_0$  en keV.

Une autre relation plus générale a été dérivée par Kanaya et Okayama en 1972 sous la forme suivante [2] :

$$R_e (\mu\text{m}) = \left( \frac{0.0276A}{rZ^{0.889}} \right) E_0^{1.67} \quad (\text{I.4})$$

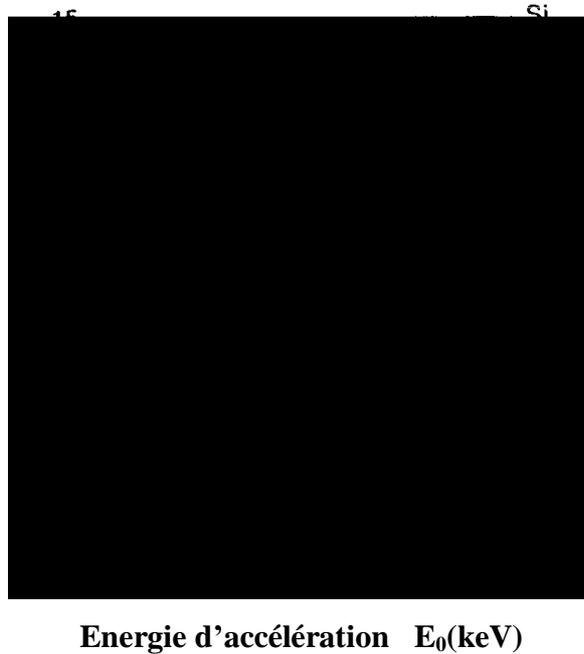
où  $E_0$  est en keV,  $A$  est le poids atomique,  $\rho$  est en  $\text{g}/\text{cm}^3$ , et  $Z$  est le numéro atomique.

La figure(I.5) montre la comparaison entre le parcours électronique calculé suivant le modèle de Everhart- Hoff et le modèle de Kanaya-Okayama pour quelques matériaux.

Une relation dérivée par Wittry et Kyser [16] est utilisée pour déterminer la longueur de diffusion dans le GaAs à partir de la variation de l'intensité de la cathodoluminescence CL

en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  :

$$R(\text{g/cm}^2) = 2.56 \cdot 10^{-3} \left( \frac{E_0}{30} \right)^{1.7} \quad (\text{I.5})$$



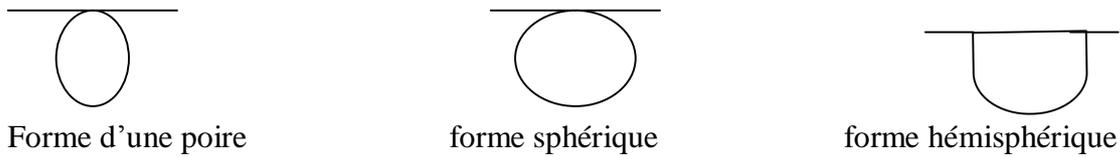
**Figure (I.5) :** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de  $E_0$  [17]

### I.2.2.2 - Volume de génération :

Le volume de propagation des électrons est l'enveloppe des trajectoires des électrons jusqu'à leur arrêt total. Ce volume est le lieu de création des paires (é-h). Il prend une forme hémisphérique ou une cruche avec un cou à la surface d'interaction qui dépend du nombre atomique du matériau  $Z$  et de  $E_0$ .

Suivant le modèle de Kanaya-Okayama[2], le volume de génération prend trois formes différentes, suivant la valeur de  $Z$  (figure I.6) :

- |               |                       |
|---------------|-----------------------|
| $Z < 15$      | forme en poire        |
| $15 < Z < 40$ | formes sphériques     |
| $Z > 40$      | formes hémisphériques |



**Figure (I.6) :** Formes du volume de génération [2]

### I.2.2 - Dissipation et transfert de l'énergie au sein du matériau :

Les images de cathodoluminescence sont obtenues dans un microscope électronique à balayage (MEB) par balayage du faisceau électronique sur la surface analysée. Nous allons nous intéresser à la façon dont l'énergie des électrons incidents se dépose dans le solide (poire d'interaction électron- matière) ainsi qu'aux différents processus de transfert d'énergie.

Les électrons incidents subissent des chocs inélastiques ou élastiques avec les atomes qui composent le matériau, c'est-à-dire avec ou sans perte d'énergie. La diffusion élastique peut être décrite par le modèle de Rutherford, lequel donne pour la section efficace correspondant à un angle de diffusion supérieure à  $q$  la relation suivante [31] :

$$s_e(>q) = 1.62 \cdot 10^{-20} \frac{Z^2}{E^2} \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{q}{2}} \quad (\text{formule de Rutherford}) \quad (\text{I.6})$$

Où  $Z$  est le numéro atomique de l'atome mis en cause et  $E$  est l'énergie de l'électron incident.

Le traitement théorique de la dissipation d'énergie, en fonction de la pénétration, est effectué d'après des modèles simplifiés. Une relation classique est celle de BETHE (1933), déduite de la mécanique quantique et basée sur l'interaction avec les électrons individuels des atomes . Elle s'écrit en fonction de chemin parcouru de l'électron  $S$  comme suit [15].

$$\frac{dE}{dS} = -2pe \cdot N_a \frac{r \cdot Z}{E \cdot A} I_n \left( \frac{1.66E}{J} \right) \quad (\text{Formule de Bethe}) \quad (\text{I.7})$$

où  $p$  est la densité du solide,  $N_a$  le nombre d'Avogadro,  $J$  le potentiel moyen d'ionisation et  $A$  la nombre de masse de l'élément. Cette équation est valable pour des énergies de l'électron primaire  $E > J$ .

La trajectoire des électrons et la zone de dissipation de l'énergie dans la matière peuvent être modélisées par l'intermédiaire de ces deux équations. Généralement, on utilise une technique numérique appelée simulation de Monte carlo. Cette simulation consiste à calculer numériquement les déplacements de plusieurs électrons dans la matière.

### **I.2.2.1 - Energie de formation d'une paire é-h :**

Cette énergie est définie comme étant une énergie moyenne dissipée pour créer une paire é-h. Dans la plupart des cas elle est considérée comme l'énergie ionisation qui est donnée par la relation suivante [4] :

$$E_i = 2.8E_g + M \quad (I.8)$$

$0 < M < 1$  eV dépend du matériau et est indépendant de l'énergie du faisceau  $E_0$ ,  $E_g$  est le gap.

### **I.2.2.2 - Taux de génération locale :**

La fonction de génération locale représente le nombre des paires (é-h) générées par un électron d'énergie  $E$  par unité de longueur et par unité de temps. Dans la plupart des applications, la connaissance de fonction de génération des porteurs est importante.

Il existe trois approximations qui sont utilisées pour déterminer la fonction de dissipation d'énergie [5] :

L'approximation de point source, l'approximation de la sphère uniforme, et l'approximation de la gaussienne modifiée qui est la plus utilisable dans la littérature. Cette

Dernière donnée par Kyser en 1972, où la fonction de dissipation d'énergie  $\phi(u)$  prend l'expression finale suivante [6] :

$$\phi(u) = A \exp\left[-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \exp\left(-\frac{bu}{u_0}\right) \quad (I.9)$$

Où  $u = \rho z/R$ ,  $\rho$  est la densité de semi-conducteur en  $\text{g/cm}^3$ ,  $z$  est la profondeur en cm, et  $R$  est le parcours maximal d'électron en  $\text{g/cm}^2$ .

Les autres constantes sont calculées par Wu et Wittry pour le GaAs[7] :

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

Alors on peut écrire la fonction de génération locale  $g(z)$  sous la forme suivante [8]:

$$g(z) = \frac{r}{R} j(u) \quad (\text{I.10})$$

### I.2.2.3 -Estimation de la densité de porteurs en excès :

L'interaction inélastique entre un électron incident et un électron de l'atome du semi-conducteur crée une paire (é-h) (l'électron quitte son état lié dans la bande de valence vers un état libre dans la bande de conduction). Cette même paire peut à son tour générer une autre paire (é-h) etc.... Ce processus de cascade continue jusqu'à ce que le dernier électron secondaire ait une énergie cinétique inférieure à l'énergie d'ionisation.

Le facteur de génération (nombre de paires é-h créées par un électron incident d'énergie  $E_0$ ) est donné par [1 ]

$$G = \frac{E_0(1-d)}{E_i} \quad (\text{I.11})$$

où  $E_i$  est l'énergie d'ionisation,  $d$  présente la fraction d'énergie du faisceau dissipée due aux électrons retrodiffusés.

On suppose que la génération des paires (é-h) est uniforme. On peut estimer le nombre de porteurs générés  $N$  par unité de volume et par seconde lorsque les électrons incidents ont une tension d'accélération  $V_0$  et une intensité primaire  $I_p$  [ ] :

$$N = \frac{G}{V} = \frac{I_p V_0 (1-d)}{e E_i} \frac{1}{V} \quad (\text{I.12})$$

où  $V$  est le volume de génération des paires (é-h).

## I.3 - Phénomène de recombinaison :

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

Un excès d'électrons ou de trous par rapport à l'état d'équilibre entraîne l'augmentation du phénomène de recombinaison  $R$  pour ramener le système à son état d'équilibre.

$R$  : taux de recombinaison ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) : nombre de paires électron-trou disparues par unité de volume et par unité de temps.

La distance entre le point de création du porteur et le point de leur recombinaison (retour à l'état initial) s'appelle longueur de diffusion ( $L$ ). Le temps qui s'écoule pour effectuer

ce parcours s'appelle la durée de vie ( $t$ ).

La recombinaison, au sein d'un semi-conducteur, des électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes :

- Transition d'un électron de la bande de conduction ( $E_c$ ) vers la bande de valence ( $E_v$ ) (Recombinaison directe).

- Intermédiaire de centres de recombinaison. L'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successives. Tout d'abord, l'électron (le trou) est capté par un centre localisé (dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou (l'électron) qui se recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison indirecte).

La contribution de ces deux mécanismes au processus de recombinaison dépend :

- du rapport des probabilités de ces deux mécanismes,
- de la position en énergie des centres de recombinaison à l'intérieur de la bande interdite et de la concentration de ces centres,
- de la température.

### **I.3.1 - Processus de recombinaison :**

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

#### **1- La recombinaison radiative :**

Elle donne naissance à des photons (recombinaison radiative avec émission de lumière).

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

#### **1. a- La luminescence intrinsèque (bande-bande) :**

En ce qui concerne la probabilité d'un électron de se recombiner avec un trou par transition radiative, les semi-conducteurs peuvent être classés en deux catégories :

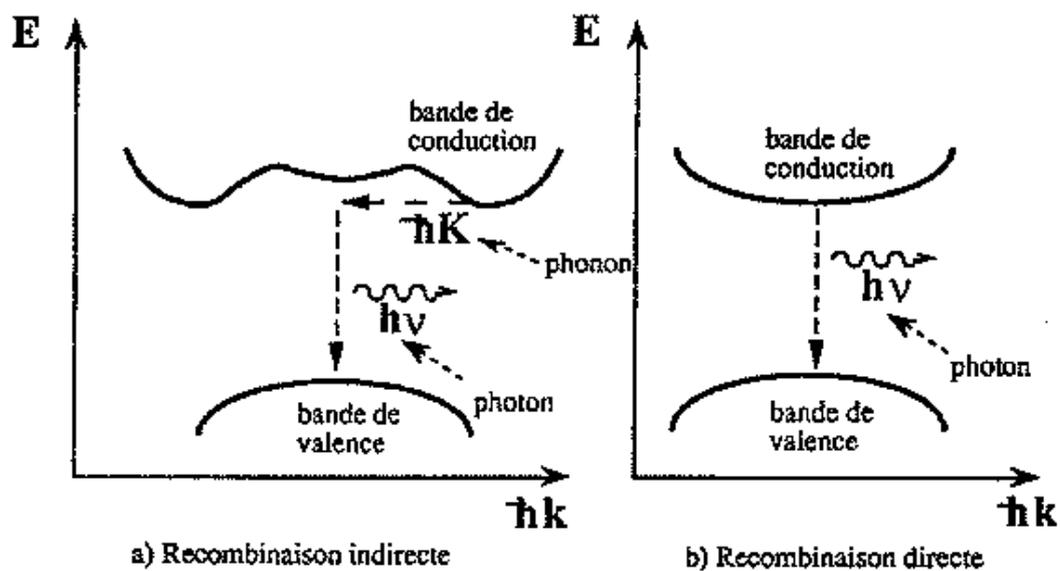
- les matériaux à « saut de bande direct », comme les alliages binaires et ternaires.
- les matériaux à « saut de bande indirect », comme Si et Ge.

**i) -Transition directe :** Dans ce cas, le point le plus bas de la bande de conduction est à la même valeur de  $K$  que le plus haut point de la bande de valence. Une transition optique directe (verticale) a lieu sans changement significatif de  $K$ . L'énergie du photon émis ( $h\nu$ ), dans ce cas, est égale (presque) à l'énergie du gap ( $E_g$ ) et la luminescence est dite intrinsèque. (Voir figure I.7)

**ii) - Transition indirecte** : Dans ce cas, l'extremum des bandes de valence et de conduction sont extrêmement éloignés dans l'espace  $K$ , la transition n'est plus verticale et fait intervenir deux quanta d'énergie

- Emission de photon pour la transition verticale.

- Emission de phonon pour la transition horizontale car la différence de quantité de mouvement entre les deux niveaux n'est pas négligeable. Pour satisfaire le principe de conservation des quantités de mouvement total du cristal, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule qui est le phonon de vecteur d'onde  $K$ . Le phonon exprime le choc ou la vibration mécanique du réseau. (Pour les transitions indirectes, la participation du phonon ( $E_{ph}$ ) est indispensable) (Voir figure I.7).



**Figure (I.7)** : Energies de transitions dans les semi-conducteurs à gap indirect (a) et gap direct (b)

### 1. b - La luminescence extrinsèque (bande-niveau) :

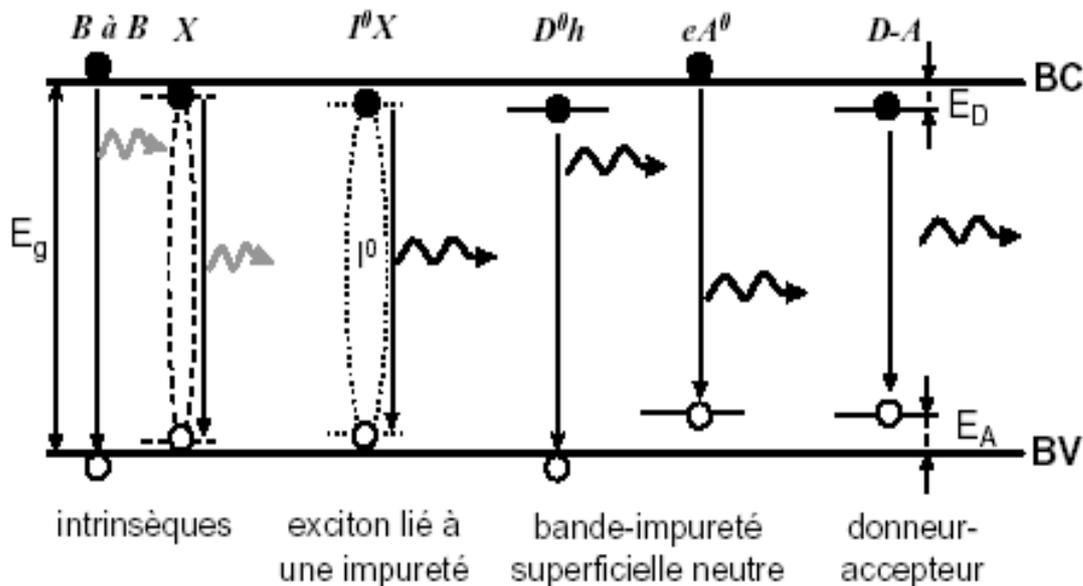
La luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et défauts (interstitiels, lacunes, dislocations). Certaines impuretés chimiques (Au dans Si, Cu dans GaAs) donnent des niveaux discrets d'énergie situés vers le milieu de la bande interdite (BI) : ce sont des niveaux profonds.

