

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

UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N°d'ordre:

Série:

THESE
PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER
EN SCIENCES DES MATERIAUX

OPTION
SEMICONDUCTEURS

ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRON-MATIERE PAR
LA METHODE MONTE CARLO.
APPLICATION SUR LE GaAs TYPE P

PAR
BENCHARIF MOHAMMED FAKHRI

Soutenu le : 09/07/2005

Devant le jury:

Président:	R.Halimi	Prof	Université Mentouri Constantine
Rapporteur:	A.Nouiri	MC	Université Mentouri Constantine
Examineurs:	M.S.Aida	Prof	Université Mentouri Constantine
	K.Guergouri	Prof	Université Mentouri Constantine

Remerciement

Le présent travail a été réalisé au laboratoire de physique et chimie des semiconducteurs à l'université Mentouri Constantine, sous la direction de Monsieur Nouiri abd El Kader.

Je tiens à témoigner à Monsieur A.Nouiri Maître de Conférence à l'université Mentouri Constantine, ma profonde gratitude pour son encadrement efficace et pour son attention à cette thèse, à qui j'adresse également mes plus vifs remerciements pour m'avoir fait profiter de sa compétence et pour sa disponibilité pour les séances de discussion.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Monsieur Halimi Rachid professeur à l'université Mentouri Constantine pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Egalement, je remercie Monsieur Aida Mohammed Salah professeur à l'université Mentouri Constantine pour avoir accepté d'examiner ce travail, que je prie qu'il veuille bien accepter mes plus vifs remerciements.

Nous sommes particulièrement redevables envers Monsieur Guergouri Kamel professeur à l'université Mentouri Constantine qui nous a fait l'honneur d'examiner cette thèse.

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

Mercie également à Abd El Ali, Mohammed Amaziane, Mourad (B et F) et Khaled pour leurs présence amicale, leurs aide et les agréables moments passés autour d'une tasse de thé.

Je ne puis conclure cet évènement traditionnel sans y inscrire ma gratitude pour ceux qui, dans mon entourage, ont supporté avec patience mes humeurs sombres de chercheur tourmenté. Parmi eux mes parents, mes frères et sœurs et mes tantes qui, je l'espère, accueilleront avec soulagement le point final de ce travail.

Sommaire

INTRODUCION GENERALE.....	1
CHAPITRE I : INERACTION ELECTRON-MATIERE	
I.1. GENERALITES	3
I.1.1. Notions Fondamentales sur les Semiconducteurs.....	3
I.1.2. Notions sur l'électron.....	4
I.2. INTERACTION ELECTRON- MATIERE	4
I.2.1. Dispersion Elastique et Inélastique.....	4
I.2.2. Volume de Génération	8
I.2.3. Volume de Dissipation de l'Energie du Faisceau Electronique par Chocs Inélastiques	10
I.2.4. Parcours Electronique	11
I.2.5. Energie de Formation d'une Paire Electron-Trou.....	12
I.2.6. Estimation de la Densité des Porteurs en Excès	14
I.2.7. Phénomène de Recombinaison	14
I.2.7.1. Les processus de recombinaison.....	15
I.3. LA CATHODOLUMINESCENCE (CL).....	16
I.3.1. Définition	16
I.3.2. Caractéristiques et Applications	17
I.3.3. Comparaison de CL avec d'Autres Techniques	20
I.4. MATERIAU D'APPLICATION.....	22
I.4.1. Définition	22
I.4.2. Structure Cristalline	22
I.4.3. Structure de Bande.....	25
I.4.4. Concentration des Porteurs à L'Equilibre Thermique	26
CHAPITRE II : LA METHODE MONTE CARLO	
II.1. INTRODUCTION	28
II.2. RESOLUTION D'UN PROBLEME SCIENTIFIQUE ET ROLE DE L'ORDINATEUR.....	31

III.3.3. Conception, Exécution et Rendement d'un programme MC	63
III.4. PROGRAMME DE SIMULATION	63
III.5. ORGANIGRAMME	65
III.6. CONCLUSION.....	66
CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSIONS	
IV. INTRODUCTION	67
IV.1. TRAJECTOIRE DES ELECTRONS	67
IV.2. PROFONDEUR DE PENETRATION	69
IV.3. PROFIL DE DISTRIBUTION	70
IV.4. SIGNAL CATHODOLUMINESCENCE	71
IV.5. INFLUENCE DES PARAMETRES DE VOLUME (L_n, α)	72
IV.5.1. Influence du Coefficient d'Absorption (α)	72
IV.5.2. Influence de la Longueur de Diffusion (L_n).....	73
IV.6. INFLUENCE DES PARAMETRES DU FAISCEAU (E_0, N_{el}).....	75
IV.7. COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE	77
IV.8. CONCLUSION.....	79
CONCLUSION GENERALE.....	80
REFERENCES	81

INTRODUCTION GENERALE

Durant ces dernières années, la plus part des méthodes modernes d'analyse et de caractérisation des matériaux semiconducteurs prennent la voie de la microscopie électronique à balayage (MEB) sous ces différents modes de sortie.

Cependant dans la caractérisation, la connaissance des propriétés électroniques et optiques est d'une importance majeure pour résoudre les problèmes posés par les matériaux micro-optoélectroniques, et semiconducteurs qui sont requis à l'industrie électronique et la nanotechnologie.

En effet, l'interaction électron-matière offre la possibilité de déterminer avec succès des informations quantitatives et qualitatives au propos, des paramètres électriques et optiques des matériaux [9]. L'étude de l'arséniure de Gallium (GaAs) par la cathodoluminescence (CL) exige une bonne simulation fiable et exacte du signal CL en fonction de ces paramètres, c'est pour ça nous avons choisi la méthode Monte Carlo (MC) comme méthode de simulation grâce aux avantages qu'elle nous donne dans ce genre de phénomène.

Les équations gérant le mouvement des électrons à l'intérieur du semiconducteur et la distribution des porteurs doivent être aussi reliées aux processus de la recombinaison des porteurs en excès. Quoique ceci est une tâche généralement complexe mais elle est largement simplifiée dans la majorité des travaux précédent [67,68].

Dans ce travail nous avons calculé la profondeur de pénétration ainsi que le parcours électronique (la trajectoire des électrons) dans le GaAs type p et leurs variations en fonction de l'énergie d'accélération. On a également étudié la dépendance de l'intensité de la CL en fonction de l'énergie d'accélération E_0 et le nombre d'électrons N_{e0} du faisceau incident.

Le comportement théorique des courbes $I_{CL}(E_0)$ fait apparaître que la relation entre l'intensité de la CL et les autres paramètres est complexe et généralement non linéaire.

La présente étude est organisée en quatre chapitres :

Le premier chapitre concerne le concept théorique et le fondamentale physique de l'interaction électrons-matière dont la maîtrise est indispensable pour pouvoir faire des mesures expérimentales ou bien des calculs numériques par la voie de la simulation.

La modélisation d'un tel phénomène est rendue impérative dans la désignation des composants semiconducteurs ainsi pour la localisation des frontières du volume de génération.

Dans le deuxième chapitre, une description générale de la méthode Monte Carlo (MC) utilisé dans le présent travail est fourni, accompagnée des bases physiques et statistiques prisent en considération dans tous les méthodes de simulation (MC). Ensuite on donne quelques applications de cette méthode suivie d'une comparaison avec d'autres méthodes de simulations.

Le troisième chapitre contient le détail de notre modèle proposé, c'est l'intérêt majeur de ce mémoire, où les bases physiques des calculs sont détaillées aussi bien que la séquence de calcul. 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, qui décrivent l'influence des paramètres du faisceau électronique incident (l'énergie d'accélération E_0 , nombre d'électrons N_{ele}) et du volume (matériau) tels que la longueur de diffusion L_n , le coefficient d'absorption α .

A partir de ce modèle, nous déduisons les paramètres quantitatifs liés au faisceau incident et au volume du matériau analysé, en ajustant les courbes théoriques avec les courbes expérimentales.

GÉNÉRALITÉS

I.1.1. Notions Fondamentales sur les Semiconducteurs

Semiconducteurs, matériau à l'état solide ou liquide, qui conduit l'électricité à température ambiante, mais moins aisément qu'un métal conducteur. La conductivité électrique désigne la capacité d'un corps à conduire un courant électrique lorsqu'une tension lui est appliquée. C'est l'une des propriétés physiques qui varie le plus d'un corps à l'autre. Des métaux, tels que le cuivre, l'argent et l'aluminium, sont d'excellents conducteurs. Au contraire, des isolants tels que le diamant et le verre sont de mauvais conducteurs. Aux basses températures, les semi-conducteurs purs se conduisent comme des isolants. À des températures élevées ou en présence d'impuretés ou de lumière, la conductivité des semi-conducteurs s'accroît fortement, pouvant même devenir comparable à celle des métaux. Les propriétés physiques des semi-conducteurs sont étudiées à l'état physique solide.

Les principaux semi-conducteurs sont l'arséniure de gallium (GaAs), le silicium (Si), le germanium (Ge), le sélénium (Se), et le séléniure de zinc (ZnSe), l'oxacide de zinc (ZnO), le tellure de cadmium (CdTe). L'accroissement de la conductivité en fonction de la température, de la lumière ou des impuretés s'explique par une augmentation du nombre d'électrons de conduction, qui transportent le courant électrique. Dans un semi-conducteur pur tel que le silicium, les électrons périphériques d'un atome sont mis en commun avec les atomes voisins pour établir des liaisons covalentes qui assurent la cohésion du cristal. Ces électrons périphériques, dits électrons de valence, ne sont pas libres de transporter le courant électrique. Pour produire des électrons de conduction, on expose à la température ou à la lumière les électrons périphériques, afin de rompre les liaisons covalentes : les électrons sont alors mobiles. Les défauts ainsi créés, appelés « trous » ou « lacunes », participent au flux électrique. On dit que ces trous sont porteurs d'électricité positive. Ces lacunes expliquent l'augmentation de la conductivité électrique des semi-conducteurs avec la température.[1]

L'ajout d'impuretés au semiconducteur ou dopage, est un autre moyen d'augmenter la conductivité électrique du corps. Les atomes du matériau de dopage ou dopant (donneurs ou accepteurs d'électrons), et ceux de l'hôte ont un nombre différent

d'électrons périphériques. Le dopage produit ainsi des particules électriques chargées positivement (type P) ou négativement (type N).

I.1.2. Notions sur l'électron

Electron, particule élémentaire constitutive, avec les protons et les neutrons, des atomes. L'électron est l'un des constituants fondamentaux de la matière, au même titre que les quarks. Il fait partie de la famille des leptons, qui comprend également le muon, le tauon, et les neutrinos. De plus, les électrons sont des fermions car leur spin est de $1/2$. Le concept de spin est lié à la théorie quantique, que nous devons au physicien allemand Max Planck, qui a découvert la discontinuité de l'énergie en introduisant la notion de quanta, ainsi qu'au physicien français Louis de Broglie, prix Nobel en 1929 pour avoir découvert, en 1924, la nature ondulatoire des électrons [2].

Les électrons ont une masse d'environ $9,1083 \times 10^{-28}$ g et une charge électrique élémentaire de $1,602 \times 10^{-19}$ C (coulombs). La charge de l'électron est l'unité de base en électricité.

Les électrons possèdent un moment magnétique qui est égal à $0,92827 \times 10^{-23}$ A.m², et un spin demi-entier caractéristique des fermions. Aussi, l'électron satisfait au principe d'exclusion de Pauli, qui permet la construction d'édifices atomiques stables et qui est à l'origine de la classification périodique des éléments.

L'antiparticule de l'électron est le positron (ou positon), qui se manifeste dans la radioactivité bêta, ou dans l'annihilation des rayons gamma par création de paires électron-positron.

I.2. INTERACTION ELECTRON- MATIERE

En 1972, Kanaya et Okayama démontrent la limitation du modèle d'Archard en proposant leur modèle semi empirique qui avait un domaine de validité assez large (10 à 1000 KeV) et qui pouvait être affiné afin d'apporter une approche globale du problème de l'interaction électron-matière.[7]

I.2.1. Dispersion Elastique et Inélastique

Le bombardement d'un semiconducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue globale on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastique et d'autres inélastique.[4] (Voire figure (1.1))

La diffusion ou la dispersion élastique des électrons par les atomes donne naissance à des électrons rétrodiffusés, où les électrons changent de direction sans que leur énergie change, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le MEB pour le contraste du nombre atomique et les effets de diffraction.

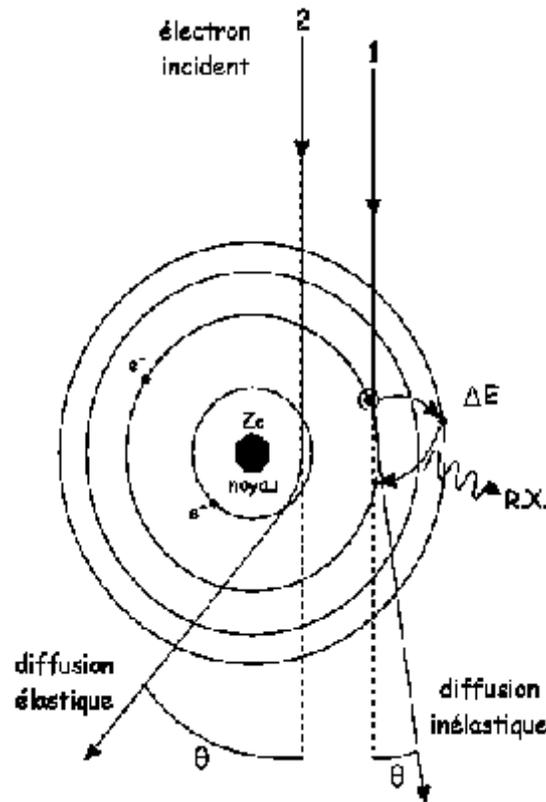


Figure (1.1) : schéma représentant la diffusion élastique et inélastique

Les collisions inélastiques des électrons d'atomes cibles, qui sont soit éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse, provoque une dispersion inélastique qui donne naissance à une grande variété de signaux (figure1.2) de processus utiles tel que :

-Electrons secondaires

Les électrons secondaires (SE) sont ceux générés par l'atome cible après leurs collisions avec le faisceau incident. Ces électrons ont une énergie de l'ordre de 1 à 500 eV et avant de pouvoir quitter l'échantillon, ils subissent encore à une perte aléatoire d'énergie. Ce phénomène a lieu pour des distances plus proches à la surface (de 5 à 10

nm de la surface). Donc, ces électrons donnent des informations spécifiques dans la zone d'interaction avec la matière.

-Electron rétrodiffusés

Le faisceau électronique incident subit aux collisions élastiques et inélastiques avec la matière. Quelques électrons peuvent rebrousser son chemin en sortant du matériau. Ce sont les électrons rétrodiffusés. L'émission de ces derniers, avec une fraction de perte d'énergie généralement de 50% à 80% par rapport à l'incident, dépend de la nature du matériau bombardé et de l'énergie des électrons incidents.

-Rayons X

Les électrons incidents peuvent exciter les atomes de la cible, qui deviennent instables ; sa durée de vie est de l'ordre de 10^{-10} s. l'atome tend à l'état fondamental par suite des transitions électroniques, c'est-à-dire l'électron saute d'un niveau externe au niveau plus profond ; une énergie est ainsi libérée sous forme des rayons X caractéristiques.

En outre, les électrons subissent à une décélération dans le matériau et rayonnent un champ électromagnétique sous forme des rayons X fluorescents (continu). On peut obtenir des informations très importantes, concernant la composition intérieure du matériau et la contamination de la surface, à l'aide du traitement de ces rayonnements.

-Electrons absorbés

Les électrons sont fortement absorbés par la matière ou les mécanismes d'absorption prépondérants étant les diffusions élastiques et inélastiques. La section efficace de diffusion étant élevée ; les électrons sous l'effet des diffusions perdent successivement leur énergie de façon aléatoire jusqu'à l'arrêt éventuel. Ceci peut produire un courant dans la cible, que l'on peut mesurer expérimentalement.

-Electrons Auger

Au lieu d'être émise directement sous forme du rayonnement X, l'énergie libérée durant les transitions entre les divers états électroniques, peut être utilisée pour éjecter un deuxième électron d'un autre niveau. Ce phénomène a lieu près de la surface (de 1 à 5 nm) et nous permet donc l'étude la surface et la composition chimique de la cible.

-Electrons transmis

Les électrons primaires peuvent traverser l'échantillon, si celui-ci est suffisamment mince. Les électrons transmis perdent, à cause des collisions inélastiques avec les atomes du matériau, une fraction significative de leur énergie initiale.

-Etats de surface

L'électron, comme particule chargée, subi à une interaction image attractive du matériau semi-infini. Cette interaction peut être suffisamment forte pour que les électrons soient localisés sur la surface du matériau.