La figure (I.8) montre les différentes transitions radiatives possibles mettant en jeu aussi bien les niveaux superficiels que les niveaux profonds.

Quand un niveau profond capte un électron :

La probabilité de capturer un trou est plus importante que celle de renvoyer l'électron, elle va faire une recombinaison c'est donc un centre de recombinaison.

La probabilité de réémettre l'électron dans la bande de conduction existe, le niveau a simplement retenu le porteur pendant un certain temps ; c'est un piège. Ces transitions mettent en jeu des énergies plus faibles qu'une transition directe. Elles sont donc beaucoup plus probables qu'une transition bande à bande.



**Figure (L8) :** Illustration des processus de recombinaisons radiatives dans un semi-conducteur à bande interdite directe

## 2 - La recombinaison non radiative :

Les niveaux profonds dans le gap peuvent occasionner également des transitions non-radiatives, et donner lieu indirectement à un contraste. Il existe plusieurs mécanismes de recombinaison non radiative à titre d'exemple :

- La recombinaison par choc est telle que l'énergie libérée dans l'acte de recombinaison est transmise à un troisième porteur qui la dissipe ensuite par interaction avec les vibrations du réseau. Autrement dit, l'énergie se transforme en phonons (recombinaison non radiative) : dissipation de l'énergie sous forme thermique par échauffement du réseau cristallin).
- La recombinaison plastique est telle que l'énergie libérée est transmise aux oscillations du plasma de porteurs.

### **3 - La recombinaison Auger :**

L'énergie récupérée peut être cédée à un électron de la bande de conduction qui se trouve transféré à un niveau supérieur ou un trou de la bande de valence qui se trouve transféré à un niveau inférieur.

### **4- La recombinaison excitonique :**

C'est le couplage qui se produit à basse température entre l'électron et le trou pour donner une pseudo- particule <<exciton libre>>. Celui-ci peut être piégé sur une impureté (excitons piégé) en donnant naissance à de nouveaux niveaux d'énergie bien définis dans le gap.

## **I.4 – Application de CL :**

### **a) - La cathodoluminescence en mode image**

La cathodoluminescence permet de visualiser en mode image la répartition spatiale des niveaux responsables d'une transition radiative observée ou de localiser les défauts non radiatifs tels que les dislocations, les joints de grains et les précipités. Ces défauts donnent lieu généralement à un contraste fort. Il est possible de déterminer les niveaux d'énergie qui sont à l'origine de ce contraste. Donc, on utilise cette technique pour l'étude de la nature et de la répartition de défauts et d'impuretés dans les matériaux (Goni et Remond, 1969)[30].

### **b) - La cathodoluminescence en mode quantitative :**

On peut détecter le signal cathodoluminescence en mesurant l'intensité  $I_{cl}$  en fonction de paramètres du faisceau incident et à partir des mesures quantitatives des courbes  $I_{CL}(E_0)$  ou  $I_{CL}(I_p)$ . On peut dériver quelques paramètres physiques du matériau tels que la longueur de diffusion, la durée de vie des porteurs, le coefficient d'absorption, et la concentration des porteurs.

Le tableau (I.1) résume les applications de la CL pour la caractérisation des matériaux semi-conducteurs.

Nature des données	Information Obtenues
Distribution spatiale de la luminescence	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Homogénéité</li> <li>-Composition chimique</li> <li>-Schéma de réaction à l'interface</li> <li>-Schéma de dislocation</li> <li>-Profil de diffusion</li> </ul>
Intensité des luminescences	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Concentration des défauts</li> <li>-Longueur de diffusion</li> <li>-Vitesse de recombinaison en surface</li> <li>-Absorption de la lumière émise par le matériau</li> </ul>
Spectre de distribution de la luminescence	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Composition</li> <li>-Structure de bande</li> <li>-Caractérisation</li> </ul>
Energie d'excitation	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Densité des pièges</li> <li>-Effet de la température</li> <li>-Rendement des recombinaisons radiatives</li> </ul>

**Tableau (I.1) :** Application de CL pour la caractérisation des matériaux Semi-conducteurs [32].

**c - Comparaison de CL avec d'autres techniques :**

En ce qui concerne la simplicité de la préparation des échantillon, la CL est plus avantageuse que la technique du courant induit par le faisceau d'électron (EBIC). Car il suffit de polir la surface de l'échantillon pour la cathodoluminescence, par contre une barrière de Schottky ou une jonction p-n est exigée pour la technique (EBIC). De plus, pour les échantillons semi-isolants, la cathodoluminescence est mieux adaptée car il est exclu de les caractériser par la technique EBIC.

La comparaison de la cathodoluminescence avec les autres techniques de luminescence telle que la photoluminescence donnerait les mêmes résultats avec quelques différences

possibles associées aux processus d'excitation des paires électron-trou et le volume de génération. Ainsi, l'excitation par un faisceau d'électrons conduit en général à l'émission de photons par tous les mécanismes de luminescence présents dans l'échantillon : l'excitation n'est pas sélective. L'émission dans la photoluminescence peut dépendre fortement de l'énergie d'excitation donnant une information supplémentaire sur les mécanismes de luminescence. Toutefois, la dynamique des conditions d'excitation dans la cathodoluminescence, énergie d'accélération des électrons  $E_0$  et l'intensité du faisceau électronique  $I_p$ , représente un avantage important en plus de la haute résolution spatiale. Ainsi, l'excitation par un faisceau d'électrons permet d'avoir des informations plus détaillées en profondeur en faisant varier l'énergie d'accélération des électrons  $E_0$  et de séparer les phénomènes qui peuvent avoir lieu en surface de ceux en volume. Un avantage supplémentaire de la cathodoluminescence est l'utilisation des informations complémentaires obtenues dans le microscope électronique à balayage à partir des analyses par exemple d'électrons secondaires. Ces informations ne sont pas obtenues en photoluminescence.

#### **I.4 - Phonon et vibration du réseau :**

Un phonon est un quanta de mode de vibration 'paquet élémentaire de vibration' se produisant dans un réseau en cristal rigide, tel que le réseau atomique d'un solide. L'étude des phonons est une partie importante dans la physique du solide, parce qu'ils contribuent à plusieurs des propriétés physiques des matériaux, tels que :

- la capacité calorifique, ou capacité à stocker la chaleur ;
- la conductivité thermique, ou capacité à conduire la chaleur ;
- la conductivité électrique, ou capacité à conduire le courant électrique;
- la capacité à propager le son.

Les modes normaux de vibration d'un réseau sont indépendants si l'on peut appliquer la loi de Hooke. Chaque atome se comporte comme un oscillateur harmonique spatial ou trois oscillateurs harmoniques (1L+2T) linéaires. L'énergie  $E$  de chaque oscillateur linéaire est quantifiée  $E=(n+1/2)\hbar\omega$  avec  $n= 0,1,2,\dots$ . Ce qui signifie que sous l'action d'un agent extérieur ( température, photon, neutron, électron), chaque oscillateur peut gagner ou céder

de façon discrète un (ou plusieurs) quantum, appelé phonon, d'énergie  $\hbar\omega = hn$  et d'impulsion  $\hbar\mathbf{k}$  ( le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  n'est défini qu'à un vecteur  $\mathbf{G}$  du réseau réciproque près). Ainsi, un apport de chaleur au cristal se traduit par un accroissement de la population en phonons ou en d'autres termes un accroissement de l'énergie (et donc de l'amplitude) de vibration des atomes du réseau. De même, l'interaction d'un neutron ou d'un photon (absorption IR ou diffusion Raman) avec le réseau reportera sur la conservation de l'énergie et de l'impulsion du système formé par le photon et le phonon. On observera qu'à 0°K il subsiste une énergie de vibration résiduelle ( $1/2\hbar\omega$ ), conséquence du principe d'incertitude (Heisenberg), et que même à cette température absorbée les atomes ne sont pas immobiles.

L'énergie moyenne d'un oscillateur de fréquence  $\omega$  est  $\langle n \rangle \hbar\omega$ . Pour N oscillateurs alignés, ayant tous la même fréquence de résonance, l'énergie E est  $N\langle n \rangle \hbar\omega$ . Par conséquent, l'énergie d'un mode ne dépend que de sa fréquence  $\omega$  et de sa population en phonon n, et elle est indépendante de la population des autres modes.

En équilibre thermique à la température T, la population est donnée par la distribution de Plank ou de Bose-Einstein :

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)} - 1} \quad (\text{II .13})$$

$k_B$  est la constante de Boltzman

L'énergie moyenne est 
$$E = \frac{N\hbar\omega}{e^{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)} - 1}$$

la capacité calorifique de ces oscillateurs est égale à :

$$C_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = Nk_B \left( \frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/T)}{[\exp(\hbar\omega/T) - 1]^2} \quad (\text{II .14})$$

Pour les hautes températures, on a :

$$\begin{aligned} \hbar\omega < k_B T & \quad \text{Donc} \quad \langle n \rangle \approx k_B T / \hbar\omega \\ \text{Car} \quad e^{\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)} & \approx 1 + \left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) + \dots \end{aligned}$$

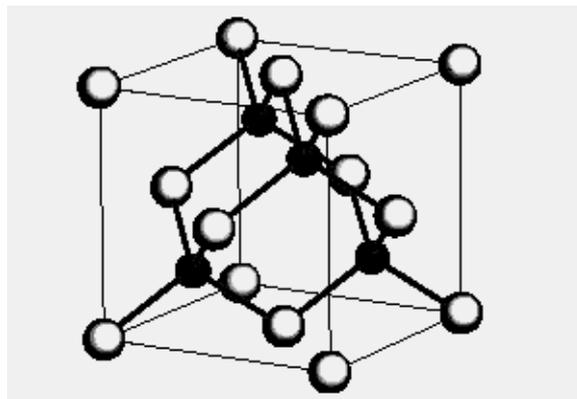
L'énergie moyenne est donc  $E=Nk_B T$

Ceci est approximativement valable même pour  $\frac{hw}{k_B T} \approx 1$

## I.5 - l'arséniure de gallium GaAs :

### I.5.1 - Structure cristalline :

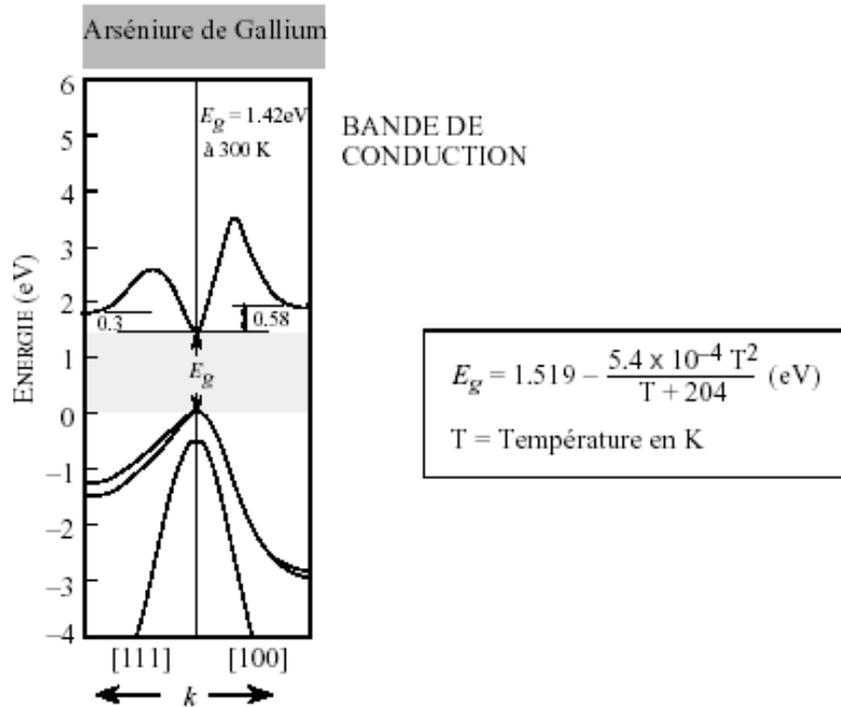
L'arséniure de gallium est un composé intermétallique semi-conducteur à hétéro structure du type III-V, cristallise dans une structure de type Zinc-blende (voire figure I.9). cette dernière est composée de deux réseaux CFC interpénétrant, l'un déplacé par rapport à l'autre d'une distance  $(a/4, a/4, a/4)$  le long de la diagonale. Le réseau de Bravais fondamental est cubique à faces centrées avec un motif constitué de deux atomes, un atome Ga et un atome As dans les positions  $(0,0,0)$  et  $(1/4,1/4,1/4)$  respectivement. C'est une structure analogue à celle du germanium et du silicium. La liaison entre deux plus proches voisins est de caractère ionique partiel et covalent partiel (la liaison est formée par deux électrons de spin différents). On dit que chaque atome d'arsenic (V) fournit un électron à un atome de gallium (III).



**Figure (I.9) :** Maille 'blende de zinc' de GaAs [35].

### I.5.2 - Structure de bande :

Le composé GaAs possède une bande interdite directe (Figure (I.10)). La transition d'énergie minimale entre ses deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect comme le silicium.



**Figure (I.10) :** Structure de bande d'énergie du GaAs dans les directions de haute symétrie. Le gap est 1,51eV à 0K et 1,43eV à 300K . Le fond de la bande de conduction est à  $k = (0.0.0)$  [36].

### **I.5.3 – application :**

La bande interdite directe du GaAs confère des propriétés d'absorption optique et de luminescence importantes susceptibles d'être exploitées en optoélectronique. La grande mobilité électronique (8600cm/V.s dans le matériau intrinsèque) et la faible mobilité des trous (250cm/V.s dans le matériau intrinsèque) permettent son utilisation pour les composants électroniques rapides tels que les transistors.

Ce composé est ainsi utilisé dans les redresseurs, les photoconducteurs et les diodes à laser. On obtient un laser à semi-conducteur en clivant une simple jonction p-n polarisée dans le sens direct, réalisée dans un matériau à saut de bande direct comme le GaAs .

Dans tous les cas, les matériaux de départ sont des monocristaux de GaAs de propriétés contrôlées.

Les dispositifs à hétéro structures III-V offrent des performances attractives, non seulement pour des applications militaires et spatiales, mais surtout pour de nombreuses applications commerciales.

autrement dit tous les dispositifs à hétéro structure III-V trouvent une technologie concurrente plus aisée à maîtriser

Le tableau (I.2) regroupe quelques propriétés importantes de l'arséniure de gallium (GaAs).

Nom	Symbole	Unités	Valeur
Structure cristalline			Zinc Blende
Paramètre cristallin	a	Å	5.63
Masse molaire	M	g. mole <sup>-1</sup>	144.63
Masse volumique	ρ	g.cm <sup>-3</sup>	5.32
Nombre d'atomes par unité de volume	N	cm <sup>-3</sup>	4.4 10 <sup>22</sup>
Hauteur de la Bande Interdite	E <sub>g</sub>	eV	1.42
Densité effective d'états dans la B.C	N <sub>c</sub>	cm <sup>-3</sup>	4.7 10 <sup>17</sup>
Densité effective d'états dans la B.V	N <sub>v</sub>	cm <sup>-3</sup>	7.0 10 <sup>18</sup>
Mobilité des électrons	μ <sub>n</sub>	cm <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup>	8.5 10 <sup>3</sup>
Mobilité des trous	μ <sub>p</sub>	cm <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup>	4.0 10 <sup>2</sup>
Vitesse de saturation des électrons	v <sub>sn</sub>	cm.s <sup>-1</sup>	
Vitesse de saturation des trous	v <sub>sp</sub>	cm.s <sup>-1</sup>	
Constante diélectrique relative	ε <sub>r</sub>		12.9
Champ de claquage	E <sub>av</sub>	kV.cm <sup>-1</sup>	3 10 <sup>2</sup>
Affinité électronique	χ <sub>s</sub>	eV	4.07
Coefficient de dilatation thermique	α <sub>t</sub>	K <sup>-1</sup>	6.86 10 <sup>-6</sup>
Chaleur spécifique	C	J.g <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>	0.35
Conductivité thermique	λ	W.cm <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>	0.46
Température de fusion	T <sub>f</sub>	° C.	1240

**Tableau (I.2) :** Données numériques de l'arséniure de gallium (GaAs) à 300 K

## **I.6 - La méthode Monte Carlo :**

Si l'on dispose à présent d'un choix d'algorithmes permettant d'obtenir des solutions analytiques ou mathématiques à nombreux problèmes « types », beaucoup de cas pratiques complexes ne peuvent néanmoins être résolus sans recourir à une simplification abusive conduisant à une dénaturation du problème. C'est là que les techniques de simulation interviennent, c'est à dire proposer, par une résolution numérique, une solution spécifique donnée pour laquelle une solution analytique générale ne pourrait être obtenue qu'au prix d'une simplification. L'une des caractéristiques de ces méthodes est d'inclure des éléments aléatoires dans les problèmes à simuler. Nombreuses techniques numériques sont itératives, c'est-à-dire que chaque étape de la résolution fournit une meilleure solution en utilisant les résultats des étapes précédentes. Quant à la simulation, elle représente une expérience dans le temps faite sur un modèle abstrait et implique la présence de variables aléatoires.

### **I.6.1 - Définition :**

La méthode de Monte-Carlo est définie comme toute technique numérique de résolution de problèmes mathématiques qui utilise des nombres aléatoires ou pseudo-aléatoires. On attribue la méthode de Monte-Carlo développée vers 1949 aux mathématiciens américains Johannes Von Neumann et Stanislas Ulam à la fin de la seconde guerre mondiale dans le but d'étudier les processus de diffusion (la simulation des réactions nucléaires) [ 39 ]. Ce n'est toutefois qu'avec l'avènement des ordinateurs que l'on a pu réellement utiliser cette méthode. En effet, la roulette est l'un des mécanismes les plus simples pour générer des nombres aléatoires.

La simulation par la méthode Monte Carlo est une expérience qui suppose la construction d'un modèle de travail mathématique présentant similitude. De cette façon, nous pouvons prévoir les caractéristiques de fonctionnement de ce système sans avoir à travailler avec des dispositifs physiques.

Qu'est ce qu'un nombre aléatoire? On appelle nombre aléatoire la réalisation d'une variable aléatoire distribuée uniformément dans un intervalle  $(a, b)$ . Une suite de nombres aléatoires est un échantillon issu de la loi uniforme  $U$ , c'est-à-dire la réalisation d'une suite de nombres aléatoires indépendants les uns des autres.

## **I.6.2 - Application :**

De très nombreux secteurs scientifiques et technologiques ont désormais adopté ce type d'approche connue sous le nom « méthode Monte Carlo ». C'est en fait la puissance accrue des ordinateurs qui a permis à ces méthodes de devenir opérationnelles et de se répandre dans des secteurs aussi variés que la physique, tels que la biologie moléculaire et génétique, les télécommunications, les réseaux, la recherche opérationnelle, la finance, et bien d'autres encore [26]. En voici deux exemples qui sont dans le domaine de la physique (MC sur l'interaction Electron- Matière et la marche aléatoire).

### **a - Interaction Electron- Matière :**

Le procédé de simulation MC est développé pour l'interaction du faisceau d'électrons d'énergie de l'ordre du kilovolt et la perte d'énergie dans les cibles qui composent des couches minces sur les substrats épais. Un tel calcul a une application directe dans l'analyse chimique quantitative non destructive des films ultra-minces dans la microsonde d'électron. L'angle de diffusion élastique est calculé dans la simulation de la trajectoire d'électron avec l'expression de Rutherford pour la section efficace de diffusion, et la perte d'énergie entre les chocs élastique est calculée avec l'approximation de Bethe. Cette application est tout notre intérêt dans ce mémoire et elle sera plus détaillée dans le chapitre suivant.

### **b - La marche aléatoire :**

Plusieurs processus physiques tels que le mouvement Brownien, le transport des électrons à travers un solide, et les erreurs achevées dans un ordinateur sont modélisés comme une marche aléatoire.

Dans ce modèle, plusieurs marches sont prises avec l'indépendance de la direction de chaque marche avec celle qui précède. On part de l'origine et on prend des marche de longueur (non coordonnées) dans les directions x et y comme suit :

$$(\Delta x_1, \Delta y_1), (\Delta x_2, \Delta y_2), \dots, (\Delta x_N, \Delta y_N)$$

Il y a un total de N marches. La distance du point de départ R est reliée à ces marches par :

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \dots + \Delta y_N)^2$$

Maintenant tandis que cette dernière relation est tout à fait générale pour n'importe quelle marche prise. Si elle est une marche aléatoire alors c'est équivalent à un déplacement en avant ou en arrière, ou bien à droite ou à gauche.

Ainsi en moyenne, pour un grand nombre de marches, la majorités des termes mixtes dans l'équation vont s'annuler et on a :

$$R^2 \approx \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta x_N^2 + \Delta y_1^2 + \Delta y_2^2 + \dots + \Delta y_N^2$$

$$R^2 \approx N \langle v^2 \rangle$$

$$R \approx (N)^{1/2} r_{\text{mc}}$$

où  $r_{\text{mc}}$  est la racine carrée de la moyenne carrée de la grandeur de marche ou bien racine moyenne carrée de la grandeur de marche. Il faut noter que le même résultat est obtenu pour une marche à trois dimensions. D'après la relation , la distance à partir du point de départ est toujours :  $(N)^{1/2} r_{\text{rms}}$ .

# **Chapitre II**

## **Modélisation**

## II.1 - Introduction :

Pour étudier l'influence de l'augmentation de la température ( $\Delta T$ ), qui est due au bombardement d'un matériau luminescence par un faisceaux d'électrons, sur le signal CL, un modèle de calcul numérique utilisant la méthode Monte. Le choix de cette méthode est dû au fait que la trajectoire des électrons dans l'échantillon se fait d'une façon aléatoire. Donc l'étude de ce type de phénomène besoin des méthodes d'étude stochastiques qui sont basées sur les concepts développés dans la théorie des probabilités. Cette méthode se prête bien à la modélisation de tels processus dans la mesure où elle possède un caractère purement stochastique.

En effet, les méthodes numériques peuvent remplacer les méthodes analytiques quand celles-ci font défaut ou qu'elles sont de mise en œuvre trop complexe (nombre d'intégrales et de systèmes d'équations non linéaires dont la résolution analytique est impossible ou trop complexe). De même, les méthodes numériques s'intéressent à trouver une approximation de la résolution des problèmes dont on ne connaît pas l'expression analytique, ou bien dont la solution analytique est inconnue ou inexploitable.

L'intérêt de ce chapitre est de fournir une description complète et détaillée sur le concept de bases physiques utilisées dans la simulation (MC), pour la trajectoire des électrons qui permet de calculer l'intensité de CL en prenant en considération l'effet du vibration du réseau cristallin dû au faisceaux d'électrons incidents (effet d'échauffement). Le nombre de phonons créés pendant le long de la trajectoire des électrons est calculé numériquement pour voir la variation de l'élévation de la température en fonction de la profondeur qui sera présenté pour différentes énergies d'accélération et pour différents nombres d'électrons.

## II.2 - L'ancienne version du modèle analytique :

Le modèle de calcul qui a été proposé par Nouiri et al. [13, 18,19, 22,23] est basé sur la résolution de l'équation de continuité d'une façon self consistant. La concentration des porteurs créés sous excitation cathodique, la hauteur de barrière, l'épaisseur de la région déserte, et l'intensité de la cathodoluminescence en fonction du paramètre du faisceau électronique ont été calculés. Ce modèle néglige l'influence de la température qui est due au bombardement électronique. Donc tous les calculs sont fait de telle sorte que la température ambiante soit constante. Des modifications ont été proposées [11] pour introduire, dans ce modèle, l'effet de la température sur l'intensité de CL, en utilisant une relation empirique [ ]. Mais les résultats suivant ce modèle ne sont pas tout à fait acceptables parce que l'effet de  $\Delta T$  n'apparaît que pour les cas de forte injection. Dans notre présent travail, on va introduire l'effet de  $\Delta T$  dont le calcul est basée sur la méthode de calcul numérique Monte Carlo.

Avant d'expliquer les modifications qui ont été introduites , on présente d'abord les grands principes du modèle analytique dans la région neutre.

La distribution de l'excès des porteurs est contrôlée par l'équation de continuité exprimée sous la forme classique suivante[ ] :

$$\text{div} \cdot \mathbf{J} = G(z) - R(z) \quad (\text{II.1})$$

$\mathbf{J}$  est le flux des porteurs,  $G(z)$  et  $R(z)$  sont respectivement les taux locaux de génération et de recombinaison. Le taux local de génération est relié à la fonction de dissipation de l'énergie  $j(u)$  par la relation suivante [8] :

$$G(z) = (r/R) j(u) \quad (\text{II.2})$$

Selon Wu et Wittry[7], on utilise, pour la fonction de génération, l'approximation de la gaussienne modifiée et la fonction de dissipation de l'énergie  $j(u)$  donnée par :

$$j(u) = A \exp \left[ - \left( \frac{u - u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \exp \left( - \frac{bu}{u_0} \right) \quad (\text{II.3})$$

où  $u = (\rho/R) Z$ ,  $\rho$  est la densité du semi-conducteur ( $\text{g/cm}^3$ ),  $Z$  est la profondeur (cm) et  $R$  est la pénétration électronique ( $\text{g/cm}^2$ ).

$R$  a été déterminés par Wu et Wittry [7] pour GaAs et est donnée par :

$$R(\text{g/cm}^2) = 2.56 \cdot 10^{-3} \left( \frac{E_0}{30} \right)^{1.7} \quad (\text{II.4})$$

où  $E_0$  est l'énergie des électrons en (keV).

Les valeurs des paramètres dans  $j(u)$  pour GaAs sont :

$$\Delta u = 0.350, u_0 = 0.125, b = 4, B/A = 0.4$$

$A$  ou  $B$  est déterminé en utilisant la condition de normalisation:

$$\int_0^{\infty} j(u) du = G_0 \quad (\text{II.5})$$

où  $G_0$  est la génération totale ( $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) et elle est donnée par :

$$G_0 = \frac{I_p E_0 (1-d)}{e E_i} \quad (\text{II.6})$$

$I_p$  et  $E_0$  sont respectivement la densité de courant et l'énergie des électrons.  $E_i$  est l'énergie de création d'une paire électron-trou.  $d$  est la fonction de l'énergie des électrons rétrodiffusés ( $d = 25\%$  pour GaAs).

### - Transport des porteurs dans la région neutre :

Le flux des porteurs est induit seulement par la composante de diffusion des porteurs minoritaires, et les porteurs majoritaires suivent pour maintenir la neutralité de la charge locale. Donc, l'équation de continuité s'écrit :

$$-D_n \frac{d^2 \Delta n(z)}{dz^2} = G(z) - \frac{\Delta n(z)}{t_n} \quad (\text{II.7})$$

où  $t_n$  est la durée de vie d'électrons. Elle peut être écrite en fonction de la longueur de diffusion  $L_n$  et le coefficient de diffusion  $D_n$  sous la forme classique :

$$t_n = \frac{L_n^2}{D_n}$$

La solution générale de cette équation ( Eq. II .7 ) est :

$$\Delta n = B_n \exp\left[-\frac{(z-z_d)}{L_n}\right] + \frac{L_n}{2D_n} \int_{z_d}^z G(z') \left\{ \exp\left(-\frac{|z-z_d|}{L_n}\right) - \exp\left[-\frac{(z+z'-2z_d)}{L_n}\right] \right\} dz' \quad (\text{II .8})$$

La constante  $B_n$  est la concentration d'électrons à la limite de la zone déplétée, c'est à dire,

$$B_n = \Delta n(z=z_d)$$

On détermine  $B_n$  à partir des constantes aux limites.

Mais le deuxième terme dans l'équation (II .8) correspond à la solution donnée par Wu et Wittry (1978) [3].

L'intensité du signal cathodoluminescence  $I_{CL}$  s'écrit :

$$I_{CL} \propto \int_{z_d}^{\infty} \frac{\Delta n(z)}{t_n} \cdot \exp(-a_b z) dz \quad (\text{II .9})$$

où  $a_b$  est le coefficient d'absorption.

## II.3 - Modification du modèle analytique :

### II.3.1 - Dépendance de la luminescence de la température :

La luminescence est dépendante de la température comme toutes les autres propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. En général, il existe deux modèles: le modèle thermique et le modèle non thermique [9].

Dans le modèle thermique [20], l'énergie du photon ou électron incident est transformée directement en chaleur.

Le modèle non thermique considère qu'une grande densité de plasma d'électron-trou a été formée, et à cause de cette densité les semi-conducteurs covalents, deviennent instables [21]. On considère l'influence de la température sur l'intensité de l'émission CL.

En général, dans tous les semi-conducteurs ou les isolants, il existe deux causes principales qui montrent la dépendance des états de bande en température [1].

Premièrement, la contribution de la dilatation du réseau qui cause un changement dans la

position des états d'énergie de bande, car la structure de bande est dépendante de l'espacement du réseau cristallin.

La deuxième contribution est due à l'interaction électron-phonon.

Typiquement, la contribution de dilatation qui peut être calculée à partir de la dilatation thermique et le coefficient de dilatation s'élève environ de 20% à 50 % de la température totale des états de bandes, le coefficient total de température est compris entre  $10^{-4}$  à  $10^{-3}$  eV.K<sup>-1</sup>.

Plusieurs traitements théoriques de la contribution de l'interaction électron-phonon sont décrits par Cohen et Chadi (1980) [1].

### II.3.2 - Ecriture des paramètres du matériau en fonction de la température :

On va introduire des variations à certains paramètres tels que  $E_g$ ,  $n_i$ ,  $L_n$  qui sont considérés comme des constantes dans le modèle précédent [Nouiri et al]. En réalité, ils varient en fonction de la température.

Pour améliorer ce modèle et pour étudier l'influence de la température sur les paramètres physiques tels que la bande interdite ( $E_g$ ), la longueur de diffusion ( $L_n$ ), la concentration intrinsèque ( $n_i$ ) et autres, ces derniers sont exprimés en fonction de la température.