-Cathodoluminescence (CL)

Le bombardement électronique, dans certains matériaux (minéraux naturels, oxydes, semi-conducteurs), provoque l'émission des photons lumineux (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R). L'émission revient aux centres luminescents liés à la présence des défauts dans la matière ou bien à des transitions bande à bande. La CL étant donc liée au gap du semiconducteur et à la présence d'éléments étrangers, que l'on peut identifier et connaître leur répartition au sein du matériau [5], où chaque processus est déterminé par sa probabilité de production qui est décrite par une section efficace.

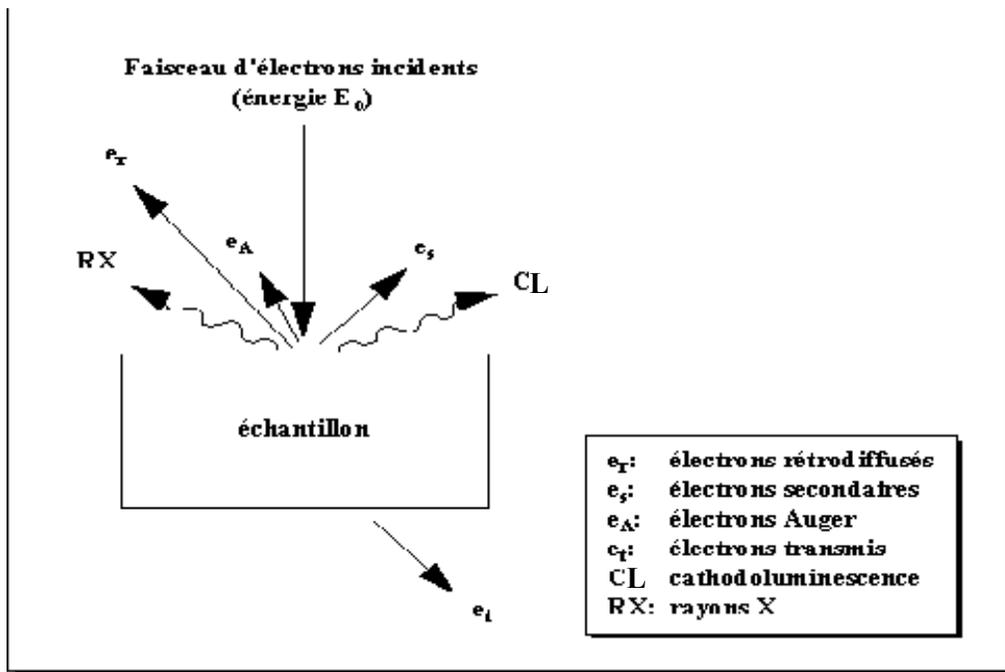


Figure (1.2) : Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons

1.2.2. Volume de Génération

Le volume de génération est le lieu de création des paires électrons-trous, il prend une forme qui dépend du nombre atomique du matériau (z) et de l'énergie d'accélération des électrons E_0 . [6]

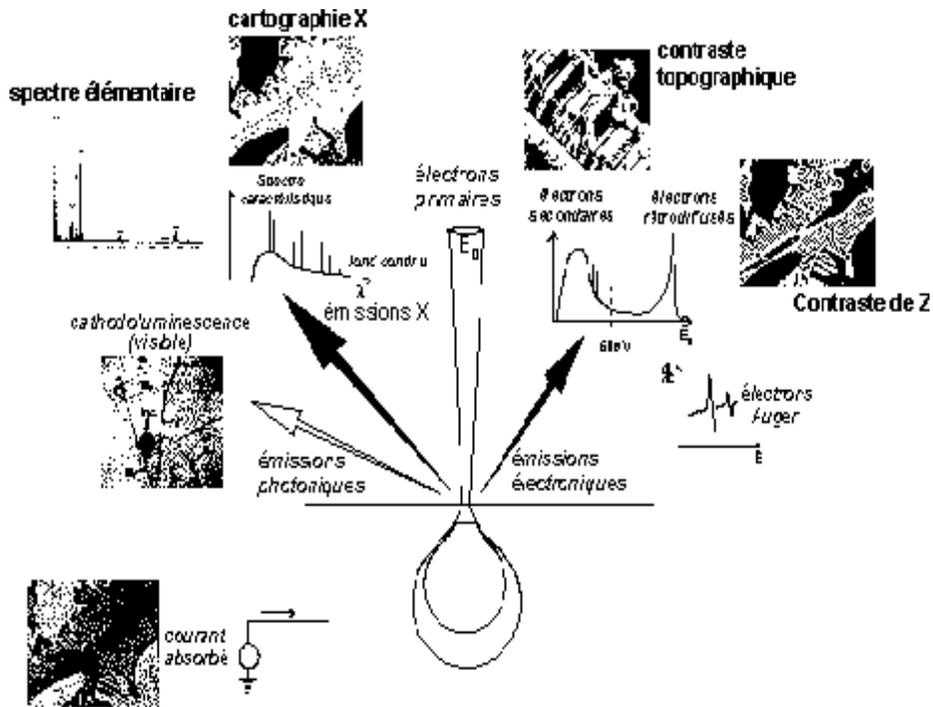
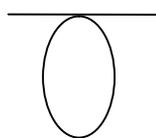


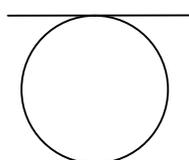
Figure (1.3) : mode de sortie pour chaque phénomène observé

Suivant le modèle de Kanaya et Okayama [7], le volume de génération prend trois formes différentes suivant la valeur de z :

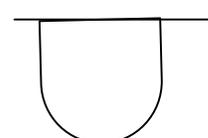
- $Z < 15$ forme d'une poire
- $15 < Z < 40$ forme sphérique
- $Z > 40$ forme hémisphérique



forme d'une poire



forme sphérique



forme hémisphérique

Figure (1.4) : les formes du volume de génération d'après [4,7]

L'interaction électrons-matière est donc le résultat de séries successives des collisions élastiques et inélastiques où l'énergie des électrons primaires pénétrant se dissipe dans un volume appelé volume d'interaction ou de génération et suit une fonction qui détermine la perte de cette énergie dans une direction normale à la surface de l'échantillon. [7]

La figure (1.5) illustre le volume de génération et la résolution spatiale des différents phénomènes qui ont lieu suite à l'interaction électrons-matière [3,8].

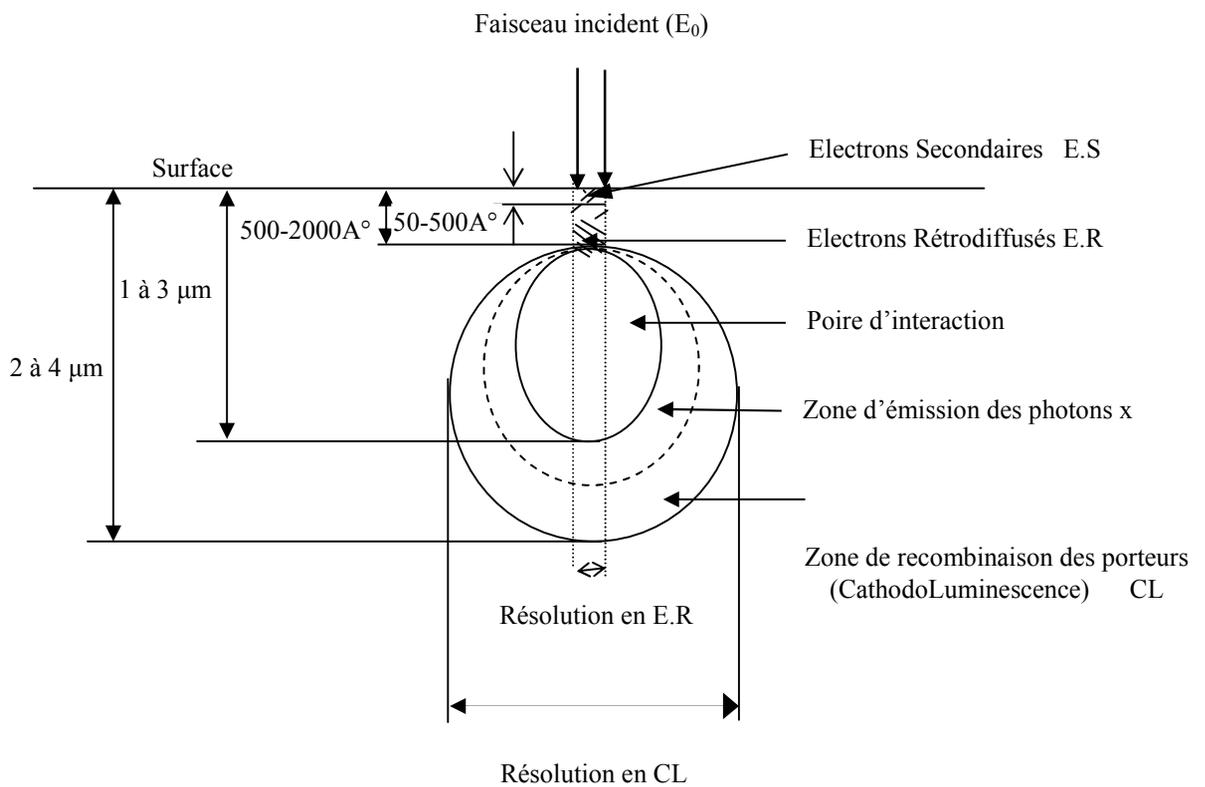


Figure (1.5). Résolution spatiale [3,8]

1.2.3. Volume de Dissipation de l'Énergie du Faisceau Electronique par Chocs Inélastiques

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 analysée en employant le modèle de Rutherford [9].

La section efficace totale de diffusion relativiste de Rutherford est donnée par [9]:

$$\sigma = (5.21 \times 10^{-21}) \left(\frac{Z}{E}\right)^2 \frac{4\pi}{\delta(\delta+1)} \left(\frac{E+m_0c^2}{E+2m_0c^2}\right)^2 \quad (1.1)$$

Où Z est le nombre atomique de l'atome diffusé, E est l'énergie des électrons en KeV, m_0 et c sont respectivement la masse élémentaire de l'électron et la vitesse de la lumière dans le vide (3.10^8), et δ est un paramètre donné par la relation [9] :

$$\delta = (3.4 \times 10^{-3}) Z^{0.67} / E \quad (1.2)$$

L'angle θ pour un événement particulier de diffusion peut être obtenu à partir de la probabilité pour la diffusion élastique dans une gamme angulaire particulière (0 à θ), qui peut être dérivée de l'équation (1.1) ainsi, un rapport obtenu à partir de la probabilité de distribution est [9] :

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\delta R}{1+\delta-R} \quad (1.3)$$

Où R est un nombre aléatoire uniformément distribué ($0 \leq R \leq 1$). La correction relativiste dans l'équation (1.1) peut être ignorée pour des énergies d'électron moins de 50 KeV, c.-à-d., pour la plupart des travaux du MEB. Pour des énergies plus élevées, la correction relativiste de la section efficace est considérable et devrait être appliquée.

Les chocs inélastiques des électrons incidents avec les électrons des couches profondes et de valence des atomes, engendrent une perte d'énergie des électrons incidents au cours de leur trajectoire [10] ; Ce processus statistique, peut être décrit de façon continue par la formule de Bethe (1933) [9,11,12]. cette formule traduit la perte d'énergie moyenne dE par unité de longueur dS .

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{EA} \ln\left(\frac{1.166E}{j}\right) \quad (1.4)$$

Où e est la charge électronique, N_A est nombre d'Avogadro, ρ est la densité, A est le poids atomique, E est l'énergie moyenne d'électron, et J est le potentiel moyen d'ionisation. Ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par [9,13] :

$$j = (9.76 Z + 58.5 Z^{-0.19}) 10^{-3} \quad (\text{KeV}) \quad (1.5)$$

Pour les basses énergies d'électron ($E < 6.34\text{J}$), la modification empirique à l'expression de Bethe par Rao-Sahib et Wittry devrait être employé [14].

D'autre part l'interaction électrons-matière est caractérisée par d'autres paramètres tel que le parcours électronique, l'énergie de formation d'une paire électron-trou qui vont être analysés un par un dans ce qui suit.

I.2.4. Parcours Electronique

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersion élastique et inélastique dans le semiconducteur, et ont des trajectoires quelconques. Leurs profondeur de pénétration R (range) est donnée par plusieurs expression proposées par différents auteurs :

La relation générale du parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie d'accélération c'est à dire l'énergie du faisceau incident E_0 [9] sous la forme suivante :

$$R_e = (K/\rho) E_0^\alpha \quad (1.6)$$

Où ρ est la densité du matériau, k dépend du nombre atomique du matériau et également formules ont été également proposées par d'autres auteurs.

En 1957, les travaux de Gruen ont conduit à un parcours électronique donnée par [9,15] :

$$R_G = 4.57 E_0^{1.75} \quad (1.7)$$

Là où R_G est en $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ et E_0 est en keV.

Selon Everhart et Hoff :

$$R_e = (0.0398/\rho) E_0^{1.75} \quad (\mu\text{m}) \quad (1.8) [12]$$

Là où ρ est en g/cm^3 et E_0 est en KeV.

Ces deux résultats ((1.7) et (1.8)) ont été dérivés pour des électrons de gamme d'énergie de 5 à 25 KeV et de nombres atomiques $10 < Z < 15$.

Une relation dérivée pour le GaAs par Wittry et Kyser [16] est utilisée plus tard :

$$R \text{ (g/cm}^2\text{)} = 2.56 \cdot 10^{-3} \left(\frac{E_0}{30} \right)^{1.7} \quad (1.9)$$

L'exposant 1.7 dans cette dernière équation n'est pas précis à basse énergie [9].

Une expression plus générale dérivée par Kanaya et Okayama [7] s'est avérée pour être conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama [7,9] est :

$$R_e = (0.0276A/\rho Z^{0.889}) E_0^{1.67} \quad (\mu\text{m}) \quad (1.10)$$

Là où E_0 est en KeV, A est le poids atomique en g/mol, ρ est en g/Cm^3 , et Z est le nombre atomique.

La figure (1.6) montre une comparaison du parcours électronique R_e en fonction de l'énergie d'accélération E_0 calculée selon les modèles d'Everhart-Hoff et de Kanaya-Okayama pour différents matériaux [9].

1.2.5. Energie de Formation d'une Paire Electron-Trou

Cette énergie est définie comme une énergie moyenne dissipée pour créer une paire électron-trou. Dans la plus part des cas elle est considérée comme l'énergie d'ionisation qui est donnée par la relation suivante :

$$E_i = 2.8E_g + M \quad (1.11)$$

Où $0 < M < 1$ eV dépend du matériau, et il est indépendant de l'énergie du faisceau d'électron [17].

Le tableau (1.1) résume des valeurs expérimentales de l'énergie de création des paires électrons-trous dans le GaAs à 300k par plusieurs auteurs utilisant différentes sources d'irradiation.

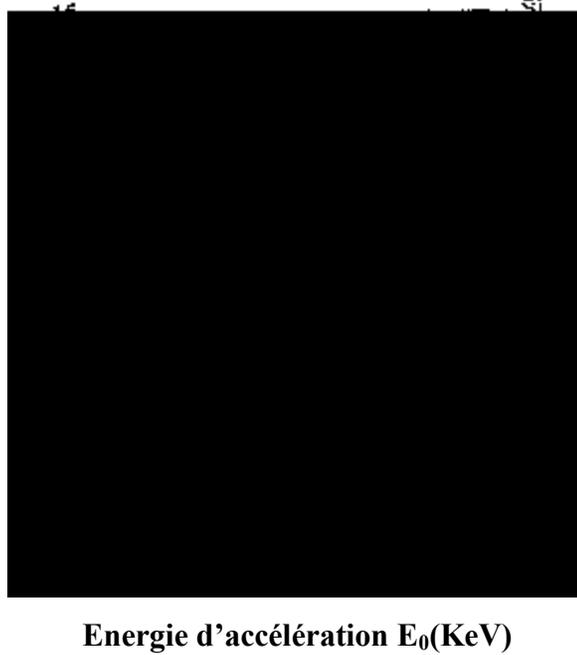


Figure (1.6): La profondeur de pénétration (parcours électronique) R_e on fonction de l'énergie d'accélération E_0 calculée à partir des modèles de Kanaya-Okayama et Everhart-Hoff [9].