#### a- La bande interdite ( $E_g$ ) :

Pour les applications pratiques, la variation de la bande d'énergie en fonction de la température est donnée par l'expression empirique suivante (Varshni 1967) [1] :

$$E_g(T) = E_g(0) - b T^2 / (T + \theta) \quad (\text{II.10})$$

où  $E_g(0)$  est la bande d'énergie à 0°K, b et  $\theta$  sont des constantes.

Pour GaAs,  $E_g(0) = 1.519$  eV,  $b = 5.405 \cdot 10^{-4}$  eV/K,  $\theta = 204$  K.

#### b - La concentration intrinsèque :

Un semi-conducteur ne renfermant aucune impureté ( $N_a = N_d = 0$ ) est dit intrinsèque.

L'équation de neutralité correspondante est :

$$n - p = 0 \quad \text{ou} \quad n = p$$

Cette équation signifie que lorsqu'un électron quitte la bande de valence, il apparaît dans cette dernière un trou. De ce fait, dans un semi-conducteur intrinsèque le nombre de trous

est toujours égal aux nombres d'électrons.

Alors, la position du niveau de fermi est définie par l'équation suivante :

$$E_F = \frac{E_v + E_c}{2} \quad (\text{II.11})$$

Le niveau de fermi est donc indépendant de la température et se situe exactement au milieu de la bande interdite.

La concentration des porteurs de charge intrinsèque est définie par l'équation :

$$n_i = n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (\text{II.12})$$

où  $N_c$  et  $N_v$  sont les densités d'états effectifs, elles sont fonction de T :

$$N_c = \left( \frac{2pm_n^* KT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad N_v = \left( \frac{2pm_p^* KT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{II.13})$$

$m_n^*$  et  $m_p^*$  sont les masses effectives des électrons et des trous respectivement,  $h$  est la constante de Planck.

En portant dans les expressions analytiques de  $N_c$  et  $N_v$ , les valeurs constantes qui y figurent, la concentration  $n_i$  peut être déterminée par l'équation[37] :

$$n_i = 4.82 \cdot 10^{15} \left( \frac{m_n^* m_p^*}{m^2} \right)^{3/4} T^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (\text{II.14})$$

$m$  est la masse d'électron (en kg).

Pour GaAs  $m_n^* = 0.067m$ ,  $m_p^* = 0.48m$ .

### c - La longueur de diffusion :

Concernant la longueur de diffusion, la relation utilisée est [12] :

$$L_n = L_{n0} e^{-\frac{E}{2Kt}} \quad (\text{II.15})$$

où  $E=43.5$  meV,  $L_{n0}$  est une constante calculée d'après la condition  $L_n (T=300\text{K})=0.7 \mu\text{m}$  [13].

D'autres paramètres sont exprimés en fonction de température tels que la vitesse thermique :

$$V_{th} = \sqrt{\frac{3KT}{m^*}}$$

$K$  est la constante de Boltzman,  $m^*$  est la masse effective.

### II.3.3 - Introduction de l'influence de $\Delta T$ :

Des modèles relatifs à l'augmentation de la température d'un échantillon soumis aux radiations d'un faisceau d'électron ont été proposés par plusieurs auteurs :

1- Vine et Enstein (1964) ont prédit [10] :

$$\Delta T = 0.099 i_a V_0 C_0 / \sqrt{p} \alpha a \quad (\text{II.16})$$

$a$  est le diamètre du faisceau (cm),  $\alpha$  est la conductivité thermique ( $\text{cal cm}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ),  $i_a$  est le courant du faisceau absorbé (A),  $V_0$  le voltage d'accélération (volt),  $C_0$  est le facteur de correction dépendant du rapport de profondeur de pénétration et du diamètre du faisceau.

2- Baker et Sexton [24] expriment l'augmentation de température dans une plaque infinie par :

$$\Delta T = Pa/\alpha \quad (\text{II.17})$$

où  $P$  est la densité de la puissance locale ( $\text{W cm}^{-2}$ ).

Cependant, la situation peut être tout à fait différente si l'échantillon est un film mince (épaisseur  $h \ll 2a$ ) avec une haute conductivité thermique ( $\alpha$ ) déposé sur un substrat épais avec une faible conductivité thermique ( $\beta$ ).

3- Cette situation a été considérée par Roll [25] qui a proposé :

$$\Delta T = (Pa/\beta)[1+1.67(\alpha/\beta)(h/a)] \quad (\text{II.18})$$

La conductivité thermique dans les deux équation (II.17) et (II.18) est exprimée en ( $\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-1}$ ).

4- L'augmentation de la température sous l'effet d'un bombardement d'un faisceau d'électrons a été étudiée [9-10], mais elle n'a pas été introduite dans le calcul de l'intensité CL. La relation utilisée dans le modèle [11] est :

$$\Delta T = 0.41 \frac{I_p V_0 C_0}{C_T d_0 \sqrt{p}} \quad (\text{II.19})$$

(C'est la relation II.18 adapté au GaAs).  $d_0$  est le diamètre du faisceau (cm),  $C_T$  est la conductivité thermique (pour GaAs,  $C_T=0.5 \text{ W cm}^{-1} \text{K}^{-1}$ ),  $I_p$  est le courant du faisceau absorbé (A),  $V_0$  est le voltage du faisceau (V), et  $C_0$  est le facteur de correction (dans le cas de GaAs  $C_0=2$ ).

L'intensité de l'émission CL est calculée de la concentration de l'excès de porteurs minoritaires dans la région neutre (zone de volume). Les photons sont générés dans le GaAs lorsque l'excès de porteurs recombinaient radiativement. L'intensité de CL est donnée par la relation (II.9)

La procédure de calcul est la suivante :

On introduit les paramètres du faisceau  $E_0$ ,  $I_p$ ,  $d_0$  puis une valeur initiale de T (supposant  $T=300\text{K}$ )

On calcule  $\Delta T$  ainsi que la nouvelle valeur de T ( $T+\Delta T$ ) qui conduit à calculer chaque paramètre en fonction de T.

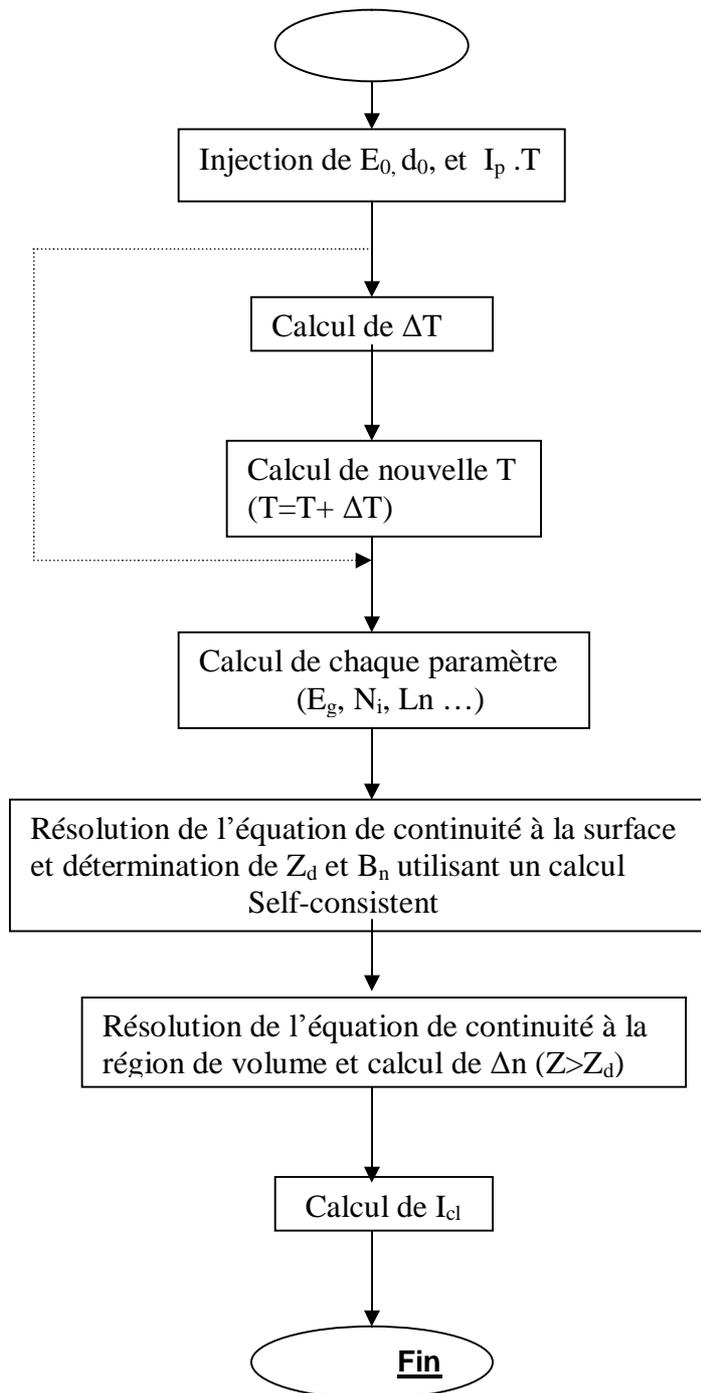
Nous résolvons les équations de continuité à la surface et à la zone de volume et on détermine la largeur  $Z_d$  et la concentration de l'excès des porteurs  $B_n$  pour  $Z=Z_d$  et pour  $Z>Z_d$ .

Après la convergence, on passe directement au calcul de l'intensité de CL en utilisant la relation (II.9).

Dans le modèle précédent, l'intensité de CL a été calculée pour  $T=300^\circ\text{K}$

**Remarque :**

Dans ces modèles, les auteurs utilisent  $\Delta T$  comme le maximum de température due au bombardement électronique. Mais dans la réalité, il faut utiliser une distribution en profondeur de  $\Delta T$ . C'est l'objectif de notre travail



**Figure (II.1)** : Procédure de calcul de l'intensité Cathodoluminescence tenant compte de l'échauffement  $\Delta T$  dû au faisceau électronique. Les pointillés représentent le cas où  $\Delta T$  est négligeable de

## II.4 - Modèle proposé :

- Génération des nombres aléatoires:

Nous avons utilisé dans notre calcul la fonction RAND pour générer les nombres aléatoires, dans notre programmation en langage Fortran

Jusqu'à présent, la fonction RAND nous a essentiellement servi à remplir nos besoins. Elle utilise le générateur congruentiel linéaire suivant :

$$X_{n+1} = f(X_n) = (aX_n + c) \bmod m, n \geq 0, \quad (\text{II.20})$$

où :  $m = 2^{31}$ ,  $a = 843314861$ ,  $c = 453816693$

Sa période est bien sûr égale à  $m$  (ceci signifie que  $f$  est une permutation cyclique sur  $[0, m-1]$ ).

Notons que tous les générateurs de nombres aléatoires sur ordinateur sont des suites parfaitement déterministes qui <<apparaissent>> comme aléatoire (pour les bons générateurs) selon un certain nombre de tests statistiques. Pour se ramener à des nombres réels compris dans l'intervalle  $[0, 1]$ , on divise les entiers obtenus par  $m$ , et l'on obtient un générateur de nombres réels qui semblent suivre une loi uniforme sur  $[0,1]$ . Le terme initial de la suite est souvent appelé le germe et celui par défaut est  $X_0 = 0$ . Ainsi, le premier appel à rand est toujours :

$$u_1 = 45381693/2^{31} \approx 0.2113249 \quad (\text{II.21})$$

Il est cependant possible de changer le germe à tout moment avec l'instruction :

RAND ( 'seed', germe) où le germe est un entier compris dans l'intervalle  $[0, m-1]$ . Souvent, on ressent le besoin d'initialiser la suite en choisissant un germe plus ou moins au hasard (pour éviter de ne pas avoir les mêmes nombres à chaque fois) et une possibilité consiste à récupérer la date et l'heure et de création du germe.

Par défaut, le générateur fournit une loi uniforme mais il est judicieux dans toute simulation de s'assurer que RAND donne bien ce que l'on désire en utilisant quelques petites applications avec rand [27].

La valeur d'entrée, INTEGER (n), facultatif pour RAND, contrôle la méthode de sélection du nombre aléatoire.

La valeur du retour, REAL (n), où RAND et RANDOM, classe les nombres aléatoires dans l'intervalle  $[0,1]$ . [28].

- Processus de la sélection de la valeur  $x$  :

Premièrement, le générateur est lancé et la première valeur aléatoire est sélectionnée. En suite, le prochain nombre aléatoire dans la séquence est sélectionné.

Sinon, le générateur est regermé en utilisant le  $x$ , on recommence le lancement et la première valeur aléatoire est sélectionnée.

Quand RAND appelle sans argument, le  $x$  est supposé être 0 [28] .

#### II.4.1 - Détail du modèle[38] :

En mode de (CL) d'un microscope électronique à balayage l'énergie  $E_0$  de l'électron incident est essentiellement plus grande que l'énergie  $E_{e-h}$  de création de paire  $e-h$  (4.6eV pour GaAs). Un électron incident d'énergie  $E_0=10-20\text{KeV}$  peut produire plusieurs milliers des paires ( $e-h$ ) le long de sa trajectoire en volume d'excitation.

Le facteur de génération est donné par la relation [1] :

$$G = \frac{E_0(1-g)}{E_{e-h}} \quad (\text{II.22})$$

$g$  est la fraction d'énergie du faisceau dissipée due aux électrons retrodiffusés (pour le GaAs  $g$  est 25%).

L'électron perd une énergie  $E=E_0(1-g)$  par rapport au faisceau incident lorsqu'il pénètre dans le matériau.

Cet électron va subir des collisions aléatoires et successives jusqu'à la fin de sa trajectoire.

La distance entre deux collision successives est :

$$S = -l \ln(R) \quad (\text{II.23})$$

$R$  est un nombre aléatoire entre  $[0,1]$  ,  $l$  est le libre parcours moyen qui est donné par la relation suivante :

$$l = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad (\text{II.24})$$

$A$  est le poids atomique (144.64 g pour GaAs) ,  $N_A$  est le nombre d'Avogadro,  $\rho$  est la densité volumique du matériau ( pour GaAs  $\rho = 5.32 \text{ g/cm}^3$  ), et  $\sigma$  est la section efficace totale de dispersion .

Les électrons sont fortement absorbés par la matière. Il y a deux mécanismes de dispersions élastique et inélastique.

La dispersion élastique par les noyaux des atomes qui sont partiellement protégés par les électrons liés, peut être analysé par le modèle de Rutherford. La section efficace relative totale de Rutherford de dispersion est donnée par :

$$s = (5.21.10^{-21}) \left[ \frac{z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E + m_0 c^2}{E + 2m_0 c^2} \right] \cdot \frac{4p}{d(d+1)} \quad (\text{II.25})$$

Z est le numéro atomique de l'atome mis en cause (Z=64 pour GaAs qui est assumé en tant qu'un élément, ainsi  $Z=Z_{\text{Ga}}+Z_{\text{As}}$ ), E est l'énergie d'accélération de l'électron (keV),  $m_0$  est la masse de l'électron, c est vitesse de lumière.  $d$  est un paramètre de l'écran qui est donné par[1]

$$d = (3.4.10^{-3}) \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (\text{II.26})$$

L'angle de dispersion peut être obtenu par la probabilité de distribution[1] :

$$\cos q = 1 - \frac{2dR}{1+d-R} \quad (\text{II.27})$$

R est un nombre aléatoire variant entre [0, 1]

La trajectoire des électrons et la zone de dissipation de l'énergie dans la matière peuvent être modélisées par l'intermédiaire de ces deux équations. Généralement, on utilise une technique numérique appelée simulation de Monte Carlo. Cette simulation consiste à calculer numériquement les déplacements de plusieurs électrons dans la matière.

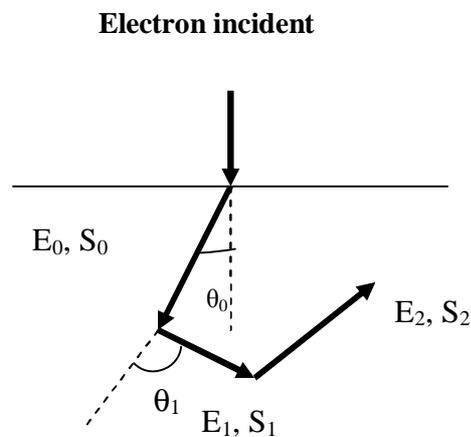
#### II.4.2 - Séquence de calcul :

Considérons le cas d'un faisceau électronique incident perpendiculaire à une face plane de l'échantillon GaAs d'intensité  $I_p$ , d'énergie  $E_0$ , et de diamètre  $d_0$  (Figure II.2)

Le premier événement d'interaction est supposé de produire à l'origine. L'angle de diffusion  $\theta_0$  et la longueur d'étape  $S_0$  sont calculées par la technique MC (de façon aléatoire).

Après chaque collision, l'électron perd une partie de son énergie en produisant une paire électron-trou et un phonon. Ensuite,  $S_{n+1}$   $\theta_{n+1}$  sont introduits aléatoirement, et ainsi de suite.

Si l'électron échappe à la surface comme un électron rétrodiffusé, la direction et l'énergie sont enregistrées ou bien sauvegardées dans le programme.

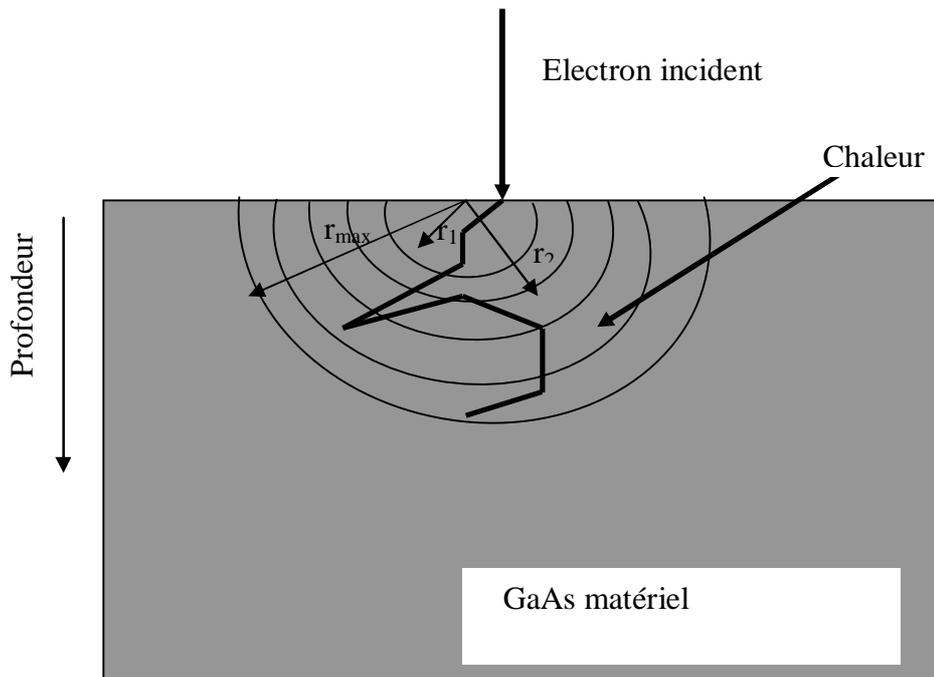


**Figure (II.2) :** Séquence de calcul de la trajectoire

Nos calculs sont divisés en deux catégories. La première concerne le calcul de la distribution de température due au faisceau électronique incident suivant la profondeur de pénétration. Pour cela, l'échantillon est divisé par plusieurs zones demi-sphériques, de rayons  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$  (figure II.3). Dans chaque zone, il y a une quantité de paires (é-h)  $\Delta n$  et de phonons  $\Delta ph$  qui a été générée.  $\Delta n$  sera transformé en photo-courant par application d'un champ électrique extérieur (cas d'EBIC *electron Beam Induced Current*), ou transformé en lumière par recombinaison (cathodoluminescence). Notre intérêt est relatif aux phonons sont apparus sous forme d'une température  $\Delta T$ .

Après chaque collision, l'électron perd une énergie moyenne ( $E_{moy}=38.8$  meV).

Dans notre calcul, nous nous sommes intéressés à la génération des paires électrons-trous produites pendant la collision des électrons incidents avec les atomes du matériau (marche aléatoire) et la création des phonons. Les électrons perdent une énergie  $E_{e-h}$  pour produire une paire électron-trou, jusqu'à ce que l'énergie tombe au dessous de la valeur à laquelle un électron ne peut plus causer l'ionisation. Pour simplifier le calcul, deux dimensions X et Z sont considérés. Ainsi, on détermine la profondeur  $r_{max}$ .



**Figure (II.3)** : représentation schématique du modèle

Pour déterminer l'augmentation de température, on suppose qu'après chaque collision l'électron produit une paire (é-h) et crée un phonon. L'énergie thermique dissipée pour créer un phonon est calculée à l'aide de l'énergie thermique moyenne d'atome qui est donnée par :

$$E_{moy} = \left(\frac{3}{2}\right) K_B T \quad (\text{II.28})$$

$K_B$  est la constante de Boltzman, avec  $T = 300K$ ,  $E_{moy} = 38.8 \text{ meV}$

Après chaque pas  $S$ , l'électron perd  $E_{\epsilon-h}$  (pour générer une paire  $\epsilon-h$ ) et  $E_{moy}$  (pour générer un phonon). A la fin de la trajectoire de l'électron, le nombre de phonons  $\Delta ph(V_i)$  est calculé dans chaque zone ( $V_1, V_2, V_3, \dots$ ) ( Fig.II.3 ). Le calcul se fait d'une manière statistique . Ainsi, l'énergie de phonons créés par unité de volume ( $\text{cm}^3$ ) est calculée selon la relation :

$$\Delta Q_i = \frac{E_{moy} \cdot \Delta ph(V_i)}{V_i} \quad (\text{II.29})$$

Cet excès d'énergie est transformée en température  $\Delta T$  (à chaque zone)

$$\Delta Q_i = E_{ph} = \rho C_p \Delta T_i \quad (\text{II.30})$$

où  $C_p$  est la chaleur spécifique,  $\rho$  est la densité volumique du matériau ( $C_p = 0.32 \text{ J.g}^{-1} \cdot \text{k}^{-1}$ ).

La température réelle au niveau de chaque zone est calculée :  $T_1 = T_0 + \Delta T_1(\text{zone}(1))$ ,  $T_2 = T_0 + \Delta T_2(\text{zone}(2))$ , .....  $T_i = T_0 + \Delta T_i(\text{zone}(i))$ , où  $T_0$  est la température avant irradiation (la température ambiante).

La diffusion de la chaleur (flux de chaleur)  $\Delta H_i$  due à la conduction thermique entre différentes zones est décrite comme :

$$\Delta H_i = K \cdot A \cdot \frac{(T_{i-1} - T_i)}{l} \quad (\text{II.31})$$

$K$  est la conductivité thermique (pour GaAs,  $K = 0.5 \text{ w cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ),  $A$  est la surface de la zone (i),  $l$  est la distance entre les milieux des deux zones (i) et (i-1). ( $l$  est égale à l'épaisseur de la zone (i), parce que toutes les zones ont la même épaisseur).

D'abord, nous calculons l'augmentation de température  $\Delta T_i$  en utilisant l'équation (II.30), puis nous l'employons pour calculer la différence  $(T_{i-1} - T_i)$  qui sera injectée dans l'équation. (II.31) pour calculer le flux  $\Delta H_i$  de la chaleur. Alors le nouvel excès d'énergie de phonon  $\Delta Q_i$  est calculé :

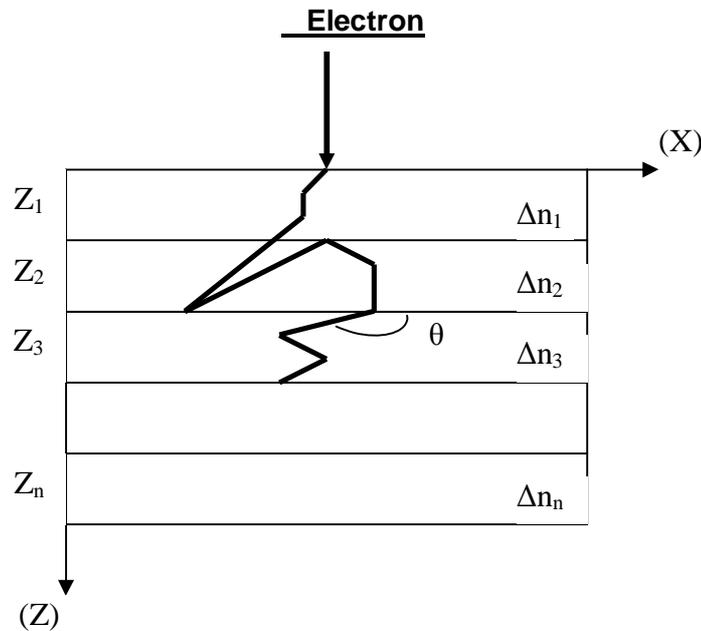
$$\Delta Q_i \cdot V_i(\text{new}) = \Delta Q_i \cdot V_i + (\Delta H_i - \Delta H_{i+1}) \quad (\text{II.32})$$

$\Delta H_i$  est la chaleur transférée à la zone (i)(entrée) et  $\Delta H_{i+1}$  est la chaleur transférée de la zone (i) (sortie).

Nous comparons le nouveau  $\Delta Q_i$  avec  $\Delta Q_i$  précédent. Si les deux valeurs sont différentes (plus grand qu'une précision imposée), nous remplaçons le nouveau  $\Delta Q_i$  dans l'équation. (II.30) et un nouveau  $\Delta H_i$  sera calculé. Le procédé continue jusqu'à la nouvelle  $\Delta Q_i$  égale au  $\Delta Q_i$  précédent (plus petit que la précision imposée) dans chaque zone (convergence de calcul). En outre, nous pouvons dire que c'est le cas de régime permanent (la température d'entrée dans la zone (i) égale à la température de sortie).

Dans le second calcul où nous essayons de déterminer l'allure de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération, on procède aux séquences suivantes :

L'échantillon est divisé en plusieurs zones,  $Z_1, Z_2, Z_3 \dots Z_n$ . ( Figure II.4). A chaque zone, une quantité de paires électron-trou ( $\Delta n_i$ ) est générée.



**Figure (II.4) :** Représentation schématique du modèle de calcul (couches rectangulaires). La distance  $S$  et l'angle  $\theta$  sont deux valeurs aléatoires.

L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$ , provient seulement de la recombinaison des porteurs en excès dans ces régions et elle est donnée par :

$$I_{CL} \propto \int_z^{\infty} \frac{\Delta n(z)}{t_n} \exp(-az) dz$$

En utilisant les couches proposées dans notre modèle (figure II.4) cette intégrale devient une sommation sur le nombre de couches, et on a alors :

$$I_{cl} = \sum_{i=1}^n \frac{(\Delta n)_i}{t_p} e^{-azi}$$

$$= \frac{\Delta n_1}{t} e^{-az_1} + \frac{\Delta n_2}{t} e^{-az_2} + \dots + \frac{\Delta n_n}{t} e^{-az_n}$$

$$= CL_1 + CL_2 + \dots + CL_n$$

Notons qu'un nombre de couches égal à dix est suffisant pour l'obtention de résultats fiables (on a même essayé des nombres plus grands).

### II.4.3 - Programme de simulation :

Le programme est proposé pour calculer la trajectoire des électrons dans un échantillon semi-conducteur qui est le GaAs de type (p). Pour déterminer l'augmentation de température pendant le bombardement par un faisceau d'électrons, on utilise la méthode Monte Carlo qui est basée sur le nombre aléatoire.

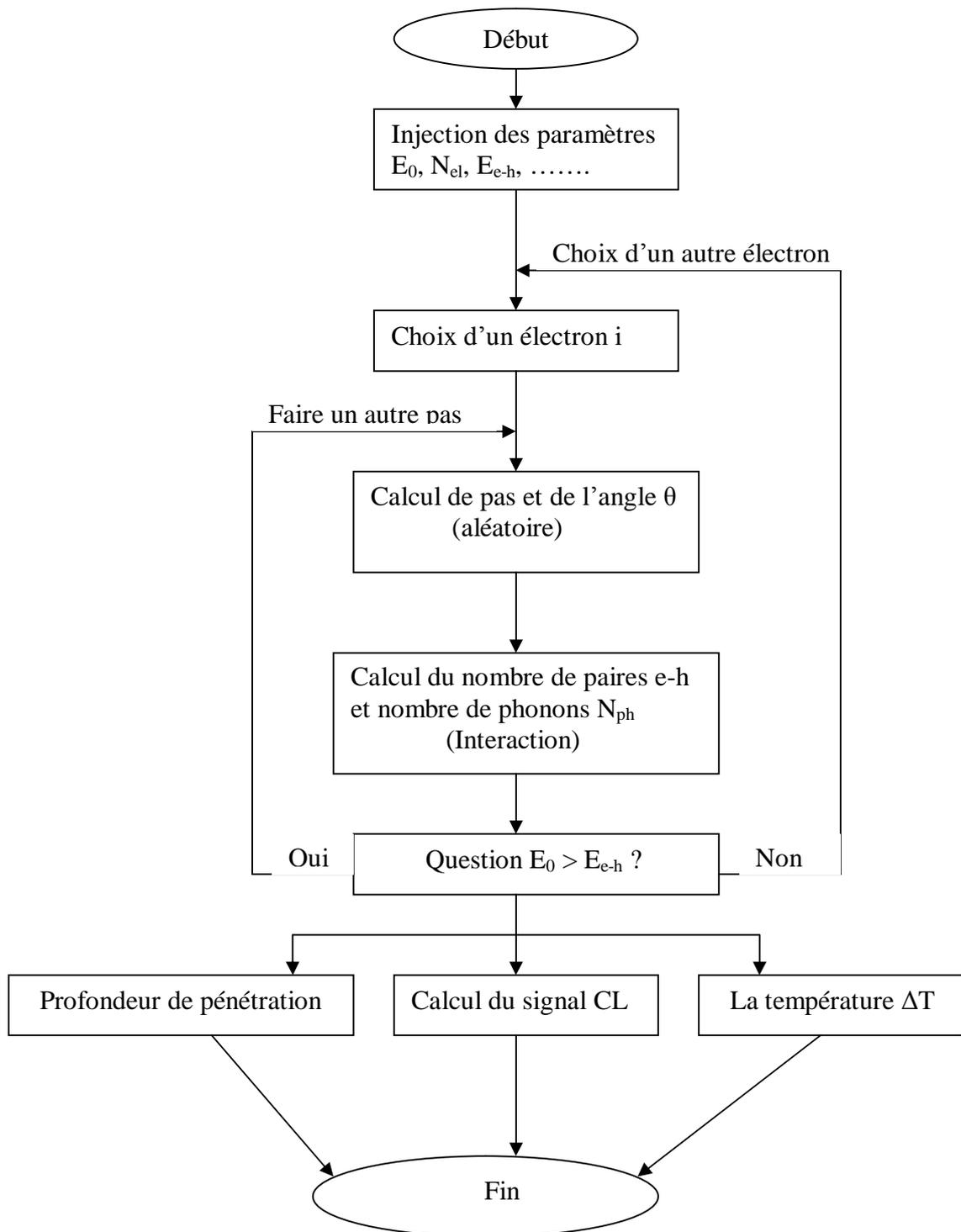
Pour cela, on étudie la variation de  $\Delta T$  en fonction de l'épaisseur de pénétration  $Z$  pour différentes valeurs d'énergie d'accélération  $E$  et pour différents nombres d'électrons.