E_i (ev/paire)	Source d'irradiation	Auteur
6.3	Electrons, 45.2 KeV (EB)	Pfister
4.6	Electrons, 30 KeV (EB)	Wittry et Kyser
6.8	Electrons, <3 KeV (EB)	Kalibjia et Mayeda
3.2-4.4	Electrons, 20-40 KeV (EB)	Alferov et al
4.27±0.05	α , 5.486 MeV ^{241}An	Eberhardt et al
4.35±0.02	α , 5.486 MeV ^{241}An	Kobayashi et al
4.57±0.05	β , 115 KeV ^{57}Co	
4.6	Electrons, <15 KeV (EB)	Siekanowics et al
4.68±0.14	Electrons, 10-50 KeV (EB)	Wu et Wittry

Tableau (1.1) : valeurs expérimentales de l'énergie de création des paires électrons-trous dans le GaAs à 300 k d'après [4].

I.2.6. Estimation de la Densité des Porteurs en Excès

L'interaction inélastique entre un électron incident et un électron de l'atome du semiconducteur génère une paire électron-trou (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 électron-trou...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 (c'est à dire, le nombre de paires de électron-trou généré par le rayon d'électrons incident) est donné par :

$$G = E_0(1-\gamma)/E_i \quad (1.12)$$

Là où E_0 est l'énergie de faisceau d'électrons, E_i est l'énergie d'ionisation (c.-à-d., l'énergie requise pour la formation d'une paire électron-trou), et γ représente la perte d'énergie fractionnaire du faisceau d'électrons dû aux électrons rétrodiffusés. L'énergie E_i d'ionisation, est reliée au gap du matériau [9].

I.2.7. Phénomène de Recombinaison

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

Dans l'étude des phénomènes de luminescence dans les semiconducteurs, on considère que l'effet de la variation des porteurs minoritaires est prépondérant.

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 , et le temps qui s'est écoulé pour effectuer ce parcours s'appelle la durée de vie τ .

La recombinaison au sein d'un semiconducteur d'électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes :

1/par transition d'un électron de la bande de conduction E_c vers la bande de valence E_v c'est à dire recombinaison directe.

2/par l'intermédiaire d'un centre recombinant, l'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successives, tout d'abord l'électron(ou le trou) est capté par un centre localisé(dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou(ou l'électron) qui se recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison indirecte).

La contribution relative des deux mécanismes aux 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 concentration des porteurs à l'équilibre.
- de la température.

I.2.7.1. Les processus de recombinaison

Selon le mécanisme de recombinaison et selon la forme sous laquelle est libérée l'énergie du porteur capté par le centre d'impureté on distingue plusieurs processus où ils sont représentés sur la figure (1.7).

La recombinaison radiative donne naissance à des photons, elle a été étudiée en détail depuis 1953 [9].

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

a / la luminescence intrinsèque (ou bande à bande) où on distingue deux transitions :

i) transition directe : Dans ce cas, le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au même vecteur d'onde k . 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.

ii) transition indirecte : Dans ce cas, la transition n'est plus verticale, et par conséquent la différence de quantité de mouvement entre les deux niveaux n'est pas négligeable. Pour satisfaire le principe de conservation de quantités de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, qui est le phonon de vecteur d'onde k_1 . Il s'agit donc ici d'une interaction de trois particules, dont la probabilité est

plus faible. C'est ainsi que l'émission de luminescence dans les semiconducteurs à gap indirect est difficile à observer.

b /la luminescence extrinsèque (bande-niveau) : la luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et aux défauts.

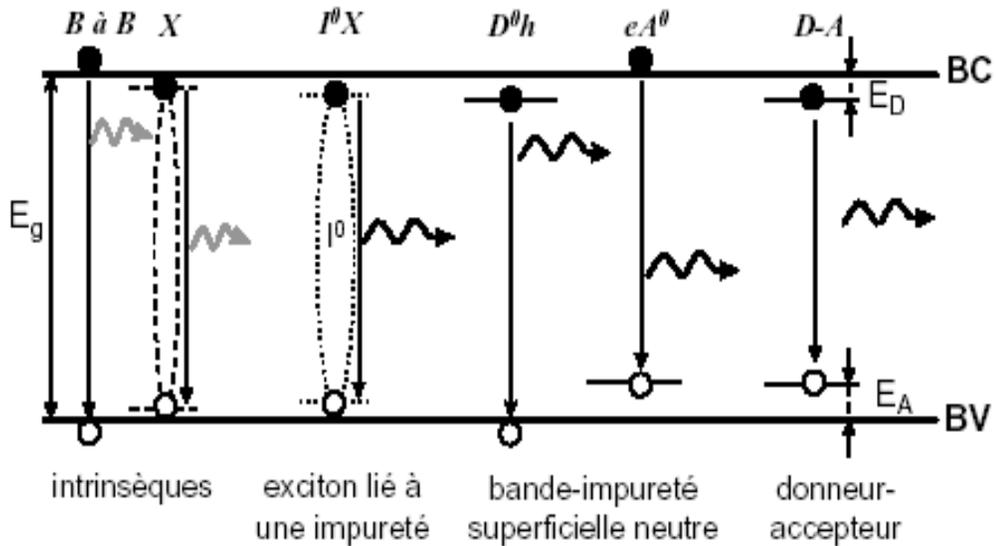


Figure (1.7) : illustration des processus de recombinaisons radiatives dans un semiconducteur à bande interdite directe

I.3. LA CATHODOLUMINESCENCE (CL)

I.3.1. Définition

Le phénomène de CathodoLuminescence (CL) consécutif à l'excitation de matériaux luminescents par un faisceau électronique est utilisé depuis longtemps dans des dispositifs comportant des écrans fluorescents (tubes cathodiques, microscopes électroniques, etc). Avec le développement de la microscopie électronique, l'imagerie et la spectroscopie de CL se sont imposées comme technique pour l'analyse chimique, électronique et structurale des matériaux luminescents à l'échelle du micron.

Définissons maintenant en détail les processus responsables de la CL. La CL est l'émission de photons, du proche infrarouge au proche ultraviolet, consécutive à l'excitation par un faisceau électronique ; C'est un phénomène de luminescence [26]. Il

Il y a plusieurs types de luminescences tels que la photoluminescence (excitation par des photons), l'électroluminescence (excitation par un champ électrique) etc...Lorsqu'on excite un solide, celui-ci peut émettre des photons pour se désexciter. Les processus de désexcitations peuvent être classés en deux groupes : les actes thermiques et non thermiques. La luminescence est un processus non thermique (l'émission croît quand la température décroît contrairement aux processus thermiques).

De plus, l'émission peut avoir lieu dans une région où le solide est transparent, ce qui est à l'opposé de la loi de Kirchhoff [18]. La luminescence fait aussi partie des rayonnements déséquilibrés, elle se caractérise par une durée finie dépassant les périodes d'oscillations lumineuses (contrairement aux processus Raman et Rayleigh)[18].

Les constants progrès en physique des matériaux requièrent l'utilisation, mais aussi le développement, d'outils et de techniques de plus en plus performants permettant d'analyser leurs structures à une échelle toujours plus petite [18]. La résolution des dispositifs classiques de CL est généralement limitée par le domaine d'interaction électron-matière et la portée du transfert d'énergie au sein du matériau [19]. Aller au-delà de cette limite est en principe possible en détectant les photons très localement par l'intermédiaire d'une pointe-sonde (champ proche optique)[18].

I.3.2. Caractéristiques et Applications

La CL est un puissant outil de caractérisation de la matière [9,20], permettant une observation des matériaux luminescents. Associée à la Microscopie Electronique à Balayage (MEB), la CL nous ouvre l'accès à de nombreuses informations chimiques. En effet, la durée de vie et la longueur d'onde de la luminescence sont fortement dépendantes de la structure électronique qui est imputable à la composition chimique, à la structure du matériau, à un éventuel dopage ou à la présence d'impuretés. Ces différentes propriétés sont donc accessibles par le biais d'études spectroscopiques ou d'études dynamiques sur la durée de vie et permettent d'atteindre des informations quantitatives fiables en relevant des paramètres électroniques et optiques locaux du matériau comme la longueur de diffusion, le coefficient d'absorption [21] et la recombinaison vis à vis des défauts tel que les dislocations, surface libre [22]...etc.

La CL est une technique mise à la disposition autant à des physiciens qu'à des géologues [23,24] et des biologistes [25]. Il s'agit d'une technique qui possède un large éventail d'application. Cependant, les images de CL ne possèdent pas une bonne résolution latérale (quelques micromètres), parce que l'énergie déposée par le faisceau électronique se disperse au sein du matériau [19].

Les processus d'absorption et d'émission peuvent être séparés par des intervalles de temps assez longs. Cela signifie qu'entre l'absorption et l'émission ont lieu d'autres processus qui assurent le maintien durable de la lumière après cessation de l'excitation. La luminescence ne dépend pas de la nature de l'excitation qui lui a donné naissance mais les mécanismes de luminescence seront différemment excités suivant la nature de l'excitation, sélective (privilégier un mécanisme de luminescence) ou collective (tous les mécanismes possibles sont simultanément mis à contribution).

La CL est une technique très importante qui a un large domaine d'application. Elle est appliquée sur une grande variété d'instruments modernes basés sur les tubes cathodiques comme par exemple : les oscilloscopes, les télévisions, les écrans fluorescents.

Le développement de la microscopie électronique donne à la CL comme une utilisation courante de microcaractérisation des matériaux luminescents.

La figure (1.8) illustre une présentation schématique du bombardement électronique utilisé dans la technique CathodoLuminescence (CL).

Les travaux de la CL consacrés sur l'imagerie, c'est l'observation visuelle de la luminescence et la modélisation des images par la luminescence non dispersive de l'échantillon, cette observation permet de localiser des zones de rendement radiatif différent [27,28,29]. Mais avant ces travaux, Smith [30] a proposé des applications de la CL pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs. Ceci est regroupé sur le tableau (1.2).

Nature des données	Informations Obtenues
Distribution spatiale de la luminescence	-Homogénéité -Composition chimique -Schéma de réaction à l'interface -Schéma de dislocation -Profil de diffusion
Intensité des luminescences	-Concentration des défauts -Longueur de diffusion -Vitesse de recombinaison en surface -Absorption de la lumière émise par le matériau
Spectre de distribution de la luminescence	-Composition -Structure de bande -Caractérisation
Energie d'excitation	-Densité des pièges -Effet de la température -Rendement des recombinaisons radiatives

Tableau (1.2) : Application de CL pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs [30]

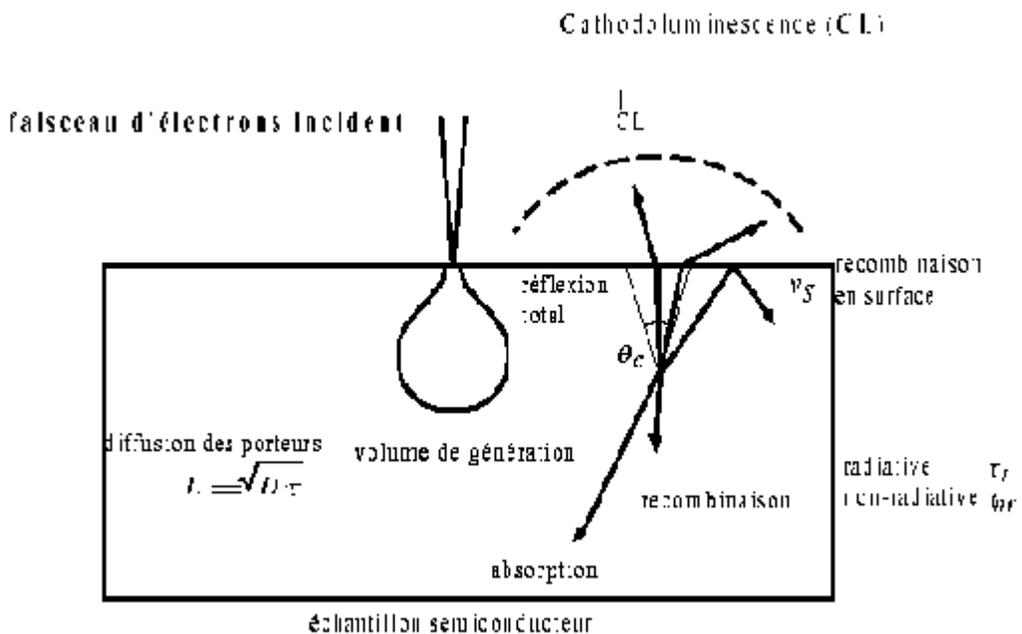


Figure (1.8) : présentation schématique du bombardement électronique utilisé dans la technique CathodoLuminescence (CL)

I.3.3. Comparaison de CL avec d'Autres Techniques

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

Comparée aux autres techniques de luminescence, telle que la photoluminescence (PL) et l'électroluminescence (EL) la CL donne des résultats similaires avec quelques différences possibles associées aux processus d'excitation des paires électrons-trous tel que la vitesse et le volume de génération.

En général, l'excitation par un faisceau d'électron conduit à une émission de signal de tous les mécanismes caractérisant l'interaction entre les électrons et le semiconducteur. Cependant, l'émission dans la Photoluminescence dépend fortement de l'énergie d'excitation donnant une information supplémentaire sur les mécanismes qui ont lieu, l'excitation est sélective. D'un autre côté la CL permet d'obtenir des informations plus détaillées en profondeur en faisant varier l'énergie d'accélération E_0 des électrons incidents et qui permet de séparer ceux qui peuvent avoir lieu en surface de ceux du volume. Un avantage supplémentaire de la CL par rapport à la Photoluminescence et l'Electroluminescence est la performance du MEB qui assure des analyses et des résultats provenant d'informations supplémentaires et complémentaires données tel que les électrons secondaires et les rayons x...etc.

Pour mieux comprendre l'utilité de CL comme étant un outil d'analyse quantitative, on va la comparer avec la technique de microanalyse par les rayons x. les deux techniques analysent les rayons électromagnétiques émis par l'échantillon suite à l'impacte d'un faisceau d'électrons. La différence majeure provient de la nature des rayons analysés où les rayons x émis sont dus à des transitions concernant les niveaux atomiques, donc ils renseignent sur la nature chimique des atomes particuliers et des défauts. Par contre la CL analyse des photons émis dans le domaine qui se prolonge du proche ultraviolet, passant par le visible et arrivant au proche infrarouge, et qui, résultant les transitions électroniques entre les bandes et les niveaux situés dans le gap par les défauts et les impuretés, nous donne des informations sur la nature électrique des défauts. Mais la technique de microanalyse par les rayons x est modélisé par une règle générale pour l'identification des éléments par la détermination de leur nombre atomique Z en utilisant la loi Moseley ($\nu \propto Z^2$) qui relie la fréquence ν d'une raie caractéristique au nombre atomique Z , par contre l'absence d'une règle générale

d'identification pour la CL et le manque d'une théorie quantitative universelle et applicable sur un large domaine font que les développements de la CL comme outil d'analyse sont limités[3].

Le mode EBIC (Electron Beam Induced Current) dans le MEB a été utilisé pour caractériser les propriétés électroniques des semiconducteurs et obtenir quelques données ou résultats pour décrire les processus de recombinaison des porteurs minoritaires comme la longueur de diffusion, la durée de vie, la vitesse de recombinaison en surface [31,32,33] ou à l'interface dans les semiconducteurs homogènes [34], ainsi pour la fabrication des dispositifs microélectroniques [35].

Dans ces dernières années, il a été remarqué que même le mode CL dans le MEB est capable de fournir des informations quantitatives sur les paramètres des semiconducteurs [36, 37].

Ainsi, en principe, les méthodes par bombardement électronique sont les plus simples et les plus demandés parce que le faisceau d'électron peut être focalisé à des degrés élevés [38], mais Pour un travail CL on doit seulement polir l'échantillon, tandis que EBIC nécessite un contacte Schottky ou une jonction P-N [29].

Enfin on peut résumer les avantages de la CL en trois points :

- a. La dynamique des conditions d'excitation est soit l'énergie d'accélération E_0 soit l'intensité du faisceau électronique I_p (c'est à dire le ombres des électrons Nel).
- b. Une bonne résolution spatiale.
- c. La facilité de préparation des échantillons.

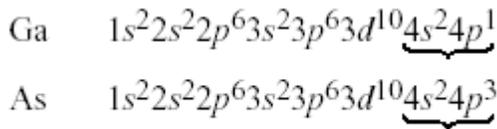
Mais l'exploitation des informations rapportées par la CL nécessite la modélisation de cette dernière (le sujet de notre travail). Il faudrait que cette modélisation soit aussi réaliste que possible pour une meilleure fiabilité des paramètres mesurés (notre but). Ceci prescrit en conséquence une bonne conception des phénomènes physiques mis en jeu au cours de l'étude par cette technique, c'est à dire l'analyse de l'interaction électron-matière.

I.4. MATERIAU D'APPLICATION

I.4.1. Définition

Dans les semi-conducteurs nous sommes principalement intéressés par la bande de valence et la bande de conduction. D'ailleurs, pour la plupart des applications nous sommes intéressés par ce qui se produit près du dessus de la bande de valence et du bas de la bande de conduction. Ces états proviennent des niveaux atomiques de la couche de valence des éléments composant le semi-conducteur [39].

Pour le GaAs on a :



Les niveaux atomiques extérieurs sont de type *s* ou type *p*.

Le *GaAs* est un matériau important pour fabriquer des appareils de l'optoélectronique et beaucoup de ses propriétés optiques sont supérieures à ceux de Si [40]. L'arséniure de gallium (GaAs), qui se présente sous forme de cristaux, a d'excellentes propriétés semi-conductrices. Ce composé est ainsi utilisé dans les redresseurs, les transistors, les photoconducteurs et les diodes à laser.

I.4.2. Structure Cristalline

La majorité des semiconducteurs tels que le *GaAs* et le *CdTe*, ainsi que *InSb* et le *InP*, cristallisent dans la structures zinc blende, aussi appelée sphalérite (figure (1.8)) [41].

La structure cristalline de zinc blende se compose de deux réseaux CFC interpénétrant, l'un déplacé par rapport à l'autre d'une distance le long de la diagonale $(\frac{a}{4} \frac{a}{4} \frac{a}{4})$.

Le réseau de Bravais fondamental est CFC avec une base de deux atomes. Les positions des deux atomes sont (000) et $(\frac{a}{4} \frac{a}{4} \frac{a}{4})$ [39].

Cette structure appartient aux phases tétraédriques, où chaque atome est entouré par quatre équidistants plus proches voisins qui se situent aux sommets d'un tétraèdre.

La liaison entre deux plus proches voisins est formée par deux électrons de spin différent [42].

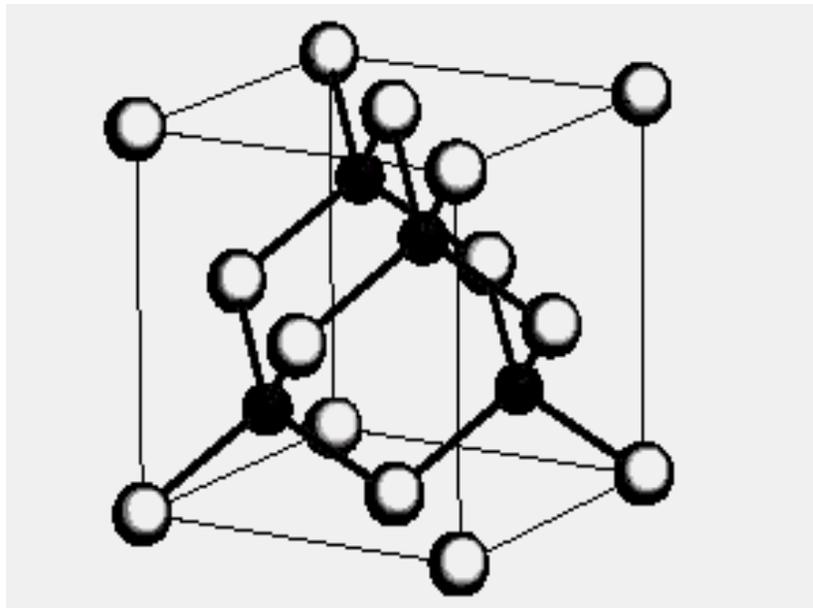
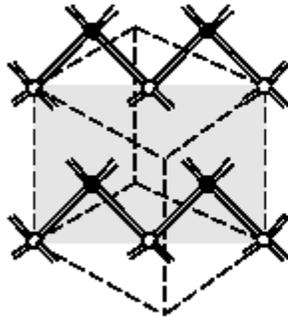


Figure (1.9) : Maille blende de zinc du GaAs de symétrie $m\bar{3}m$ (n° 216). Elle se compose de deux sous réseaux cubiques faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, et occupés l'un par l'anion (As), et l'autre par le cation (Ga) [41].

PLANS IMPORTANT EN STRUCTURES ZINC BLENDE OU DIAMANT

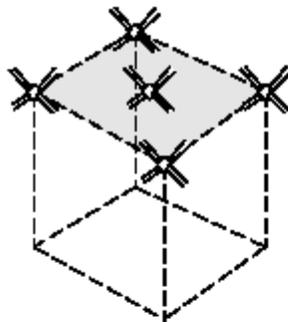


ATOMES SUR LE PLAN (110)

Chaque atome a 4 liens:

- 2 liens dans le plan (110)
- 1 lien relie chaque atome aux plans (110) adjacent

➡ le clivage des plans adjacents exige la rupture d'un lien par atome.

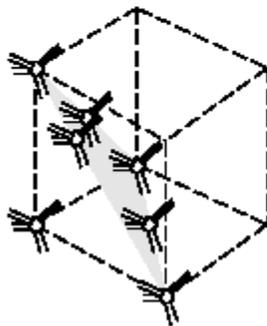


ATOMES SUR LE PLAN(001)

2 liens relie chaque atome aux plans (001) adjacent

les atomes sont de Ga ou de As dans le GaAs .

➡ le clivage des plans adjacents exige la rupture de deux liens par atome.



ATOMES SUR LE PLAN (111)

doit être de Ga ou de As.

1 lien reliant un plan adjacent sur une face.

3 liens reliant un plan adjacent sur l'autre face.

Figure (1.10) : Quelques plans importants avec leurs indices de Miller dans le système cubique. Cette figure montre également combien de liens relient les plans adjacents. Ce nombre détermine comment c'est facile ou difficile de cliver le cristal le long de ces plans par la coupure des liens joignant les plans adjacents [39].

I.4.3. Structure de Bande

Le schéma simplifié de la structure de bande des composés à gap direct et indirect c'est représenté sur la figure (1.10)

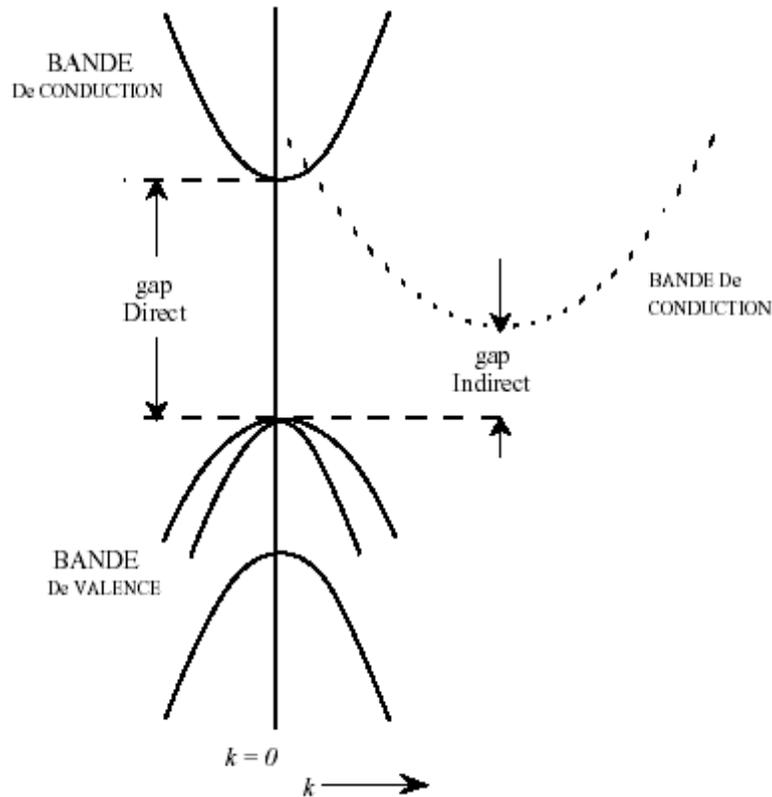


Figure (1.11) : Schéma de la bande de valence, bande de conduction, le gap direct et le gap indirect. La bande de conduction du semiconducteur à gap direct est montrée avec une ligne continue, alors que la bande de conduction du semiconducteur à gap indirect est montrée avec une ligne discontinue [39]

Le gap du GaAs est direct car le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent au même vecteur d'onde, au centre de la zone de Brillouin, figure (1.11). La transition d'énergie minimale entre ces 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.

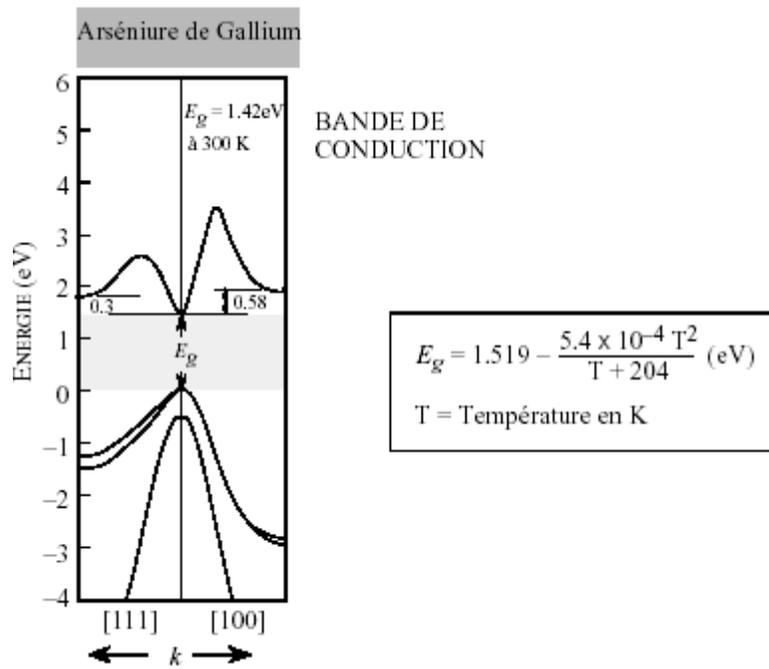


Figure (1.12): Structure de Bande d'énergie du GaAs dans les directions de haute symétrie. Le gap à 0K est 1,51eV et à 300K c'est 1,43eV. Le fond de la bande de conduction est à $k = (0.0.0)$ d'après [39]

1.4.4. Concentration des Porteurs à l'Equilibre Thermique

Le tableau (1.3) illustre les Densités effectives et les concentrations des porteurs intrinsèques pour le Si, Ge et le GaAs [39]. Ainsi que Le tableau (1.4) regroupe quelques propriétés importantes de l'arséniure de gallium (GaAs).

Matériau	Bande de CONDUCTION Densité Effective (N_C)	Bande de VALENCE Densité Effective (N_V)	Concentration des porteurs Intrinsèques ($n_i = p_i$)
Si (300 K)	$2.78 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$9.84 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
Ge (300 K)	$1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$2.33 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
GaAs (300 K)	$4.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$7.72 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.84 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$

Tableau (1.3) : Densités effectives et concentrations des porteurs intrinsèques dans le Si, Ge et le GaAs [39].

Nom	Symboles	Unités	Valeurs
Structure cristalline			Zinc Blend
Paramètre cristallin	a	Å	5.63
Masse molaire	M	g. mole ⁻¹	144.63
Masse volumique	ρ	g.cm ⁻³	5.32
Nombre atomes par unité de volume	N	cm ⁻³	4.4 10 ²²
Hauteur de la Bande Interdite	E _g	eV	1.42
Densité effective d'états dans la BdC	N _c	cm ⁻³	4.45 10 ¹⁷
Densité effective d'états dans la BdV	N _v	cm ⁻³	7.7210 ¹⁸
Mobilité des électrons	μ _n	cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹ .	8.5 10 ³
Mobilité des trous	μ _p	cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹ .	4.0 10 ²
Constante diélectrique relative	ε _r		12.9
Champ de claquage	E _{av}	KV.cm ⁻¹	3 10 ²
Affinité électronique	χ _s	eV	4.07
Coefficient de dilatation thermique	α _l	K ⁻¹	6.86 10 ⁻⁶
Chaleur spécifique	C	J.g ⁻¹ .K ⁻¹ .	0.35
Conductivité thermique	λ	W.cm ⁻¹ .K ⁻¹ .	0.46
Température de fusion	T _f	° C.	1240

Tableau (1.4) : quelques propriétés importantes de l'arséniure de gallium (GaAs)

II.1 INTRODUCTION

Historiquement la physique était la première connue sous le nom de 'la philosophie naturelle' et les recherches ont été effectuées par des méthodes purement théoriques (ou philosophiques). Par la suite la recherche expérimentale est devenue une forme admise de recherche bien qu'elle ait été toujours limitée par la capacité du physicien de préparer un échantillon pour l'étude ou de concevoir des techniques pour sonder les propriétés désirées. [43]

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.

Les méthodes analytiques de résolution directe d'équations, sont restreintes à certaines formes particulières simples. Ces méthodes (analytiques) ne fournissent pas de solutions générales pour des équations transcendantes. Il en est de même pour un nombre d'intégrales et de systèmes d'équations non linéaires dont la résolution analytique est impossible ou trop complexe.

Les méthodes numériques ont donc les caractéristiques suivantes :

- elles peuvent remplacer les méthodes analytiques quand celles-ci font défaut ou qu'elles sont de mise en oeuvre trop complexe ;
- elles conduisent à une approximation de la solution, la précision pouvant généralement s'améliorer au prix d'un effort de calcul plus important ;
- elles sont directement adaptables sur ordinateur, mais elles peuvent parfois échouer.

L'analyse numérique est une science de base dont tout chercheur doit la connaître afin de résoudre les problèmes simples (ou complexes).[44]

Avec les ordinateurs, l'analyse numérique trouve maintenant application dans tous les domaines de l'activité scientifique parmi lesquelles: simulation et commande des processus physiques et sociaux, traitement des signaux, recherche opérationnelle etc, et il est clair que les développements technologiques dans des domaines tels que la

conquête spatiale ou l'énergie atomique auraient été impossibles sans des ordinateurs rapides et les progrès de l'analyse numérique.

Les ordinateurs ont affecté l'analyse numérique dans deux directions importantes en forçant les numériciens à :

- développer des algorithmes plus rapides et plus efficaces.
- chercher à mieux circonscrire les sources d'erreurs.

Des grands mathématiciens tels que El-khawarizmi, Gauss, Newton, Fourier développèrent des algorithmes (que l'on utilise encore de nos jours) adaptés au calcul "manuel".

Depuis 1945 l'apparition et le développement phénoménal des ordinateurs les anciens algorithmes ont été améliorés, de nouveaux furent mis au point. La rapidité des ordinateurs a permis de résoudre des problèmes de plus en plus compliqués, donc de mieux percevoir et maîtriser les processus complexes. Avec l'arrivée des ordinateurs il est devenu possible d'effectuer des simulations à des modèles qui étaient des techniques théoriques 'classiques'. Dans beaucoup de cas les ordinateurs ont, pour la première fois dans l'histoire des physiciens, permis non seulement d'inventer de nouveaux modèles pour différents aspects mais aussi de résoudre également ces modèles. Dans ces dernières années la puissance des ordinateurs a augmenté tout à fait considérablement, avec l'accès aux ordinateurs devenant plus facile et à plus de commun (par exemple, avec les ordinateurs portables et les postes de travail), et des méthodes de simulation sur ordinateur également ont été solidement raffinées. En conséquence les simulations sur ordinateur sont devenues une autre manière de faire la recherche en physique. Elles fournissent une autre perspective; dans certains cas les simulations fournissent une base théorique pour comprendre des résultats expérimentaux, et dans d'autres exemples les simulations fournissent les données 'expérimentales' auxquelles la théorie peut être comparée. Il y a de nombreuses situations dans lesquelles la comparaison analytique directe entre la théorie et l'expérience est peu concluante.

Puisque les traitements analytiques exigent également des approximations mathématiques dont l'exactitude est difficile à évaluer ou commandé, on ne sait pas si

des anomalies entre la théorie et l'expérience devaient être attribuées aux imperfections du modèle [43].

La simulation est une expérimentation sur un modèle qui est lui-même une représentation abstraite, algébrique ou analytique, d'un phénomène physique.

Les méthodes de simulation permettent l'étude des systèmes complexes et leurs comportements et elles permettent aussi de confronter les résultats de l'expérience réelle avec l'expérience théorique.

Comme toute résolution théorique, les méthodes de simulation en physique font largement usage des techniques mathématiques et Algorithmiques.

Dans le but de répondre aux exigences des sciences physiques, plusieurs méthodes (ou variantes de méthodes) ont été développées, et elles se sont subdivisées en deux catégories selon leur nature :

- méthodes déterministes.
- et méthodes stochastiques.

Les méthodes déterministes, utilisent la dynamique intrinsèque du système pour le faire propager dans le temps.

Les méthodes stochastiques, par contre, sont basées sur les concepts développés dans la théorie des probabilités.