Notre modèle MC est basé sur l'organigramme suivant :

1. On prend un électron d'énergie  $E$ .
2. On génère un nombre aléatoire  $R$   $[0,1]$ .
3. Si  $R = 0$  on génère un autre nombre, sinon on calcule le parcours libre  $S = -\lambda \ln(R)$  et l'angle aléatoire  $\theta$ .
4. On détermine la position  $(x,z)$ . ( $x = S \cos\theta$  et  $z = S \sin\theta$ ).
5. On calcule la variation d'énergie (la perte d'énergie)

6. Si ( $E > E_{e-h}$ ) l'essai est accepté, alors il y a formation d'une paire électron- trou ainsi que création d'un phonon (et on revient à l'étape 2). Sinon on refuse l'essai et on retourne à l'étape 1 c'est à dire choix d'un autre électron.
7. On calcule la profondeur de pénétration, l'augmentation de  $\Delta T$  et, par la suite, l'intensité de CL.
8. Affichage des résultats

#### II.4.4 –Organigramme :



## **Chapitre III**

### **Résultats et discussion**

### **III.1 - Introduction :**

La détermination quantitative des paramètres des matériaux nécessite d'un calcul fiable de signal CL en fonction des paramètres de faisceau électronique ( $I_p$ ,  $E_0$ ). Mais le bombardement par un faisceau d'électrons augmente la température du matériau. Cette augmentation de température influe sur le signal CL.

Dans ce chapitre, on présentera les résultats de calcul par la méthode Monte Carlo concernant la répartition de la température due au bombardement du faisceau d'électrons suivant le profondeur de pénétration. Pour différentes intensités incidentes et pour différents énergies d'accélération..

## II. 2 - Influence des paramètres du faisceau ( $I_p$ , $E_0$ ) sur le volume d'interaction :

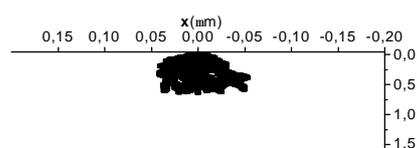
### III.2.1 - Influence de $E_0$ :

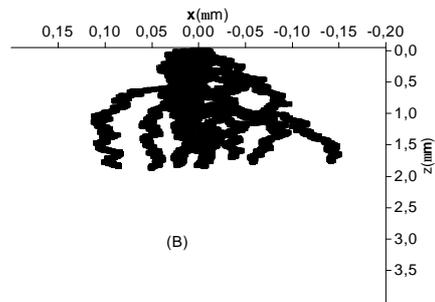
Les calculs par la méthode Monte Carlo ont été réalisés pour déterminer l'effet de  $E_0$  sur le volume d'interaction. La figure (III.1) montre les résultats de calcul, par cette méthode, la trajectoire de 10 électrons pour des énergies  $E_0$  : 10, 20, et 30 keV dans GaAs.

Le cas (A) montre que si l'énergie du faisceau incident est faible, (10keV), le volume de génération des porteurs est principalement situé juste à la surface du matériau.

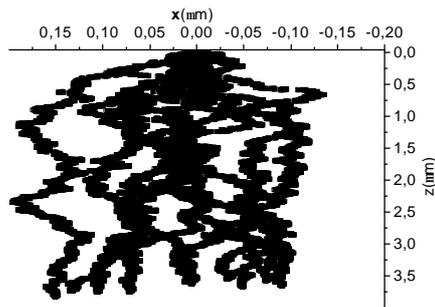
Dans le cas des énergies incidentes intermédiaires ( 20keV), comme sur la figure (III.1) le cas B , les électrons pénètrent plus profondément dans le matériau, et le volume de génération est plus grand .

Dans le cas de forte énergie du faisceau (30 keV), le volume d'interaction se situe dans des couches plus profondes et il doit être plus large, (Voire figure III.1.C).





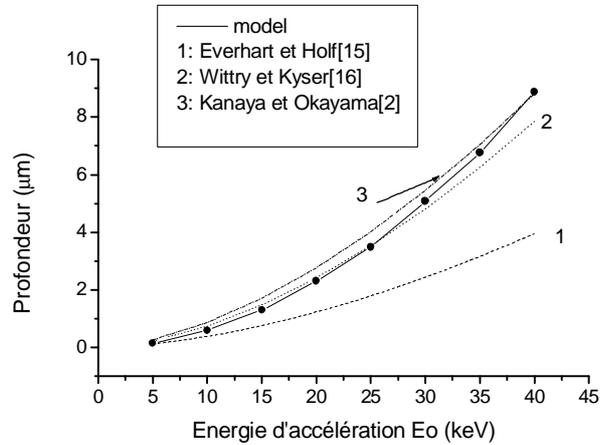
(B)



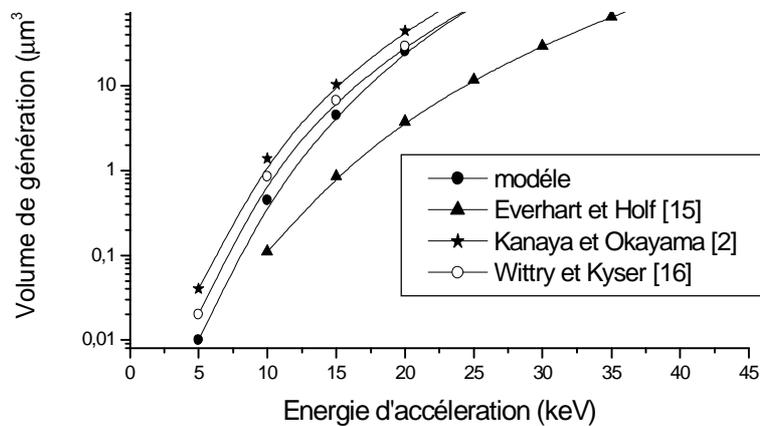
(C)

**Figure (III.1)** : Influence de  $E_0$  sur le volume de génération pour 10 électrons  
 (a) 10keV, (b) 20keV, (c) 30keV (simulé par la méthode de Monte Carlo).

La profondeur de pénétration maximale et le volume d'interaction sont aussi calculées en fonction de l'énergie d'accélération pour le matériau GaAs . Concernant notre modèle, les calculs coïncident avec les deux modèles de Kanaya-Okayama et Wittry- Kyser, ce qui renforce notre résultat(voire figures III.2 et III.3).



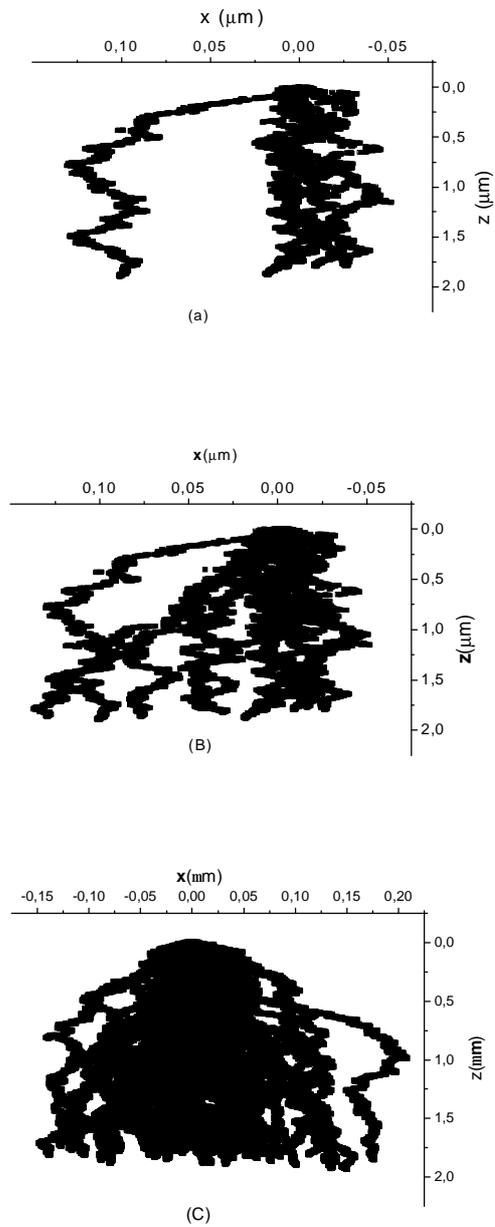
**Figure (III.2):** Profondeur de pénétration maximale en fonction de l'énergie d'accélération et comparaison avec les trois modèles



**Figure (III.3):** Volume de génération en fonction de l'énergie d'accélération et comparaison avec les trois modèles

### **III.2.2 - l'influence de $I_p$ :**

Le calcul par la méthode Monte Carlo montre l'influence de nombre d'électrons sur le volume d'interaction dans un échantillon de GaAs (fig.III.4). On constate bien que le volume de génération est presque constant pour les trois cas (10, 50, 100 électrons). D'autre part, on remarque que la zone noire augmente quand le nombre d'électrons (qui proviennent de l'augmentation de  $I_p$ ) augmente (Autrement dit, la charge augmente et le volume reste constant ).



**Figure (III.4) :** Effet de nombre d'électrons sur le volume d'interaction pour  $E_0=20\text{keV}$ .

(A) 10 électrons, (B) 50 électrons, (C) 100 électrons

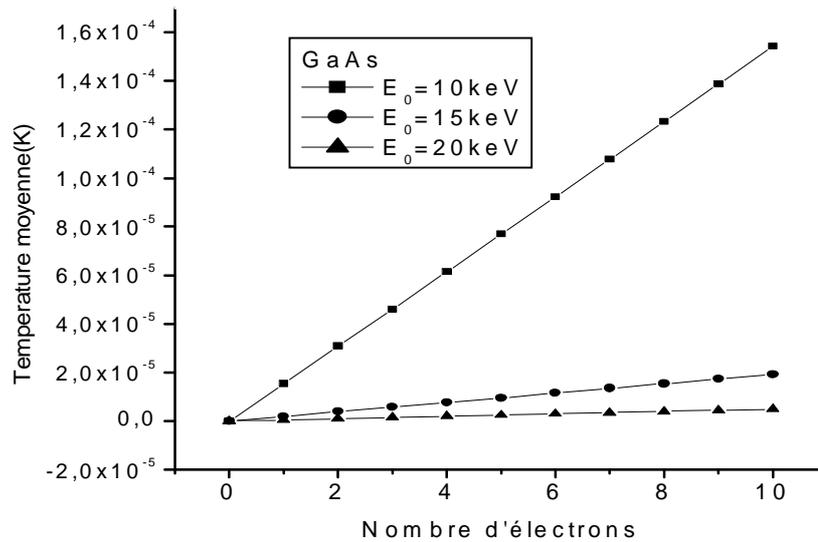
(Calculé par la méthode Monte Carlo)

### III.3 - Distribution de $\Delta T$ en fonction de la profondeur de pénétration :

On peut faire un profil de concentration (nombres de phonons créés pendant l'interaction) en profondeur. Et comme la concentration du phonons se traduit en température on peut donc obtenir des profils qui donnent la variation de la température en fonction de la profondeur. Cette variation est donnée dans la figure (III.6)

#### Remarque :

Le courant absorbé utilisé est  $I=10^{-10}$ A qui correspond à  $10^9$  électrons. Mais l'ordinateur ne peut pas calculer l'interaction de ce grand nombre d'électrons. Donc, on calcule l'augmentation de la température d'un petit nombre d'électrons, puis on déduit l'augmentation pour le grand nombre puisque la variation de  $\Delta T$  avec le nombre d'électron est linéaire (Figure III.5).

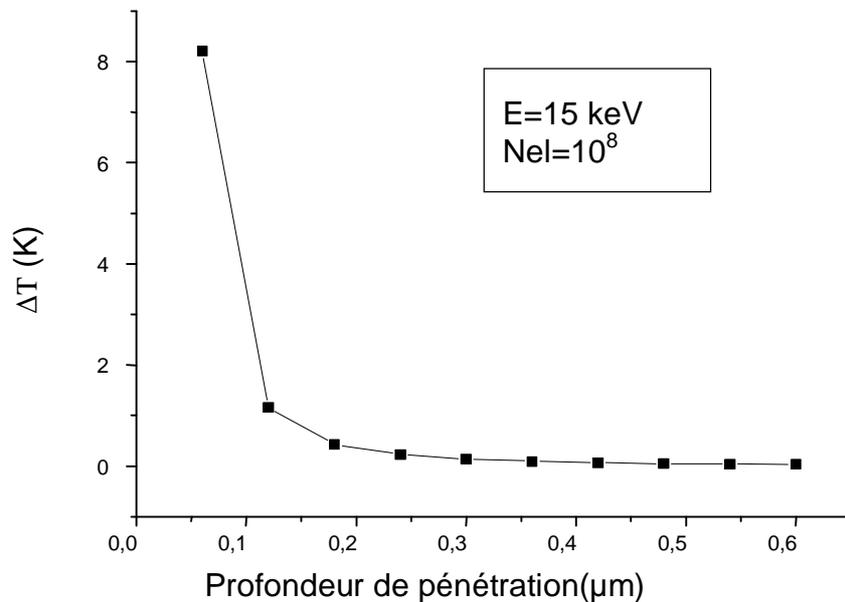


**Figure (III.5) :** Augmentation de la température en fonction du nombre d'électrons pour différentes énergies d'accélération

La température prend des valeurs très élevées dans les couches superficielles (0.05 $\mu\text{m}$  et 0.1 $\mu\text{m}$ ), puis diminue considérablement jusqu'à une valeur très faible dans les couches profondes. Autrement dit, pour les couches superficielles, les électrons sont très

Energétiques, donc l'interaction provoque une grande vibration des atomes qui conduit à une création d'énergie thermique à cause d'une onde élastique ou inélastique appelée phonon. Cet effet thermique par les vibrations des atomes est transféré aux atomes voisins, puis à l'ensemble du réseau sous forme de chaleur (effet d'échauffement).

Les électrons perdent leurs énergies au cours de leur trajectoire. Donc, l'effet d'échauffement décroît en fonction de la profondeur et devient négligeable sur les couches profondes (0.3  $\mu\text{m}$  - 0.6  $\mu\text{m}$ ).