Dans les deux types de méthodes ci-dessus (déterministe et stochastique), l'approche physique a contribué à classer les techniques en deux classes :

- Classiques
- Quantiques

Les méthodes classiques font systématiquement usage de la mécanique Newtonienne, alors que les méthodes quantiques font appel à une description et une résolution purement quantique du système étudié.[45]

II.2 RESOLUTION D'UN PROBLEME SCIENTIFIQUE ET ROLE DE L'ORDINATEUR

II.2.1 Traitement d'un problème à l'aide de l'ordinateur

Pour tous les problèmes, même les plus triviaux, on doit faire une grande quantité de travail d'analyse avant de s'intéresser à l'ordinateur, car celui-ci n'est qu'une machine qui ne sait qu'exécuter des opérations logiques et arithmétiques élémentaires. On peut séparer la résolution d'un problème en plusieurs étapes nettement distinctes.

1- Identification des lois fondamentales de la physique, de la chimie, des sciences de l'ingénieur, de l'organisateur etc. impliquées dans la définition du problème.

2- Modélisation. Celle-ci peut consister en synthèse des lois identifiées pour décrire le problème par un ensemble d'équations mathématiques ou en l'utilisation d'observations expérimentales mathématisées.

3- Méthode numérique. La plupart des problèmes scientifiques sont exprimés en termes qu'un ordinateur ne peut accepter directement : intégrales, équations différentielles partielles, opérateurs mathématiques etc... Il faut donc trouver une méthode traduisant ces fonctions continues en fonctions arithmétiques : Méthodes aux différences finies, séries infinies, fractions continues, processus itératif, etc et un algorithme de résolution du problème arithmétique.

4- Organigramme. On fait apparaître sur un schéma synoptique l'enchaînement des différentes phases de travail arithmétique à effectuer, correspondant à la méthode choisie.

5- Programmation. C'est la traduction de l'organigramme en une suite d'instructions détaillées dans un langage acceptable par l'ordinateur (généralement évolué).

6- Mise au point du programme. C'est l'étape d'édition [correction syntaxique et d'essai erreur (correction logique permettant de détecter les erreurs de codage (programmation) ou de logique (organigramme))].

7- Exécution et interprétation des résultats. Lorsque le programme est correct, on le fait exécuter avec les données de notre problème puis on pose les questions suivantes :

- le résultat fourni par l'ordinateur contient-il des erreurs significatives ? (Si oui, reprendre la méthode numérique).
- le modèle mathématique est-il une représentation adéquate du processus réel? (Si non, reprendre la modélisation) [46].

II.2.2. Notions sur le modèle

Un système physique, chimique, biologique, économique... peut se concevoir comme étant une relation entre des causes (ou variables d'entrée) et des conséquences (ou variables de sortie).

Physiquement, étudier un système, c'est généralement cherché à prévoir son comportement, c'est à dire quel sera l'état ou l'évolution des grandeurs de sortie en réponse à une valeur ou une variation des grandeurs d'entrée.

Pour ce faire, il est intéressant de synthétiser un modèle dont le comportement soit analogue à celui du système étudié, c'est à dire reproduisant les mêmes relations entre ses grandeurs d'entrée et ses grandeurs de sortie ; le modèle simule le comportement du système.

On utilise couramment trois types de modèles

a. Modèle mathématique :

Le système est représenté par un ensemble de relations mathématiques

b. Modèle dit "analogique" :

Le système est représenté par l'assemblage d'éléments physiques (par exemple, un circuit électrique : composé d'amplificateurs opérationnels, résistances, condensateurs..) Les grandeurs physiques (les tensions par exemple) représentant les variables du système.

c. Modèle numérique :

Le système est représenté par un ensemble de relations entre des grandeurs arithmétiques représentant les variables du système.

L'intérêt primordial d'un modèle est double, d'une part il peut représenter de façon très concise des relations de cause à effet parfois complexes, d'autre part il permet

d'expérimenter le "comportement " du système sans perturber le système réel et parfois même avant qu'il n'existe.

Avec les progrès connus dans l'industrie des ordinateurs (capacités et vitesse de processeur), la simulation MC est devenue une méthode importante pour l'étude des effets typiques dans les composants semiconducteurs.

L'étude du GaAs par la CL nécessite une bonne simulation MC, en particulier, la perte d'énergie à l'intérieur du semiconducteur.

II.3. SIMULATION MONTE CARLO (MC)

Un nombre très grand de problèmes différents entrent dans cette catégorie. L'amélioration de l'exactitude des résultats de Monte Carlo (MC) est non seulement possible en principe mais possible également dans la pratique!

II.3.1. Définition

Dans le sens le plus large, la simulation de MC signifie n'importe quelle simulation (ce n'est pas nécessairement une simulation sur ordinateur) qui utilise des nombres aléatoires dans l'algorithme de simulation[47].

Les méthodes de MC, bien qu'utilisées depuis fort longtemps, ont pris une importance croissante depuis leur mise en œuvre par Von Neumann, Ulam et Metropolis à la fin de la seconde guerre mondiale dans le but d'étudier les processus de diffusion (la simulation des réactions nucléaires). Ces méthodes se prêtent bien à la modélisation d'un tel processus dans la mesure où elle possède un caractère purement stochastique.

L'idée d'employer l'aspect aléatoire pour obtenir une réponse à un problème scientifique est réellement beaucoup plus ancienne que des ordinateurs.

Ces méthodes donnent un cadre de résolution numérique très général, sans contraintes théoriques et un cadre pour évaluer l'incertitude liée aux résultats. C'est pourquoi elles sont appliquées à une grande variété de problèmes.

Les deux principaux types de problèmes efficacement traités par la méthode de MC sont les calculs d'intégrales multiples, et les problèmes de diffusion et collision: Ceci est rendu possible par la propriété essentielle de pouvoir simuler des distributions de grandeurs aléatoires.

II.3.2. Terminologie

Le terme "MC" est réellement extrêmement large, et il y a beaucoup de chevauchement..

Le terme "Monte Carlo" vient en effet des casinos célèbres à Monte Carlo. Quand l'étude des méthodes de MC est devenue très sérieuse dans les années 40 et les années 50, quelqu'un a pensé à la similarité d'employer des nombres aléatoires à l'aspect aléatoire dans les jeux au casino, et appelée la méthode par la suite.[48]

Un autre terme étroitement lié est la simulation stochastique, qui signifie la même chose que simulations MC. Quoique stochastique semble être une limite plus descriptive, depuis les chances des échecs sont beaucoup plus petits, la raison pour laquelle MC est répandue plus largement.

Pour donner un exemple concret, les simulations de la dynamique moléculaire (DM) (en revient sur cette méthode dans un proche paragraphe) qui décrivent le mouvement atomistique, soit en principe complètement déterministe en nature. Mais dans la pratique, on emploie souvent des nombres aléatoires dans (MD) aussi bien. Les vitesses initiales d'atome sont habituellement indiquées aléatoirement, ainsi ceci apporte un caractère à MC.[48]

II.4. GENERATEURS DE NOMBRES ALEATOIRES

II.4.1. L'art de Génération des Nombres Aléatoire

N'importe qui considère des méthodes arithmétiques de produire les chiffres aléatoires est, naturellement, dans un état ratant [46]. John von Neumann (1951)

L'élément clef de n'importe quelles méthodes MC est la bonne source de l'état relevant des lois du hasard, c'est à dire toute simulation MC fait intervenir, par définition, des nombres au hasard [49].

La domestication du hasard commence peut-être avec l'expérience de « l'aiguille de Buffon » menée au XVIIIe siècle par le célèbre naturaliste et philosophe G.L. Buffon.

L'expérience consiste à laisser tomber au hasard une aiguille de longueur L sur une grille plane composée d'un faisceau de lignes parallèles séparées par une distance D supérieure à L . Une telle grille est assimilable à un planché. Sachant que la probabilité que l'aiguille tombe à cheval sur une ligne est $P = 2L / \pi D$, il en conçut un processus pour approcher π . Dans cette expérience, au fur et à mesure des lancers de l'aiguille, l'estimation de la probabilité s'améliore et par voie de conséquence celle de π aussi. Aujourd'hui, une telle expérience serait réalisée de façon entièrement numérique sur ordinateur. Le lancer de l'aiguille serait remplacé par la simulation de nombres aléatoires donnant la position de l'aiguille sur la grille.[50]

la simulation d'aiguille de Buffon

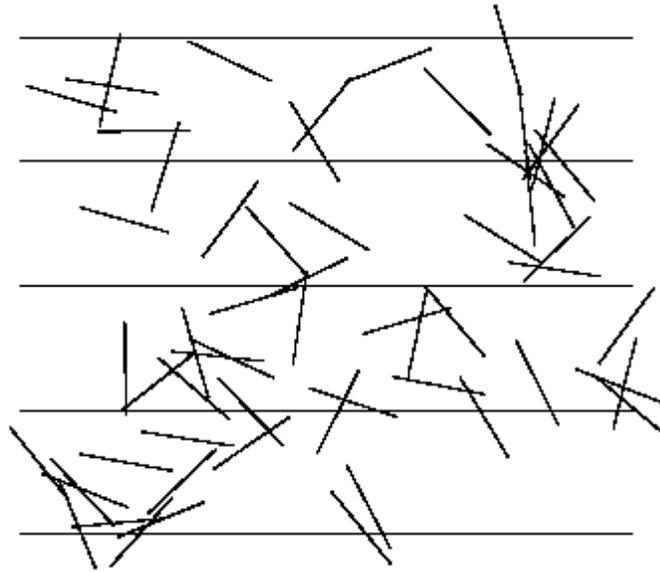


Figure2.1:simulation sur ordinateur du problème d'aiguille de Buffon [46]

Les questions pratiques que l'on se pose sont donc :

1. Comment générer une suite des nombres qui sont la réalisation d'une suite de variables aléatoires réelles indépendantes et de même loi (donnée) et, de manière plus fondamentale,
2. Si une telle suite des nombres nous est fournie, comment décider si elle est en effet une réalisation fidèle de la loi donnée ?

Les réponses à ces deux questions semblent évidentes : pour simuler une loi il suffit de trouver un phénomène physique bien modélisé par un processus de cette loi et identifier les valeurs successives de la grandeur physique avec la suite des nombres aléatoires cherchée. En ce qui concerne la vérification qu'une suite fournie soit la réalisation de la loi, il faudrait montrer que les fonctions de répartitions empiriques coïncident avec les fonctions de répartitions théoriques.

La génération des nombres aléatoires sur un ordinateur est notoirement un problème de difficulté. Un générateur idéal de nombre aléatoire fournirait les nombres qui sont uniformément distribués, non-corrélatifs, satisfait à n'importe quel essai

statistique d'aspect aléatoire, a une grande période de répétition, peut être changé en ajustant une première valeur le "graine" ou le germe, est qu'on peut répéter, portatif, et peut être produit rapidement en utilisant la mémoire d'ordinateur minimale.[51,52,53]

Un tel algorithme est réellement déterministe, les suites de nombres aléatoires qui sont ainsi produits sont seulement 'pseudo-aléatoires' et ont en effet des limitations qui doivent être comprises. Ainsi, quand nous nous référons des nombres aléatoires il doit être compris que nous parlerons réellement des nombres 'pseudo-aléatoires'.[43]

L'essor des ordinateurs digitaux a imposé des algorithmes simples et rapides pour la génération des nombres pseudo-aléatoires. Dans ce qui suit nous discuterons quelques méthodes de génération des nombres pseudo-aléatoires.

La raison de ceci est qu'il est maintenant clair que pour l'exécution et l'exactitude d'optimiser, le générateur de nombre aléatoire doit être assorti à l'algorithme et à l'ordinateur. En effet, la résolution des études de Monte Carlo a maintenant avancé au point où le générateur n_0 peut être considéré complètement 'certain' pour l'usage avec un nouvel algorithme de simulation sur un nouveau problème. Le praticien est maintenant confronté à nouveau au défi d'examiner le générateur de nombre aléatoire pour chaque application de haute résolution.

II.4.2. La Méthode Congruentiel

Une méthode simple et très populaire pour produire des suites de nombres aléatoires est la méthode multiplicative ou congruentiel. Ici, un multiplicateur fixe C est choisi avec un germe donné X_0 et des nombres suivants sont produits par multiplication simple [43,54]:

$$X_n = (C \cdot X_{n-1} + a_0) \text{ MOD } N_{\max} \quad (2.1)$$

Où X_n est un nombre entier entre 0 et $(N_{\max}-1)$. Il est important que la valeur du multiplicateur soit choisie pour avoir 'de bonnes' propriétés, de divers choix ont été employés dans le passé. En outre, la meilleure exécution obtenue quand le nombre aléatoire initial X_0 est impair. L'expérience a prouvé que le générateur congruentiel d'un 'bon' algorithme congruentiel linéaire est de 32 bits (le GONG)[43,55,56]

$$X_n = (16807 \cdot X_{n-1}) \text{MOD}(2^{31}-1) \quad (2.2)$$

Un générateur congruentiel au quel était tout à fait populaire plutôt avéré ont la corrélation tout à fait apparente entre les triplets consécutifs des nombres aléatoires. Néanmoins pour beaucoup d'usages les générateurs congruentiel sont acceptables et sont certainement faciles à mettre en application.

II.4.3. Méthodes Congruentiel Mélangées

Des générateurs congruentiel peuvent être mélangés de plusieurs manières d'essayer d'améliorer la qualité des nombres aléatoires qui sont produits. Une méthode simple et relativement efficace doit utiliser deux générateurs distincts simultanément: le premier générateur est une table des nombres aléatoires et le deuxième générateur tire aléatoirement de cette table. Pour les meilleurs résultats les deux générateurs devraient avoir différents germes et différents multiplicateurs. Une variation de cette approche pour les algorithmes qui ont besoin des nombres aléatoires multiples pour différentes parties des calculs, et doit utiliser les générateurs indépendants pour différentes parties du problème.

II.4.4. Algorithmes de Décalage de Registre

Une méthode rapide qui a été présentée pour éliminer certains problèmes avec les corrélations qui avaient été découvertes avec une méthode congruentiel est le décalage de registre ou l'algorithme de Tausworthe (Kirkpatrick et Stoll, 1981)[43]. Une table des nombres aléatoires est d'abord produite et un nouveau nombre aléatoire est produit en combinant deux nombres existants différents à partir de la table:

$$X_n = X_{n-p} \text{-XOR-} X_{n-q} \quad (2.3)$$

Là où p et q doivent être correctement choisis si la séquence doit avoir de bonnes propriétés. Le XOR est l'opérateur au niveau du bit exclusif - OR.

Les meilleurs choix des paires (p, q) sont déterminés par les trinômes primitifs donnés par :

$$X^p + X^q + 1 = \text{primitif} \quad (2.4)$$

Les exemples des paires qui satisfont cette condition sont:

P=98	q=27
P=250	q=103
P=1279	q=216, 418
P=9689	q=84, 471, 1836, 2444, 4187

R250 pour lequel $p = 250$, $q = 103$ a été le générateur le plus généralement utilisé dans cette classe. Dans la littérature on trouvera des cas où X_{n-q} est employé et d'autres où X_{n-p-q} sont employés à la place. En fait, ces deux choix donneront le même jet des nombres mais dans un ordre à l'envers; la qualité de chaque ordre est ainsi identique. En général, une plus haute qualité des suites de nombres aléatoires résulte quand de grandes valeurs de p et de q sont employées bien que pour beaucoup de buts R250 fonctionne tout à fait bien. Afin que la qualité de la suite des nombres aléatoires soit la plus élevée possible, il soit important pour la 'table' pour être correctement initialisée. Une méthode simple est d'utiliser un bon générateur congruentiel pour produire des valeurs initiales; le meilleur procédé doit employer un nombre aléatoire différent pour déterminer chaque bit en succession pour chaque entrée dans la table initiale.

II.4.5. Générateurs Traînés de Fibonacci

L'algorithme de décalage de registre est un cas spécial d'une classe plus générale des générateurs connus sous le nom de générateurs traînés de Fibonacci. Des générateurs additionnels peuvent être produits par le remplacement exclusif-OR (- XOR -) dans l'équation (2.3) par un autre opérateur. Un générateur qui s'est avéré pour avoir de bonnes propriétés emploie l'opérateur de multiplication:

$$X_n = X_{n-p} * X_{n-q} \tag{2.5}$$

Avec des valeurs plutôt petites de 'compensation', par exemple $p = 17$, $q = 5$. Des générateurs plus complexes ont été également utilisés, par exemple une soustraction avec porte génératrice composée de 32 bits ' (Marsaglia et autres, 1990)[43], qui pour l'arithmétique est :

$$X_n = X_{n-22} - X_{n-43} - c \tag{2.6}$$

$$\text{Si } X_n \geq 0, \quad c = 0$$

$$\text{Si } X_n < 0, \quad X_n = X_n + (2^{32} - 5), \quad c = 1$$

et le générateur, combiné soustrait avec le générateur de carry-Weyl (Marsaglia et autres, 1990) [43]

$$Z_n = Z_{n-22} - Z_{n-43} - c \quad (2.7)$$

$$\text{Si } Z_n \geq 0, \quad c = 0$$

$$\text{Si } Z_n < 0, \quad Z_n = Z_n + (2^{32} - 5), \quad c = 1$$

$$Y_n = (Y_{n-1} - 362436069) \text{ MOD } 2^{32}$$

$$X_n = (Z_n - Y_n) \text{ MOD } 2^{32} .$$

Comme cité précédemment, on le sait que l'exécution d'un générateur de nombre aléatoire peut être compromise par initialisation inexacte de sa table de consultation (Kirkpatrick et Stoll; 1981) et nous recommandions le même procédé d'initialisation pour tous les générateurs que cela décrit pour R250. Ce qui précède sont seulement des exemples de quelques différents générateurs de nombre aléatoire.

II.5. APPLICATIONS DE MONTE CARLO

De très nombreux secteurs scientifiques et technologiques ont désormais adopté ce type d'approche connue sous le nom « méthode de 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, tel que la biologie moléculaire et génétique, les télécommunications, les réseaux, la recherche opérationnelle, la finance, et bien d'autres encore[50]. En voici quelques exemples.

II.5.1. Intégration Monte Carlo

On considère un cercle inscrit dans un carré affiché dans un panneau relativement grand. Il est relativement simple de trouver l'aire du carré, mais c'est difficile de trouver l'aire du cercle, sans utiliser la géométrie, π et les formules difficiles que nous avons vu la dernière fois à l'école primaire.

Supposons que nous lançons un grand nombre de fléchettes sur le panneau et compter le nombre de fléchettes à l'intérieur du carré (n) rapporté au nombre de fléchettes à l'intérieur du cercle (n^*). Si l'aire du carré est donné par V , alors la surface du cercle (I) peut être approximé par :

$$I \approx \frac{n^*}{n} V \quad (2.8)$$

C'est à dire, l'aire du cercle est approximativement égale à l'aire du carré multiplié par une fraction des fléchettes qui débarquent à l'intérieur de ce cercle.

Ceci est illustré sur la figure (2.2).

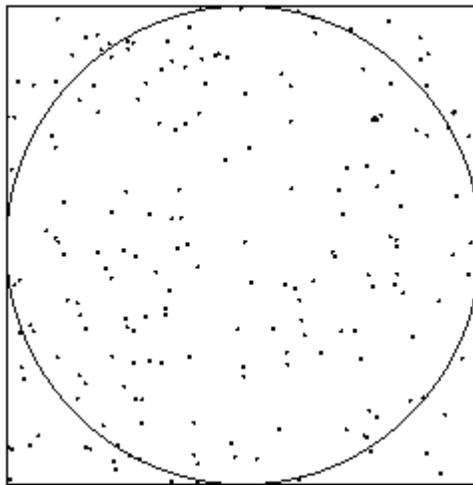


Figure2.2: Illustration de la " méthode de fléchettes " pour trouver l'aire d'un cercle.

L'équation (2.8), est appliquée de plus à des fonctions compliquées et leurs simples résolutions, constitue l'hypothèse sur laquelle repose l'intégration MC. Les problèmes d'intégration concernant les fonctions compliquées sont réduits à l'intégration des formes simples et prennent un nombre suffisant d'échantillons. Comme les autres mesures statistiques l'intégrale MC défini est seulement une approximation d'aire.

Plus généralement l'intégration MC est seulement pratique si la fonction en question est continue et s'il est possible de trouver une bonne forme simple. on va essayer de reformuler un intégrale défini arbitrairement dans une forme qui peut être facilement résolue en utilisant MC.

Appliquons la méthode de MC au calcul de l'intégral I d'une fonction f sur $[a; b]$:

$$I = \int_a^b f(x) dx \tag{2.9}$$

Ou $f(x)$ prend des valeurs continues et réelles dans $[a,b]$, nous pouvons trouver l'aire V de l'encadrement limité tel que I est entièrement située à l'intérieur de V . Il y a, cependant, une méthode plus simple si nous pouvons prendre l'avantage de certaines propriétés de l'intégral.[57]

Nous pouvons définir une seconde fonction $g(x)$ telle que :

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \tag{2.10}$$

De cette dernière on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = 1 \tag{2.11}$$

Comme ça nous pouvant considérer $g(x)$ à être la fonction de la densité de probabilité (PDF).

Si on insère cette dernière dans l'équation (2.9) on obtiendra :

$$I = (b-a) \int_a^b f(x) g(x) dx \tag{2.12}$$

Notons que $g(x)$ est une PDF, on peut voir que l'intégral de l'équation (2.12) est l'intégral défini de variable stochastique multipliée par son PDF, d'où nous avons :

$$I = (b-a) \int_a^b f(x)g(x)dx = (b-a)E(f(x)) \quad (2.13)$$

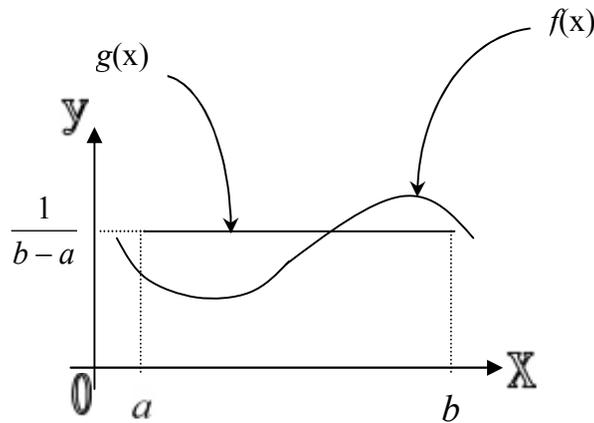


Figure (2.3) : La ligne droite est $g(x)$ et l'intégrale fini de a à b est $(b-a)E(f(x))$.

Comme ça l'intégral est simplement la largeur de l'intervalle multipliée par la valeur moyenne de la fonction $f(x)$.

Dans l'équation (2.13), le problème n'est pas dans la forme qui peut être résolu efficacement en utilisant la méthode MC. L'autre avantage de cette interprétation statistique est que nous avons maintenant une série d'outils algébriques pour déterminer la précision de l'intégration, parce que nous pouvons calculer la variance de l'approximation MC.

C'est difficile de croire qu'il y a beaucoup de valeur en utilisant la technique MC pour évaluer un intégrale à une dimension, mais pour des intégrales multidimensionnelles (dimensions plus grand, plus de quatre (4)), alors la technique MC est préférée.

Quelque problème demande une exécution parallèle et simultanée sur plusieurs ordinateurs. L'intégration MC est parfaite pour ces exemples. Chaque ordinateur peut simplement proposer son propre estimation de $E(f)$ et les résultats individuels peuvent

être faits pour monter à une réponse finale. Ça doit céder le même résultat comme si le problème était résolu par un seul ordinateur.

II.5.2. La Marche Aléatoire

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

Dans ce model, 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 marches de longueur (non coordonnées) dans les directions x et y comme suit :

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

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

$$\begin{aligned} R^2 &\approx \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta x_N^2 + \Delta y_1^2 + \Delta y_2^2 + \dots + \Delta y_N^2 \\ R^2 &\approx N \langle v^2 \rangle \\ R &\approx \sqrt{N} r_{mc} \end{aligned}$$

Où r_{mc} est la racine carrée de la moyenne carrée de la grandeur de marche ou, la racine moyenne carrée de la grandeur de marche.

Noté, qu'on obtient les mêmes résultats pour des marches à trois dimensions.

D'après la relation bien que la distance totale marchée soit N_{rnc} dans la moyenne, la distance de départ est seulement $\sqrt{N} r_{\text{rnc}}$.

Exemple : simulation de la marche aléatoire

Le tracé montre clairement que la méthode de choix des nombres aléatoires dans la direction de la marche aléatoire ne donne pas un grand nombre de marche. Si de l'autre coté on fait le choix aléatoire pour x et y dans l'intervalle $[-\sqrt{2}, \sqrt{2}]$, alors on obtient un résultat qui est très proche du résultat théorique.

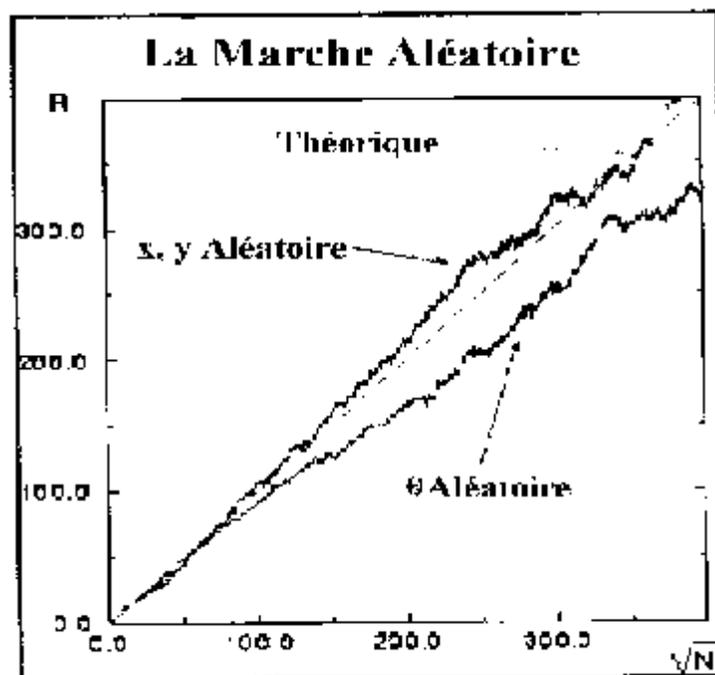


Figure (2.4) : simulation de la marche aléatoire utilisant deux différentes méthodes pour générer une unité de marche.

II.5.3. Interaction Electrons-Matière

Le procédé de simulation MC est développé pour l'interaction du faisceau d'électrons d'énergie d'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 à l'analyse chimique quantitative non destructive des films ultra-minces dans la microsonde d'électrons [58]. L'angle de diffusion élastique est calculé dans la simulation de la trajectoire des électrons 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 [58]. Cette application est tout notre intérêt dans cette thèse et elle sera plus détaillée dans le chapitre suivant.

Le rôle important que les méthodes de Monte Carlo doivent jouer dans cette sorte d'étude est illustré sur la figure (2.4). La science de base essaye de comprendre les mécanismes fonctionnant de base d'un phénomène. La " théorie " est un ensemble de prétentions (avec peut-être une formulation mathématique de ces prétentions) que pouvez par mesuré dans "expérience". Dans le meilleur des cas, le raccordement entre la théorie et l'expérience est direct de sorte que l'interprétation de l'expérience est non complexe.

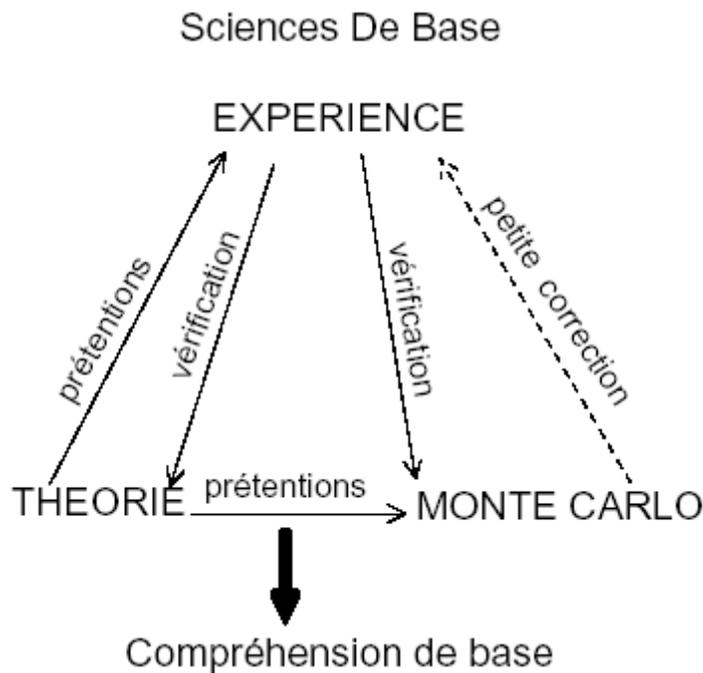


Figure (2.5): Le rôle des méthodes de Monte Carlo dans les sciences de base [46].

Cependant, le résultat calculé dépend de manière compliquée et couplée sur toute la physique de transport d'électron et de photon. Cette utilisation de la méthode de Monte Carlo est décrite sur la figure (2.5). Dans ce cas là, la théorie ne peut pas fournir

une description mathématique précise et entière de la physique microscopique et macroscopique. La théorie peut, cependant, fournir l'intuition pour la conception des mesures. Les méthodes de Monte Carlo sont une adjonction à ce processus aussi bien, servant dans l'analyse de l'expérience et de vérification ou d'infirmation de la conception.

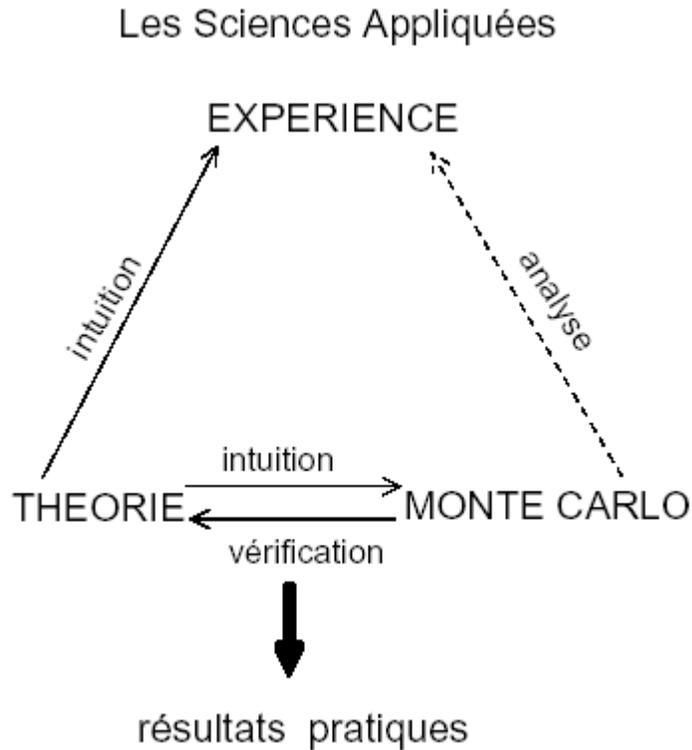


Figure (2.6): le rôle des méthodes de Monte Carlo dans les sciences appliquées [46]

Ainsi nous pouvons citer d'autres applications en bref :

-MC Metropolis

Un algorithme de simulation, centré pour donner la formule qui détermine si un processus devra être produit ou pas ? À l'origine, utilisée pour simuler des systèmes d'atome dans un ensemble thermodynamique de NVT, mais de nos jours, généralisée à beaucoup d'autres problèmes.

-Recuit Simulé

L'idée de MC Metropolis est généralisée à l'optimisation, c.-à-d. trouvant des minimums ou des maximums dans un système. Ceci peut être employé dans un très large éventail de problèmes.

-MC Thermodynamique

MC est utilisée pour déterminer les propriétés thermodynamiques, habituellement des systèmes atomiques.

-Réseau MC, LMC

MC utilisé sur un réseau. Dans la physique de la matière condensée ceci est employé pour distinguer MC, faite sur le réseau cristallin, de celle faite dans un milieu aléatoire amorphe.

-Cinétique MC, KMC

MC simule des processus activés, c.-à-d. les processus qui se produisent avec une probabilité exponentielle tel que :

$$P = e^{-E_a / k_B T}$$

L'exemple typique est la migration des défauts dans un solide. Ceci peut être fait par l'un ou l'autre, dans un système non directionnel, ou sur un réseau. Dans le dernier cas on a pu également parler du réseau MC cinétique [48].

-Variation MC, VMC et Diffusion MC, DMC

Ces termes, bien que très au loin en principe, soient de nos jours employés souvent pour signifier une variété de calculs électroniques de structure où des techniques de MC sont employées pour obtenir la configuration de l'état fondamental de l'électron. Parfois les termes sont employés sans indiquer qu'on traite la structure électronique, qui peut mener à la confusion en tant que " diffusion MC " évidemment pourrait aussi bien signifier beaucoup d'autres choses [48].