**Figure (III.6) :** Variation de  $\Delta T$  en fonction de profondeur de pénétration pour  $E_0=15$  keV et un nombre d'électrons  $N_{el}=10^8$

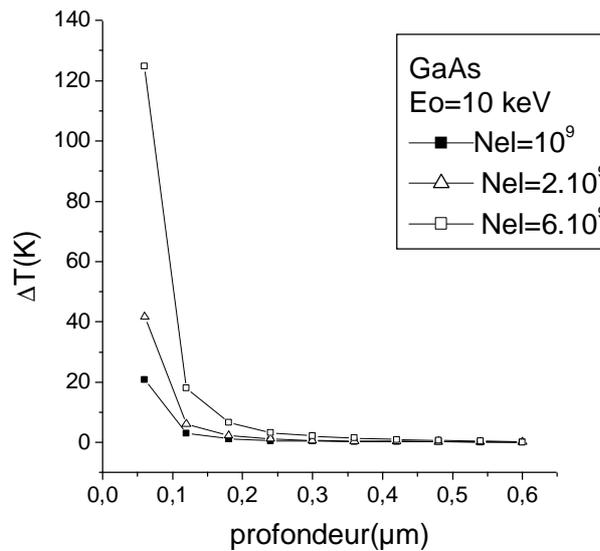
### III.3.1 - Influence de l'intensité $I_p$ sur la variation de $\Delta T$ :

L'intensité est un facteur important pour l'effet thermique. Une température très élevée  $\Delta T=120^\circ\text{K}$  peut être atteinte avec un faisceau très intense ( $I_p$ ) d'électrons de quelques keV d'énergie seulement ( $E_0=10\text{keV}$ )(voire figure III.7).

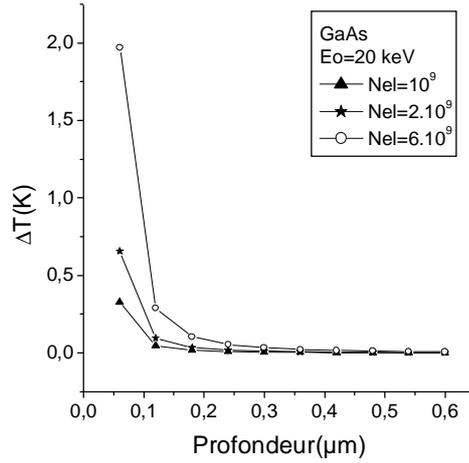
Les courbes de cette figure montrent l'influence de l'intensité des électrons incidents sur la variation de la température en fonction de la profondeur de pénétration.

Notant que la température diminue lorsque le nombre d'électrons (qui provient de l'augmentation de  $I_p$ ) diminue. Cette diminution, ou le décalage entre les courbes, est très claire dans les premières couches entre ( $0.05\ \mu\text{m}$  et  $0.2\ \mu\text{m}$ ).

Pour les forte valeurs de  $E_0$  , comme dans la figure (III.8) où les électrons sont accélérés par  $E_0=20\ \text{keV}$ , il y a une diminution nette de  $\Delta T$  par rapport au cas précédent ( $E_0=10\text{KeV}$ ). Cette diminution s'explique par la dépendance de l'énergie d'accélération avec le volume de génération.(voir figure III.1) .



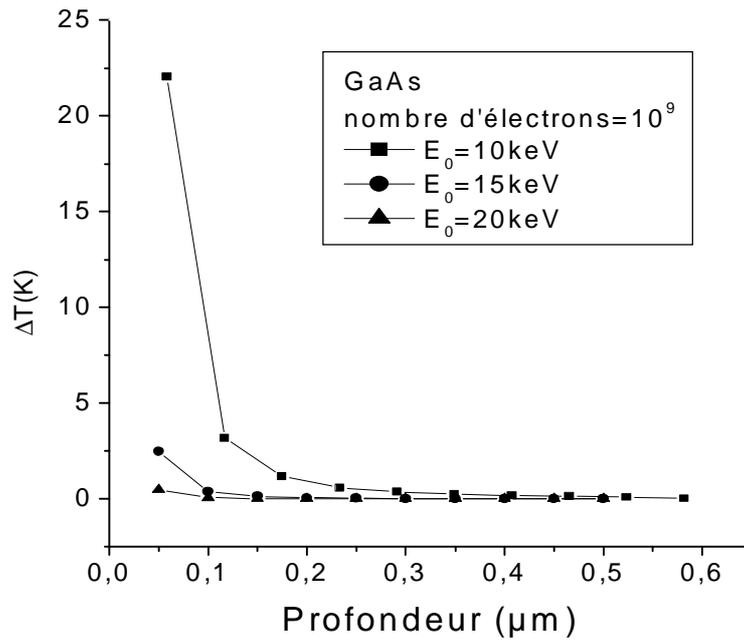
**Figure (III.7) :** Augmentation de la température en fonction de la profondeur de pénétration pour différents Nombres d'électrons et pour  $E_0=10\text{keV}$ .



**Figure (III.8):** Augmentation de la température en fonction de la profondeur de pénétration pour différents Nombres d'électrons et pour  $E_0=20\text{keV}$ .

### III. 3.2 - Influence de l'énergie d'accélération sur la variation de $\Delta T$ :

La figure (III.9) montre que la température décroît quand l'énergie d'accélération augmente, et sa apparaît clairement dans les couches superficielles (entre  $0.05 \mu\text{m}$  et  $0.6 \mu\text{m}$ ). Mais dans les couches profondes (à partir de  $0.6 \mu\text{m}$ ) on ne peut pas analyser ce phénomène. On dit que pour les forte énergie la température est distribuée sur un grand volume. Par contre pour les faible énergies nous avons un nombre d'électrons localisés dans un petit volume.

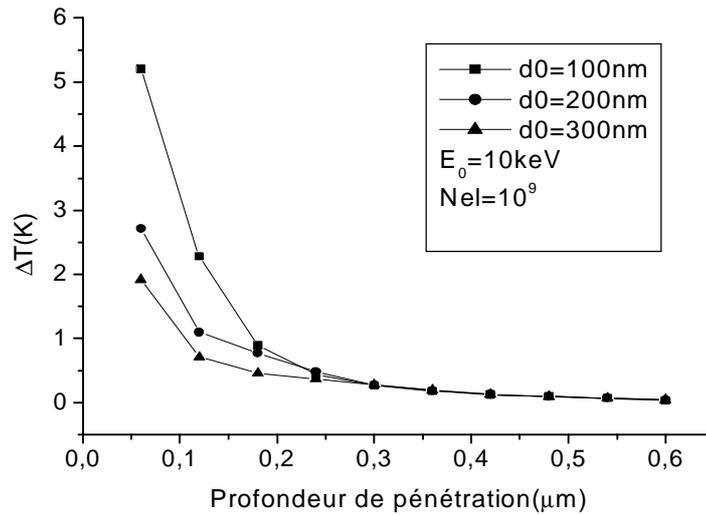


**Figure (III.9) :** Augmentation de la température en fonction de la profondeur de pénétration pour différentes énergies d'accélération et pour  $N_{el}=10^9$ .

### III. 3.3 - Influence du diamètre du faisceau sur $\Delta T$ :

Comme l'effet thermique augmente avec le nombre d'électrons (l'intensité incidente), il serait profitable de considérer l'effet du diamètre du faisceau de ces électrons.

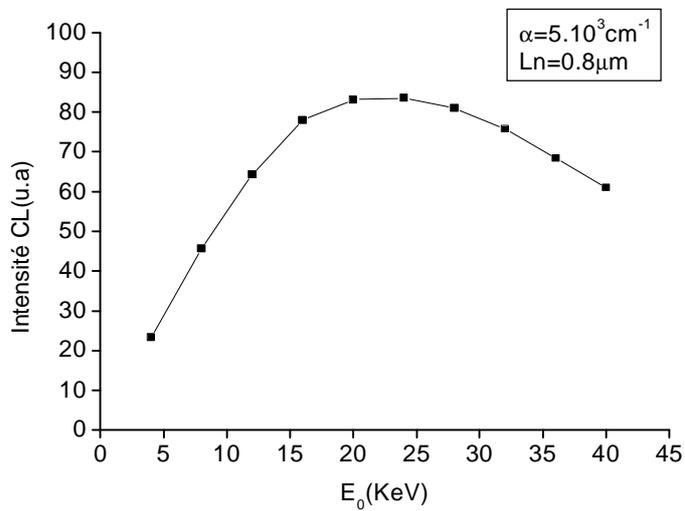
La figure III.10 montre que la température diminue avec l'augmentation du diamètre de faisceau. Donc à titre d'exemple, on peut dire que si le faisceau est très fin (100 nm), le gradient de température est plus grand celui relatif au faisceau de diamètre plus large et à intensité égale. Donc, on conclut que le diamètre du faisceau d'électrons a une grande importance sur la variation de la température dans le matériau.



**Figure (III.10) :** Variation de  $\Delta T$  en fonction de la profondeur de pénétration pour différents diamètres de faisceau et pour  $E_0=15$  keV et un nombre d'électrons= $10^9$

### III.4 - Le signal de la cathodoluminescence :

La forme générale des courbe  $I_{CL}(E_0)$  est similaire pour tous les modèles utilisés, l'allure présente en générale un maximum, elle est déterminée par la génération et la recombinaison des porteurs à faible énergies d'accélération et par l'absorption du photon à haute énergies d'accélération



**Figure (III.11) :**  $I_{cl}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour  $N_{el}=100$ .

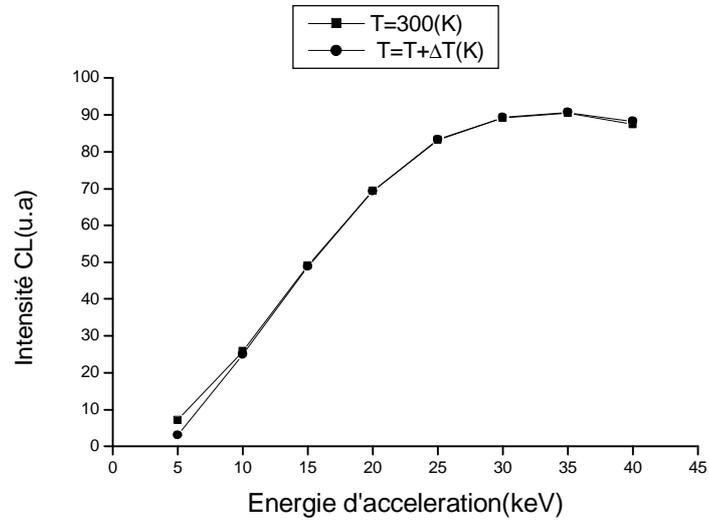
### III.4.1 - Influence de $\Delta T$ sur le signal de la cathodoluminescence

Pour le cas de faible injection ( $I_p = 10^{-13}$  A correspondant à  $N_{el} = 10^6$ , figure III.12), l'influence de l'échauffement dû au faisceau d'électrons incident est négligeable. La figure (III.12) montre la superposition des courbes pour les deux cas  $T = 300K$  et  $T + \Delta T$  dans tout l'intervalle de  $E_0$  ( $5 < E_0 < 40$  keV). On remarque qu'il n'y a pas d'influence importante de température.

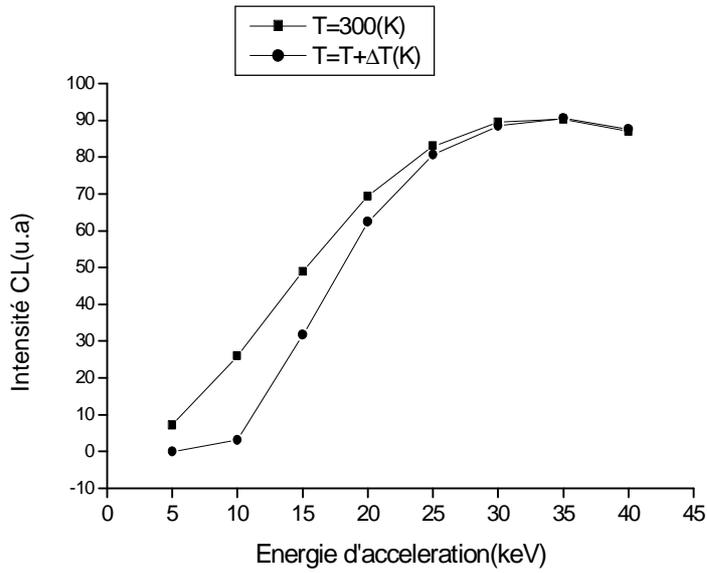
Quand le courant du faisceau électronique incident  $I_p$  augmente jusqu'à  $10^{-11}$  A (Figure III.13), une faible différence entre les deux courbes apparaît pour les faibles énergies d'accélération ( $5 < E_0 < 30$  keV). Pour les fortes énergies ( $E_0 > 30$  keV) on observe une superposition des deux courbes, donc il n'y a pas d'influence de  $\Delta T$  sur  $I_{cl}$ . Cette différence est due essentiellement à l'augmentation de température  $\Delta T$  (**forte** pour les **faibles** énergies d'accélération <<volume petit>>, comme il a été établi précédemment) . Lorsque l'injection est très forte  $I_p = 10^{-9}$  A, on observe une grande différence entre les deux courbes (Figure III.14), car la valeur de  $\Delta T$  est importante.

D'après [1], deux causes expliquent l'influence de la température sur le signal CL :

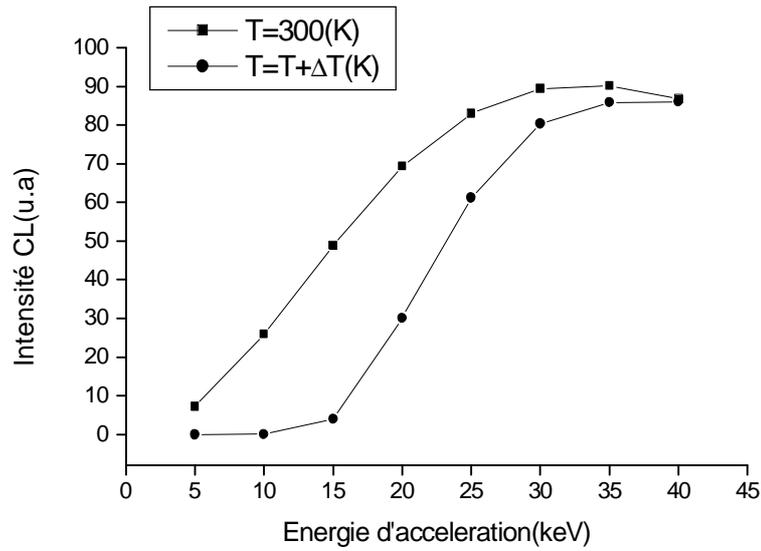
- la dilatation thermique du réseau cristallin qui contribue au changement de la position d'énergie des états de bande.
- l'interaction électron- phonon.