-Quantum Monte Carlo, QMC

Un autre terme qui est employé dans beaucoup de contextes différents. On sait que la structure électronique des méthodes de calcul VMC et DMC s'appelle souvent QMC. Un autre est ce quantum mécanique simulations des systèmes de rotation (qui ne se relie pas nécessairement, déterminant des calculs à structure électronique de manière directe) s'appelle également QMC...[48]

II.6. AUTRES METHODES DE SIMULATIONS SUR ORDINATEUR

En sait qu'il y a une grande variété de méthodes de Monte Carlo. Bien que ce soient excessivement utiles pour beaucoup de différents problèmes dans la physique statistique il y a quelques circonstances dans lesquelles les systèmes d'intérêt ne sont pas bons convenus à l'étude de Monte Carlo. En effet il y a quelques problèmes qui ne peuvent pas être traitables par des méthodes stochastiques du tout, puisque les propriétés dépendant du temps comme contraintes par des équations déterministes de mouvement sont le sujet de l'étude, le but est ainsi de fournir une vue d'ensemble très brève de certaines autres techniques importantes de simulation dans la physique statistique. Notre but n'est pas de présenter une liste complète des méthodes mais d'offrir plutôt le strict minimum pour permettre au lecteur de comparer certaines des différentes approches et de comprendre mieux les forces et les limitations de simulation Monte Carlo.

II.6.1. Dynamique Moléculaire***II.6.1.1. Les méthodes d'intégration***

La dynamique moléculaire est une description microscopique fine d'un système physique où les degrés de libertés sont pris en compte explicitement. La description peut être Hamiltonienne, Lagrangienne ou Newtonienne dans le cadre de la mécanique classique. L'objectif principal de la simulation DM consiste à calculer les propriétés statiques ou dynamiques d'un système en utilisant les équations de mouvement et leurs solutions obtenues par des méthodes numériques.

Etant donné le mouvement des particules, les forces agissant sur elles changent et ont besoin d'être recalculées continûment. Une manière d'accélérer avec le calcul

seulement d'une réduction modeste d'exactitude et découper l'interaction à une certaine gamme appropriée et puis de faire une liste de tous les voisins qui sont dans un certain rayon légèrement plus grand. Avec l'arrivée des ordinateurs parallèles, les algorithmes de la dynamique moléculaire ont été divisés pour qu'ils distribuent le système au-dessus des processeurs multiples et permettront le traitement d'un grand nombre de particules. Une contrainte principale qui demeure, est la limitation dans le temps maximum d'intégration, et l'amélioration algorithmique de ce secteur est un défi important à l'avenir.

II.6.1.2. D'autres ensembles (la température constante, pression constante)

L'approche la plus brute est simplement le réscale périodique de toutes les vitesses de sorte que toute l'énergie cinétique des systèmes demeure constante. Cette approche de base peut également être mise en application d'une façon stochastique de laquelle la vitesse d'une particule aléatoirement choisie est remise à zéro en utilisant une distribution de Maxwell-Boltzmann. Une méthode très populaire, est celle des 'états thermiques' en lesquels un degré de liberté additionnel est ajouté, et joue le rôle d'une boîte. L'intégration de temps est alors effectuée pour ce système prolongé et l'énergie est extraite à partir de la boîte ou entrée du système afin de maintenir une température du système constante.

Les simulations de la dynamique moléculaire peuvent également être portées à la pression constante en utilisant plusieurs techniques différentes comprenant les méthodes 'd'états de pression' qui sont l'équivalent des états thermiques. De la pression constante peut également être maintenue en changeant la taille de boîte, et plus sophistiqué les algorithmes tiennent compte même d'un changement de la forme de la boîte de simulation. Ces dernières possibilités peuvent être importantes pour l'étude des solides qui montrent les changements structuraux de phase qui peuvent être masqués ou empêchés par une forme fixe pour la boîte de simulation. Evidemment il est possible d'inclure des états thermiques et des états de pression pour travailler dans l'ensemble de NPT (Nombre de molécules, Pression et Température).

Les deux méthodes MC et DM sont fondées sur des principes différents: la DM est une méthode déterministe, elle décrit la trajectoire réelle des particules en intégrant les équations du mouvement, alors que la MC est une méthode stochastique qui décrit l'évolution du système de manière aléatoire.

En terme d'efficacité de calcul, les calculs effectués par MC sont considérablement plus simples par ce que seul l'énergie de configuration, doit être évalué. En DM, les forces exercées sur chaque particule doivent être calculées, ce qui prend beaucoup de temps de calcul. Pour la même raison, un code MC est plus simple à développer qu'un code DM.

En fait, la dynamique moléculaire souvent est employée pour adresser les propriétés statiques d'équilibre seulement, ignorant le bonus additionnel que les propriétés dynamiques pourraient être aussi bien obtenues. Cette approche semble raisonnable dans les cas où la dynamique moléculaire actuelle produit statistiquement des configurations indépendantes d'équilibre plus rapidement que des simulations correspondantes de Monte Carlo. La décision si Monte Carlo ou l'algorithme de la dynamique moléculaire devait être employée est insignifiante, parce que le jugement de l'efficacité est subtil.

II.6.2. Méthodes Hybrides (MD + MC)

Pour quelques systèmes complexes les simulations de Monte Carlo ont des taux très bas d'acceptation exceptée des mouvements d'essai très petits et par conséquent devenus tout à fait inefficaces. Les simulations de la dynamique moléculaire ne permettent pas au système de se développer suffisamment à temps pour être utiles, cependant, les méthodes de la dynamique moléculaire peuvent réellement améliorer une recherche de Monte Carlo sur le système. Un mouvement d'essai est produit en permettant aux équations du mouvement de la dynamique moléculaire de progresser le système par une étape de temps plutôt grande.

Bien qu'un tel développement puisse plus être précis pendant qu'une dynamique moléculaire fait un pas, elle produira un mouvement d'essai de Monte Carlo qui aura une chance de succès beaucoup plus élevée qu'un mouvement d'essai aléatoirement

choisi. Dans l'exécution réelle de cette méthode, une partie qui examine est généralement recommandée pour déterminer une valeur efficace de l'étape de temps (Duane et autres, 1987) [43].

II.6.3. Dynamique Moléculaire Ab Initio

Aucune discussion de la dynamique moléculaire ne serait complète sans au moins une brève mention de l'approche frayée par Car et Parrinello (1985) [43] qui combinent des méthodes de structures électroniques avec la dynamique moléculaire classique. Dans cet arrangement hybride, on simule un système dynamique non réel dans lequel l'énergie potentielle est une fonction des degrés de liberté électroniques et ioniques. Cette fonction d'énergie est réduite au minimum en ce qui concerne les degrés de liberté électroniques pour obtenir la surface potentielle d'énergie de Born-Oppenheimer à employer dans la solution pour la trajectoire des noyaux. Cette approche s'est avérée tout à fait fructueuse avec la théorie de la fonction de densité d'utilisation pour la solution de la pièce électronique de structure du problème et des pseudo potentiels convenablement choisis.

II.6.4. Dynamique de Rotation Quasi-Classique

Bien que les propriétés statiques d'un grand nombre de systèmes magnétiques aient été bien étudiées expérimentalement, théoriquement et par l'intermédiaire de la simulation, l'étude des propriétés dynamiques des systèmes magnétiques étant lointaine, mûrissent moins. La méthode de Monte Carlo est fondamentalement stochastique en nature et en général il n'y a aucune corrélation entre le développement d'un système dans le temps de Monte Carlo et en temps réel, bien que les moyennes statiques soient identiques (par la construction). Une approche à la recherche sur de véritables propriétés dépendant du temps est de produire des états initiaux, tirés d'un ensemble canonique en utilisant les méthodes Monte Carlo, et pour employer ces derniers en tant que points de départ pour l'intégration des équations couplées du mouvement. Plusieurs méthodes numériques standard peuvent être également appliquées.[43]

II.7. CONCLUSION DU DEUXIEME CHAPITRE

L'ordinateur est fidèle et se trompe beaucoup moins que l'humain, de plus il est rapide (peut-être 10^9 fois plus rapide que l'homme) et ses résultats sont très maniables (tracé de courbes, visualisation, ...).

L'inconvénient majeur est que l'on doit le programmer, donc apprendre son langage, mettre au point les programmes -ce qui est souvent très long-, codifier les données -ce qui est souvent fastidieux-.

L'ordinateur est une machine et, différemment de l'homme, ne s'autocontrôle pas il faut donc toujours critiquer ses résultats.

Pour plusieurs des problèmes quantitatifs l'analyse est fiable et possible maintenant. Ce progrès est dû à l'énorme progression en ce qui concerne l'efficacité des ordinateurs en général, et le développement des réalisations où des programmes de Monte Carlo s'exécutent beaucoup plus rapidement que précédemment. La bonne qualité statistique de tels résultats de Monte Carlo laisse, dans le tour, employer des techniques d'analyse qui n'ont pas été plutôt accessibles.

Grâce à la possibilité qu'elles offrent, de construire des ensembles de nombres aléatoires correspondant à des distributions données, les méthodes de MC sont un outil de travail puissant, essentiellement dans deux domaines :

-en mathématique, pour le calcul d'intégrales multiples, où la compétitivité de ces méthodes provient du fait que le temps de calcul est à peu près proportionnel à l'ordre N de l'intégrale, alors que dans les méthodes classiques, il croît comme t^N .

-en physique statistique microscopique : description du comportement d'un ensemble de particules en interaction entre elles ou avec d'autres particules ; problèmes d'hydrodynamique linéaire ou non linéaire, plasmas, phénomènes de transport, simulation des composants électroniques, etc.... Les méthodes de MC sont particulièrement bien adaptées à ces problèmes à cause de leur structure même à caractère essentiellement statistique, puisque basée sur des tirages au sort de nombres aléatoires.

III.1. INTRODUCTION

Une méthode de simulation MC du transport des électrons à deux dimensions dans les semiconducteurs III - V est présentée. Dans la simulation, la dynamique de l'électron dans les coordonnées cartésiennes est semi-classique.

La description du modèle MC et les résultats de cette simulation sont reportés pour la gamme d'énergie de 0 à 40 KeV.

Aujourd'hui les outils disponibles, pour atteindre des performances numériques acceptables, font appel à des très fortes simplifications des dimensions angulaires et spectrales du problème. Une conséquence malheureusement réputée est qu'il est très difficile d'évaluer l'incertitude associée à de telle simulation.

Une fois utilisées avec soin, les méthodes MC peuvent être employées pour résoudre les problèmes qui sont autrement intraitable. Le choix du générateur des nombres aléatoires doit être soigneusement considéré.

Le degré d'interaction des électrons, est déterminé par des variables expérimentales tel que l'énergie du faisceau incident, l'épaisseur d'échantillon, sa densité, et l'angle d'inclinaison.

Dans l'ordre de prévoir les conditions expérimentales qui contrôlent ce phénomène, nous devons avoir des modèles théoriques fiables pour calculer les effets de ces paramètres expérimentaux.

L'intérêt de ce chapitre est de fournir une description complète et élémentaire sur le concept de base physique utilisé dans la simulation MC, premièrement pour la trajectoire des électrons et par la suite pour l'intensité CL et après introduire un programme MC dans un ordinateur en utilisant le langage FORTRAN 90. La motivation de ce travail est d'essayer de comprendre ce phénomène d'interaction et de le modéliser.

C'est la motivation première du présent travail autour de la méthode MC.

Cette technique qui utilise les règles du hasard, tient son nom du célèbre quartier de la principauté de Monaco dans le quel se situe le casino.

La modélisation des phénomènes est de plus en plus utilisé pour obtenir une compréhension d'un important événement physique et ainsi prédire des propriétés qui peuvent être directement prise pour les données expérimentales.

Ce type de calculs MC concerne l'évaluation quantitative des processus stochastiques telles que le transport de particules dans la matière.

Dans le domaine de la physique des hautes énergies, tous les processus étudiés sont de nature stochastique. Ainsi, les systèmes (particules, noyaux,...) ont des propriétés représentées par des variables aléatoires. Afin d'estimer les grandeurs mesurables (énergie d'accélération, trajectoire, parcours électronique,...), on procède à des calculs de type MC dans lesquels les variables aléatoires décrivant les systèmes sont échantillonnées numériquement.

Employer MC est la meilleure approche pour l'évaluation des trajectoires ainsi pour toute l'étude de l'interaction électron-matière.

L'intensité du signal cathodo émis I_{CL} , peut être écrit sous la forme d'intégrale et doit être résolu par la méthode MC.

Dans ce qui suit, un model MC est proposé pour simuler la trajectoire des électrons dans les semiconducteurs, la profondeur de pénétration, le profil de distribution des porteurs, ainsi que l'intensité de la CL (I_{CL}).

III.2. LA GENERATION DES NOMBRES ALEATOIRES

Nous avons utilisé dans notre calcul la fonction RAND pour générer les nombres aléatoires.

III.2.1. La fonction RAND

Jusqu'à présent elle nous a essentiellement servi à remplir nos besoins. Cette fonction utilise le générateur congruentiel linéaire suivant :

$$X_{n+1} = f(X_n) = (aX_n + c) \bmod m, n \geq 0, (3.1)$$

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 aléatoires (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 :

$$u_1 = 45381693/2^{31} \approx 0.2113249 \quad (3.2)$$

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 (histoire 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 [60].

Pour la fonction PORTLIB qui détermine le retour des nombres aléatoires réels dans l'intervalle compris entre 0.0 et 1.0. On a alors deux résultats RAND(x) et RANDOM(x). La valeur d'entrée, INTEGER (n), Facultative 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 $[0,1]$. [61]

III.2.2. 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, et a recommencé le lancement, et la première valeur aléatoire est sélectionnée.

Quand RAND appelle sans argument, le x est supposé pour être 0.[61]

III.2.3. Remarques

Il n'y a aucune différence entre RAND et RANDOM. Les deux fonctions sont incluses pour assurer la transférabilité du code existant qui ont référence l'un ou les deux. Les fonctions intrinsèques RANDOM_NUMBER et RANDOM_SEED fournissent les mêmes fonctionnalités.

Parce que Fortran Power Station offre aussi un sous-programme intrinsèque appelé RANDOM dans la bibliothèque FLIB par défaut, le seul chemin d'accès à cette fonction est avec l'usage de la formulation PORTLIB. Sans lui, vous pouvez seulement accéder au sous-programme dans FLIB.[61]

III.3. DETAIL DU MODELE

L'électron incident subit les séries successives d'interactions élastiques et inélastiques diffusant des événements dans le matériau. Comme résultat de ces derniers, la trajectoire originale des électrons est aléatoire.

Notre modèle de simulation est basé sur deux points :

1-le tirage des nombres aléatoires (MC) pour la détermination de la distribution, l'angle azimutal et la position du point d'impacte (choc).

2-l'effet de l'interaction inélastique qui se traduit par la perte d'énergie après chaque choc de ce type.

Dans le mode CL d'un MEB, l'énergie du faisceau incident E_0 est essentiellement plus large que l'énergie E_{e-t} de production d'une paire électron-trou (pour le GaAs $E_{e-t}=4.6$ eV). Ce qui fait qu'un électron dont son énergie est de 20 à 30 KeV peut générer plusieurs milliers des paires électrons-trous le long de son trajet dans le volume d'interaction.

Le taux de génération totale est donné par [9]:

$$G = \frac{E_0(1-\gamma)}{E_{e-h}} \quad (3.4)$$

Où γ est le taux d'énergie rétrodiffusée (pour le GaAs $\gamma = 25$ %).

L'énergie des électrons pénétrant dans le solide est $E = E_0 (1-\gamma)$ perdue par des collisions successives et aléatoires jusqu' à la fin de la trajectoire.

La distance S est écrite comme [9]:

$$S = -\lambda \ln(R) \quad (3.5)$$

où R est un nombre aléatoire entre 0 et 1.

La distance le long de la trajectoire entre les événements de diffusion élastique est donnée par le libre parcours moyen de diffusion λ qui peut être obtenu à partir de la section efficace totale de diffusion [9]:

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad (3.6)$$

Où A est le poids atomique (pour le GaAs $A = 144,64$ g),

N_A est le nombre de l'Avogadro ($N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$),

ρ est la densité du matériau (pour GaAs $\rho = 5,32$ g.Cm⁻³), et

σ est la section efficace totale de diffusion.

La section efficace totale de diffusion de Rutherford est donnée par[9]:

$$\sigma = (5.21 \cdot 10^{-21}) \left[\frac{Z}{E} \right]^2 \left[\frac{E + m_0 c^2}{E + 2m_0 c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta + 1)} \quad (3.7)$$

Où Z est le nombre atomique de l'atome de la dispersion (pour GaAs $Z = 64$),

E est l'énergie d'électron en KeV,

C est la vitesse de lumière,

m_0 est la masse d'électron,

δ est un paramètre de la sélection.

La section efficace de diffusion la plus exacte devrait être utilisée pour les basses énergies d'accélération pour les solides lourds (de hauts nombres atomiques)

Le paramètre de la sélection δ est donné par[9]:

$$\delta = (3.4 \cdot 10^{-3}) \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (3.8)$$

La correction relativiste dans l'équation (3.7) peut être ignorée pour des énergies d'électron moins de 50 KeV, c.-à-d., pour la plupart des travaux du MEB. Pour des énergies plus élevées, la correction relativiste de la section efficace est considérable et devrait être appliquée. Le modèle de diffusion de Rutherford est assez exact pour les énergies de l'électron de 20 à 50 KeV pour les solides de nombres atomiques bas.