**Figure (III.12) :**  $I_{cl}$  en fonction de  $E_0$  pour un nombre d'électrons  $N_{el}=10^6$

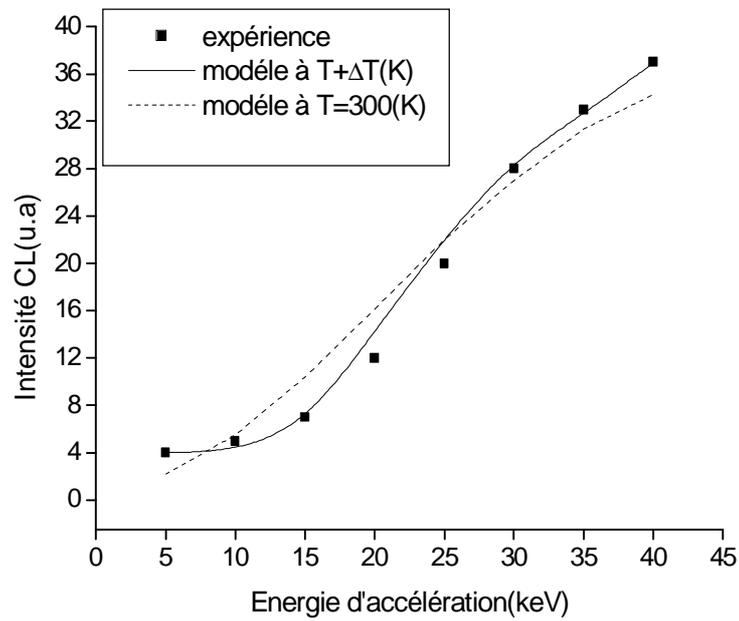


**Figure (III.13) :**  $I_{cl}$  en fonction de  $E_0$  pour un nombre d'électrons  $N_{el}=10^8$

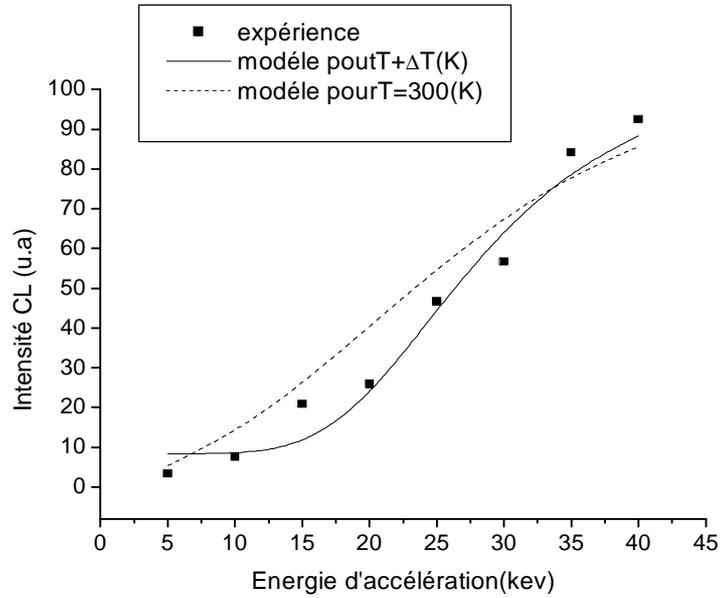


**Figure (III.14) :**  $I_{cl}$  en fonction de  $E_0$  pour un nombre d'électron  $N_{el}=10^{10}$

#### III.4.2-comparaison avec l'expérience :



**Figure (III.15) :**  $I_{cl}$  en fonction de  $E_0$ . Comparaison des résultats obtenus par simulation avec ceux de l'expérience [33].



**Figure (III.16) :**  $I_{cl}$  en fonction de  $E_0$ . Comparaison des résultats obtenus par simulation avec ceux de l'expérience [33].

Les figures(III.15, III.16) illustrent une comparaison des résultats expérimentaux [33] d'un échantillon GaAs bien poli avec ceux obtenus par la voie de la simulation qui nous a permis de déterminer la longueur de diffusion  $L_n=1.1\mu\text{m}$  et le coefficient d'absorption  $\alpha=2.310^3 \text{ cm}^{-1}$ . Ces deux valeurs réalisent le bon fitting pour les deux valeurs de  $I_p$

# **Conclusion**

## Conclusion :

On propose un nouveau modèle de calcul de Monte Carlo pour calculer l'augmentation de la température due au bombardement de faisceau d'électrons utilisé dans la microscopie électronique à balayage (MEB). Selon ce modèle, l'augmentation de température croît linéairement avec la croissance du nombre d'électrons (courant absorbé) et décroît avec l'augmentation de l'énergie d'accélération qui dépend du volume de génération. Pour l'énergie d'accélération de 20 keV (habituellement utilisée dans le MEB) l'élévation de la température peut être égale à 0.3 K et 20K pour un nombre d'électrons entre  $10^9$  et  $10^{10}$  respectivement (équivalence de  $10^{-10}$  A et  $10^{-9}$  A en tant que courant absorbé).

Nous avons essayé de mettre en évidence l'effet du paramètre de faisceau sur l'augmentation de la température et on a trouvé que cette augmentation de température  $\Delta T$  due au faisceau d'électrons incidents décroît lorsque le diamètre du faisceau croît.

Le modèle de calcul numérique de l'intensité de la cathodoluminescence ( $I_{CL}$ ) par la méthode Monte Carlo est développé. Ce modèle prend en considération l'influence de la température sur le signal cathodoluminescence .

En général, l'intensité de CL diminue lorsque la température augmente. Cette augmentation est importante dans le cas de forte injection (forte  $I_p$ ). Pour le cas de faible injection (faible  $I_p$ ), l'augmentation de température n'a aucune influence sur les courbes  $I_{CL}=f(E_0)$

L'augmentation de température  $\Delta T$  influe en général sur les courbes de CL pour les faibles énergies d'accélération  $E_0$  dans le domaine de forte injection (forte  $I_p$ ).

# Références

## Références :

- [1] B.G.Yacobi and D.B.Holt,« Cathodoluminescence microscopy of inorganic solids ». Edition Plenum. Press. New York and London, 2(1990).
- [2] K.Kanaya, S.Okayama, J.Phys.d: Appl.Phys.5,43(1972).
- [3] A.Nouiri, Thèse de doctorat d'état, Univ.Constantine (2000).
- [4] C.AKlein, Tech.Men, RaytheonC<sub>0</sub>.T.786, 1.8(1969).
- [5] S.M.Davidson and C.A.Dimitriadis, Journal of microscopy, 118,275(1980).
- [6] D.F.Kyser, Proc of the 6<sup>th</sup> Int.conf.On X-ray Optics and Microanalysis, Osaka, Tokyo (1972).
- [7] C.J.Wu and D.B Wittry, J.Appl.Phys.49 (5), 2827(1978).
- [8] N.Tabet and R-J.Tarento, Phil.Mag.B, 59(2), 243(1989).
- [9] S.Achour, Phil.Mag.B, 62,3(1990),P.329.
- [10] J.Vine, P.A.Einstein, Proc.IEE, 11(1964),P.921.
- [11] A.Nouiri, S.Chaguetmi, A.Djemel and R-J. Tarento « Science, Technology and Education of Microscopy: an overview» Edition Fromatex Spain Janvier (2003).
- [12] M.Eckstien and H-U.Habermier, J.de physique IV, 1(1991) P.23.
- [13] A.Nouiri,A.Djemel, R-J. Tarento, Microelec. Eng 51/52(2000) P.151.
- [14] A.E Gruen, Z.Naturforsch, 12A, 89 (1957).
- [15] T.E.Everhart andc P.H.Hoff, J.Appl.Phys.42,5837(1971).
- [16] D.B.Wittry and D.K.KYser, J.Appl.Phys.38,375(1967).
- [17] B.G. Yacobi and D.B.Hoff, J.Appl.phys.59,4, R1(1986).
- [18] A.Djemel, A.Nouiri, and R-J.Tarento, condens.matter 12(2000) 10343-10347.
- [19] A.Nouiri, M.Hadef, A.Djemel, and R-J. Tarento, J.Maghr.Phys.39-42(2000).
- [20] Yen, R,Liu,J.M, Kurz, H, and Bloenbergen, N, 1982, J.Appl. Phys.27, 153.
- [21] Van Vachten, J.A,and Compaan, A.D, 1981,solid st commun.39,8-67.
- [22] A.Djemel, R-J. Tarento, J.Castaing, Y.Marfaing, and A.Nouiri, Phys.Stat.Sol.(a) 168,425(1998).
- [23] A.Nourir, A.Djemel, and R-J.Tarento, Algerian journal of advanced Matrials,3, 27(1999).
- [24] Baker, B.G., and Sexton, B.A., 1975, Surf.Sci,52,353.
- [25] Roll, K., 1980,Appl.Surface.Sci.,5,388.
- [26] B.Chalmond, La Recherrche 345, juin,2002.
- [27] B.Pinçon, une introduction à Scilab, Institut Elie Cartan Nancy, Université Henri Poincaré,2003.
- [28] Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for Scientists and Engineers, 2003.

- [29] Maurice. F., Meny. L.,Tixier R. (ED.) – Microanalyse et Microscopie électronique à balayage. Editions de Physique, Orsay, 1985.
- [30] Cowley. J.M. (1969)-Image contrast in a transmission scanning electron microscope. Appl.Phys. Lett.,15,58.
- [31] D.E.Newbury, D.C.Joy, P.E.Chlin,C.E. Fiori, and J.I. Goldstein, scanning electron microscopy and X- ray analysis, plenum prss, New York, (1986)
- [32] J.P. Smit, Paper N°38 presented at 3<sup>rd</sup> Nat'l, Conf. Electron Probe Aalysis, Chicago, 1968
- [33] A.Nouiri, A.Djemaël, and R-J. Tarento, Phys. Chem. News 13,107-109,2003
- [34] M. HadeF, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2003
- [35] A. Rnoul, thèse de doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble 1,1998
- [36] Jasprit singh, Semiconductor Devices : Bsic Principles, John-Wiley, 2001
- [37] P.Kireev<< La phisyque des semiconducteurs >>, Mir. Moscou, 2<sup>ème</sup> Edition, (1675)
- [38] A.Nouri, S. Chguetmi and N. Belabed, Surf.Interface Anal. 38, (2006)

## Résumé :

Dans ce présent travail, nous avons élaboré un modèle numérique pour étudier un matériau semi-conducteur de type p (p- GaAs) utilisant la méthode Monte Carlo. Ce modèle traite l'interaction électron-matière, en particulier la technique cathodoluminescence.

La procédure de calcul utilisé dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons dans la matière et l'influence des paramètres du faisceau électronique (nombres des électrons  $N_e$ , l'énergie d'accélération  $E_0$ ).

Pour d'écrire les collisions des électrons avec la matière, la modélisation de la diffusion élastique étant basée sur la section efficace écrantée modifiée de Rutherford.

Le problème traité dans ce mémoire est l'échauffement du matériau p- GaAs pendant le bombardement par le faisceau électronique incident qui se traduit par une augmentation de température  $\Delta T$ . L'influence de  $\Delta T$  sur l'intensité de CL est aussi étudiée.

Les résultats de calcul montrent que  $\Delta T$  prend des valeurs maximales à la surface, puis elle diminue (exponentiellement) en fonction de la profondeur. Les valeurs de  $\Delta T$  dépendent aussi des paramètres du faisceau (courant absorbé  $I_p$  et énergie d'accélération  $E_0$ ).  $\Delta T$  augmente avec l'augmentation du nombre d'électrons. Par contre, elle diminue avec l'augmentation de l'énergie d'accélération.

Concernant le signal CL, il n'y a aucune influence dans le cas de faible injection (faible  $I_p$ ). Mais pour de forte  $I_p$  ( $> 10^{-13}$  A), l'intensité CL diminue lorsque  $\Delta T$  augmente, en particulier, pour les faibles énergies d'accélération.

Ces résultats obtenus par le modèle proposé sont comparés à ceux de l'expérience, et à d'autres résultats théoriques disponible dans la littérature. Ils sont en bon accord. Cette comparaison a permis de déduire des valeurs pour les paramètres physiques (la longueur de diffusion  $L_n$  et le coefficient d'absorption  $\alpha$ ).

**Mots clés :** Interaction électron- matière, cathodoluminescence, simulation Monte Carlo, GaAs.

**Abstract:**

In the present work, we have elaborated a numerical model to study a semiconductor doped the type p(p- GaAs) using the Monte Carlo method. This model treat the electron-matter interaction, particularly, the cathodoluminescence technique.

The calculation procedure take into a count the random walk of the electron inside the material and the influence of the electron beam parameters (number of electrons  $N_{el}$ , accelerating energy  $E_0$ ).

The description of the elastic scattering is based on the modified screened Rutherford differential cross section.

The major problem treated in this these is the temperature rise ( $\Delta T$ ) which is due to the electron beam bombardment. The influence of  $\Delta T$  on cathodoluminescence signal is also studied.

The calculation results show that  $\Delta T$  is high at the surface, then it decreases (exponentially) as a function of depth. The  $\Delta T$  depends also on beam parameters (absorbed current  $I_p$  and accelerating energy  $E_0$ ).  $\Delta T$  increases with increasing of (electron number), contrarely,  $\Delta T$  decreases with increasing of accelerating energy.

Concerning the CL signal, there is no influence on CL intensity for the weak beam currant  $I_p$ , but for the high  $I_p$  ( $>10^{-13}$ A) case, we remarked that CL intensity decreases with increasing of  $\Delta T$ , particularly in the weak accelerating energy  $E_0$ .

Our theoretical results are compared with the available experimental data and other theoretical results. This comparison leads to can be deduce values for different physical parameters,( diffusion length  $L_n$  , absorption coefficient  $\alpha$  ), and the great coherent between these models.

**Keywords:** Interaction electron - matter, cathodoluminescence, simulation Monte Carlo, GaAs.

## ملخص:

في هذه الأطروحة تم انجاز نموذج حسابي على مادة زرنيخ الغاليوم الشبه ناقلة من نوع p (p-GaAs) باستعمال تقنية المحاكاة مونتني كارلو. والذي يتطرق الى دراسة التفاعل الكترون- مادة وبالخصوص تقنية التالق المهبطي .

طريقة الحساب المستعملة في هذه النمذجة تاخذ بعين الاعتبار السير العشوائي للالكترونات داخل المادة و كذلك تاثير عوامل الحزمة الالكترونية (عدد الالكترونات  $N_{el}$  و طاقة التسريع  $E_0$ ).

من اجل وصف التصادم الحادث بين الالكترونات الواردة والمادة يتم محاكاة التصادمات المرنة اعتمادا على المقطع الفعال للانعراج ل Rutherford

المشكل المعالج في هذه الأطروحة هو ارتفاع درجة حرارة المادة الناتج عن القصف الالكتروني الذي نعبر عنه ب  $\Delta T$  وتأثيرها على شدة التالق المهبطي .

بينت نتائج الحساب ان  $\Delta T$  تاخذ قيمة حدية عند سطح المادة ثم تنخفض اسيا بدلالة العمق (البعد عن السطح ) و هذا التغيير في درجة الحرارة يتعلق كذلك بعوامل الحزمة (عدد الالكترونات و طاقة التسريع ) بحيث ترتفع بارتفاع عدد الالكترونات و بالعكس فانها تنخفض بارتفاع طاقة التسريع.

فيما يتعلق بشدة التالق المهبطي فانها لا تتاثر في حالة الحقن الضعيف ( الحالة التي يكون فيها شدة التيار  $I_p$  ضعيفا ) اما اذا كان الحقن قويا فانها تنخفض بارتفاع  $\Delta T$  و بالخصوص اذا كانت طاقة القصف كبيرة ) .

مقارنة النتائج المتحصل عليها باستعمال هذا النموذج مع النتائج التجريبية الموجودة في المراجع و اخرى نظرية اظهرت توافقا جيدا . هذه المقارنة سمحت لنا باستنتاج قيم المعاملات الفزيائية (طول الانتشار  $L_n$  ومعامل الامتصاص  $\alpha$ ).

كلمات مفتاحية: التفاعل إلكترون - مادة، التالق المهبطي، محاكاة مونتني كارلو، زرنيخ الغاليوم GaAs