III.3.1. La perte d'énergie suite aux collisions

La perte d'énergie le long de la trajectoire, entre chaque événement de diffusion, est approximé par l'équation de Beth [62,63]:

$$\frac{dE}{dS} = \frac{-2\pi e^4 \rho N_A}{E} \sum_i \frac{c_i z_i}{A} \ln \frac{\gamma E}{J_i} \tag{3.9}$$

$\gamma = 1.166$ pour l'énergie relativiste d'électrons.

J_i : l'énergie moyenne d'ionisation de l'espèce i .

Les valeurs de J peuvent être calculées à partir de l'approximation de Berger et Seltzer [64] d'où l'énergie moyenne dissipée par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donnée par [9,13] :

$$j = (9.76 Z + 58.5 Z^{0.19}) 10^{-3} \text{ (KeV)} \tag{3.10}$$

Pour les basses énergies d'électron ($E < 6.34J$), la modification empirique à l'expression de Bethe par Rao-Sahib et Wittry [14] devrait être employé.

Les valeurs numériques de J utilisé sont obtenues par l'intermédiaire de l'équation (3.10). Pour une cible avec un seul élément, l'équation (3.9) devient [63]:

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{EA} \ln \left(\frac{1.166E}{j} \right) \tag{3.11}$$

Il est noté que les équation (3.9) et (3.11) sont valide seulement pour $\frac{\gamma E}{J} > 1$, par la suite la trajectoire des électrons peut être simulée seulement en dessous d'une énergie $E = \frac{J}{\gamma}$ lors d'utilisation de l'équation de Beth pour la perte d'énergie. La valeur de E sera limitée par la plus grande valeur de z dans une cible à éléments mixtes.

III.3.2. Séquence de calcul

La séquence d'événement dans la simulation MC des trajectoires est illustrée sur la figure (3.1). Un électron d'énergie E_0 frappe l'échantillon à l'origine et à 90° de sa surface. Le premier événement d'interaction est supposé de se produire à l'origine. L'angle de diffusion θ_0 est la longueur d'étape λ_0 sont calculé par la technique MC (de façon aléatoire).

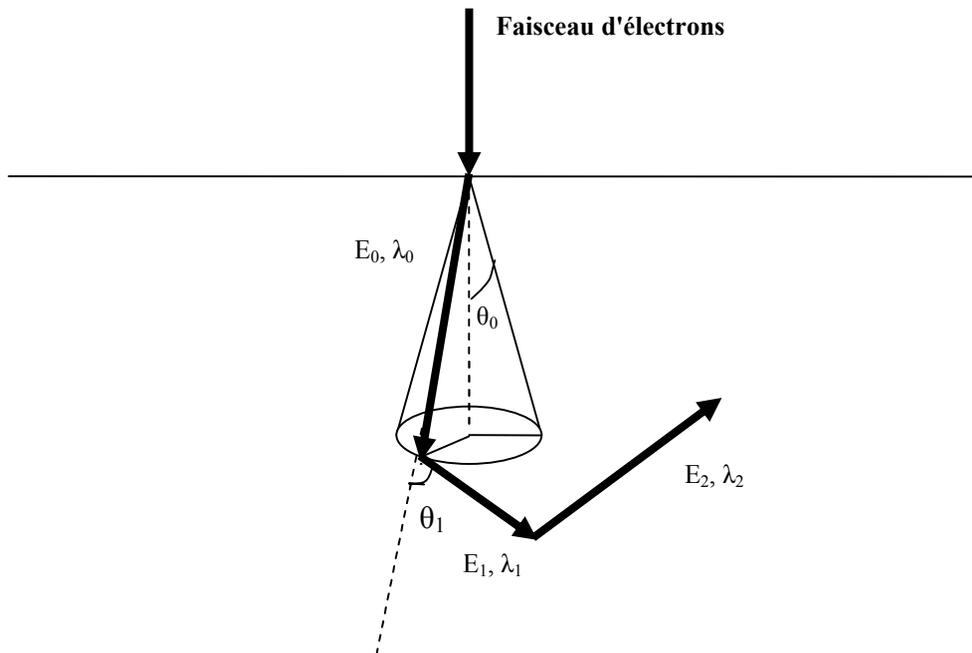


Figure (3.1) : la séquence de calcul de la trajectoire

Après chaque collision l'électron perd une partie de son énergie en produisant une paire électron-trou. En suite S_{n+1} et θ_{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 enregistrés ou bien sauvegardés dans le programme. Dans l'ordre représenté les effets moyen d'un faisceau électronique réel qui contient plusieurs électrons incident, un grand nombre de trajectoires électroniques doit être simulé.

Il n'y aura pas de trajectoire identique à cause du nombre large des nombres aléatoires et longueurs d'étapes utilisées.

La nature complexe des interactions est évidente dans ce genre de tracé de trajectoire.

Nos calculs sont divisés en deux catégories, la première est le calcul de la trajectoire électronique, la profondeur de pénétration et le profil de distribution et pour cela on procède aux étapes suivantes :

L'échantillon est divisé par plusieurs zones sous forme de demi cercle, de rayons r_1 , r_2 , r_3 , ..., r_n . Figure (3.2). A chaque zone, une quantité de paires électron-trou (Δn) est produite (générée). Cet excès de porteurs sera transformé sous forme de photocourant par l'application d'un champ électrique extérieur (cas d'EBIC Electron Beam Induced Current), ou transformé en lumière par recombinaison (émission photonique cas de la Cathodoluminescence CL) et c'est notre intérêt.

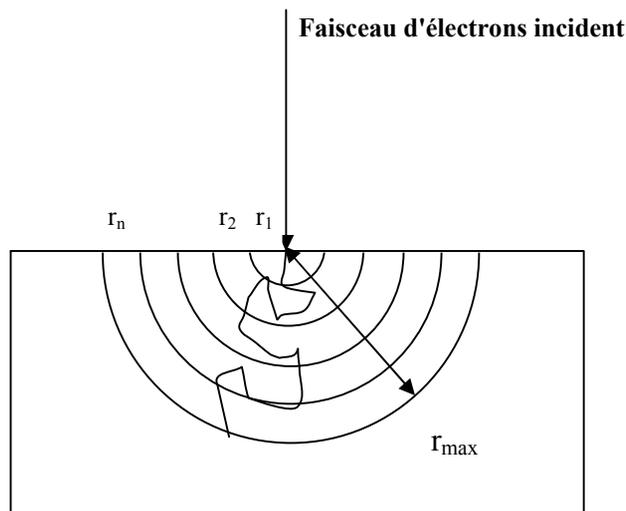


Figure (3.2): représentation schématique de la méthode de MC employée dans ce modèle de calcul (demi cercles).

Dans notre calcul nous sommes intéressés à la génération des paires électrons-trous produites pendant la collision des électrons incident avec les atomes du matériau (marche aléatoire). Après chaque collision les électrons perdent une énergie E_{e-t} 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 considérées. Ainsi on détermine la profondeur de pénétration comme étant le r_{max} .

Afin de comparer notre résultat, concernant la profondeur de pénétration, à d'autres modèles, notre calcul est confronté à trois modèles; Kanaya-Okayama, Wittry-Kyser et Everhart-Hoff.

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

L'échantillon est divisé par plusieurs zones, $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_n$. Figure (3.3). à chaque zone, une quantité de paires électron-trou (Δn_i) est générée.

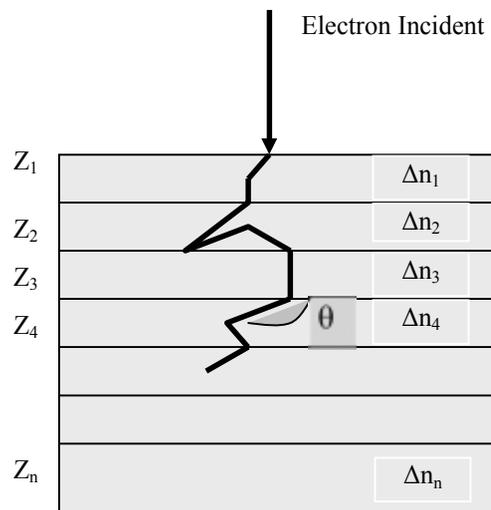


Figure (3.3) : représentation schématique de la méthode de MC employée dans ce modèle de calcul (couches rectangulaires). La distance S et l'angle θ sont deux valeurs aléatoires

L'intensité de la cathodoluminescence I_{CL} , vient seulement de la recombinaison des porteurs en excès dans ces régions et elle est donnée par [65] :

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \exp(-\alpha z) dz \tag{3.12}$$

Où α est le coefficient d'absorption.

En utilisant les couches proposées dans notre modèle (figure (3.3)) cet intégrale devient une sommation sur le nombre de couches et on a alors:

$$\begin{aligned} I_{CL} &= \sum_{i=1}^n \frac{(\Delta n)_i}{\tau_n} e^{-\alpha z_i} \\ &= \frac{\Delta n_1}{\tau} e^{-\alpha z_1} + \frac{\Delta n_2}{\tau} e^{-\alpha z_2} + \dots + \frac{\Delta n_n}{\tau} e^{-\alpha z_n} \\ &= CL_1 + CL_2 + \dots + CL_n \end{aligned}$$

Notant qu'un nombre de couches égale à dix est suffisant pour l'obtention des résultats fiables (même on a essayé jusqu'à 60 et 100 couches).

III.3.3. Conception, Exécution et Rendement d'un programme MC

Dus aux approches varies de programmation sur ordinateur, il n'y pas un unique programme de simulation MC de diffusion des électrons et de perte d'énergie dans des cibles solide. Un bref bilan d'approches varies present est décrit par Bishop [63,66].

Ce modèle élaboré n'est pas le seul qui décrit l'interaction électron-matière et la CL en particulier, il existe bien d'autres modèles basés sur des hypothèses différentes tels que les modèles de Kanaya-Okayama, Wittry-Kyser et Everhart-Hoff.

III.4. PROGRAMME DE SIMULATION

Ce programme de simulation à pour objectifs de calculer la trajectoire des électrons dans un échantillon semiconducteur type p et c'est le GaAs (Arséniure de Gallium). Ces trajectoires sont représentés dans une projection sur le plan (x,z) normal à la surface (x,y) de la cible et contient le faisceau d'électrons incident. L'impacte peut être normal ou oblique dans le plan (x,z) mais dans nos calculs on constate qu'il est normal.

Il faut éviter à tout prix d'utiliser des générateurs installés si on n'a pas l'accès aux fichiers source de la programmation. De nos jours il n'y aucune raison de continuer à utiliser ces générateurs obsolètes et dangereux.

Selon la loi des grands nombres, plus que l'expérience est répétée, plus que les résultats de cette expérience se rapprochent de la probabilité théorique qu'un événement soit réalisé.

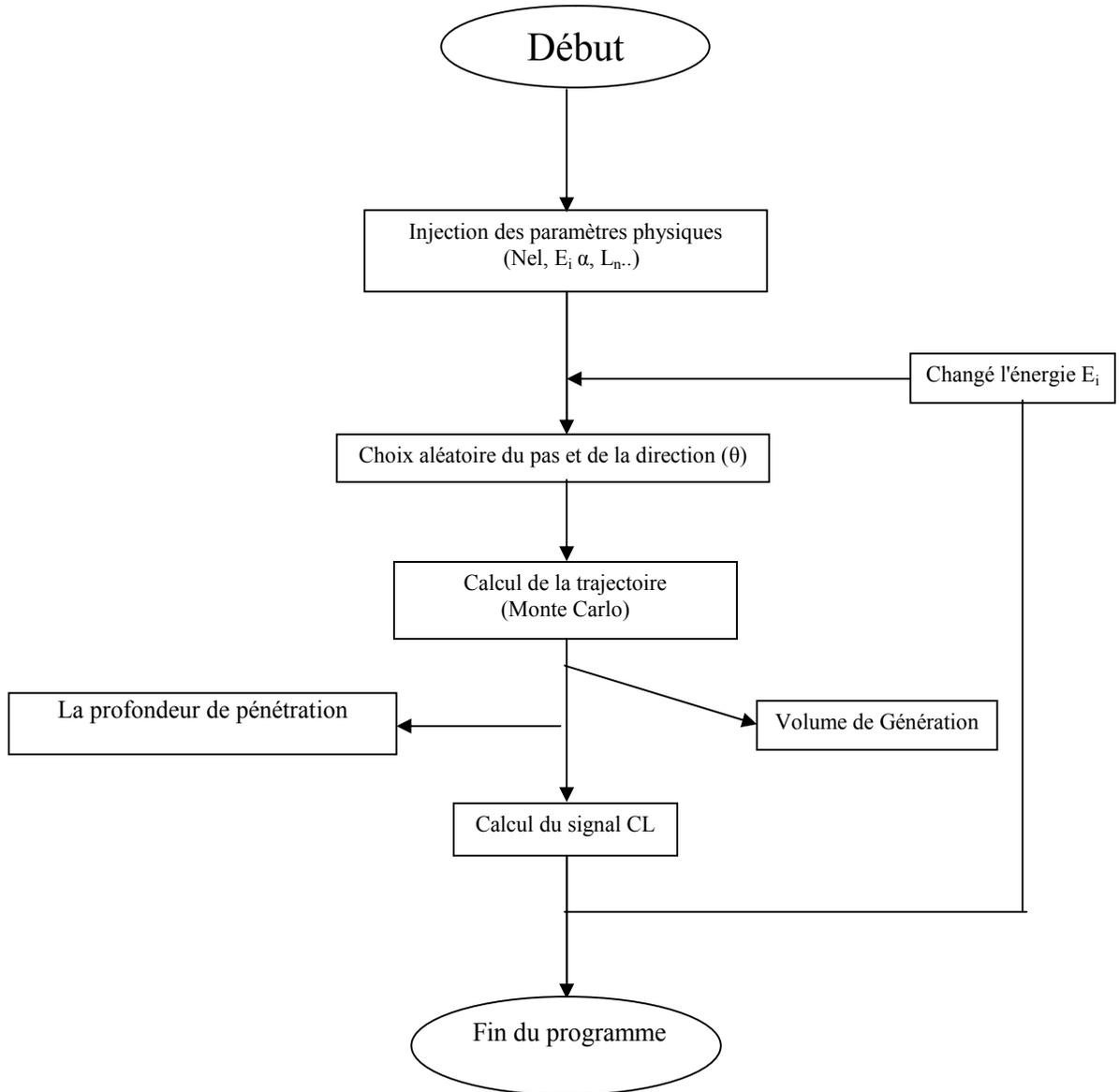
Ainsi la trajectoire d'une particule revêt un caractère fortement aléatoire : les méthodes de MC sont alors des méthodes de prédilection (par fois les seules possibles) pour traiter ce type de problème : c'est sans doute dans cette voie que les méthodes de MC connaissent actuellement leurs plus importantes applications et leur meilleure justification.

Les méthodes Monte Carlo sont omniprésentes en théorie de la matière condensée, elles permettent d'obtenir des mesures "exactes" en comparaison directe avec les données expérimentales. Bien que datant de plus déjà du demi-siècle du d'un, elles se révèlent toujours aussi prolifiques. Où ces techniques permettent de fournir des réponses précis dont les approches analytiques ou expérimentales sont souvent limitées.

Notre modèle MC est basé sur l'algorithmes suivant :

1. On prend un électron d'énergie E .
2. On donne la valeur du germe n (valeur initiale) et on génère le un nombre aléatoire $R[0,1]$.
3. Si $R = 0$ on génère un autre nombre, sinon on calcul le vole libre $S = -\lambda \ln(R)$ et l'angle aléatoire θ .
4. On détermine la position (x,y) . ($x = S \sin \theta$ et $y = S \cos \theta$).
5. On Calcule la variation d'énergie (la perte d'énergie)
6. Si $(E > E_{e-t})$ l'essai est accepté alors il y a formation d'une paire électron-trou (et on revient à l'étape 2). Sinon on refuse l'essai et on retourne à l'étape 1(choie d'un autre électron).
7. On calcul la profondeur de pénétration, et par la suite l'intensité CL.
8. Affichage des résultats.

III.5. ORGANIGRAMME



III.6. CONCLUSION

Dans ce chapitre un modèle de calcul MC des trajectoires électroniques et de la profondeur de pénétration ainsi que l'intensité I_{CL} est présenté. L'élaboration de ce modèle est basée sur la section efficace de diffusion de Rutherford et perte d'énergie de Bethe.

Ce modèle inclus l'influence des paramètres du matériau (coefficient d'absorption α et longueur de diffusion L_n) et les paramètres du faisceau (N_{ele} et E_0)

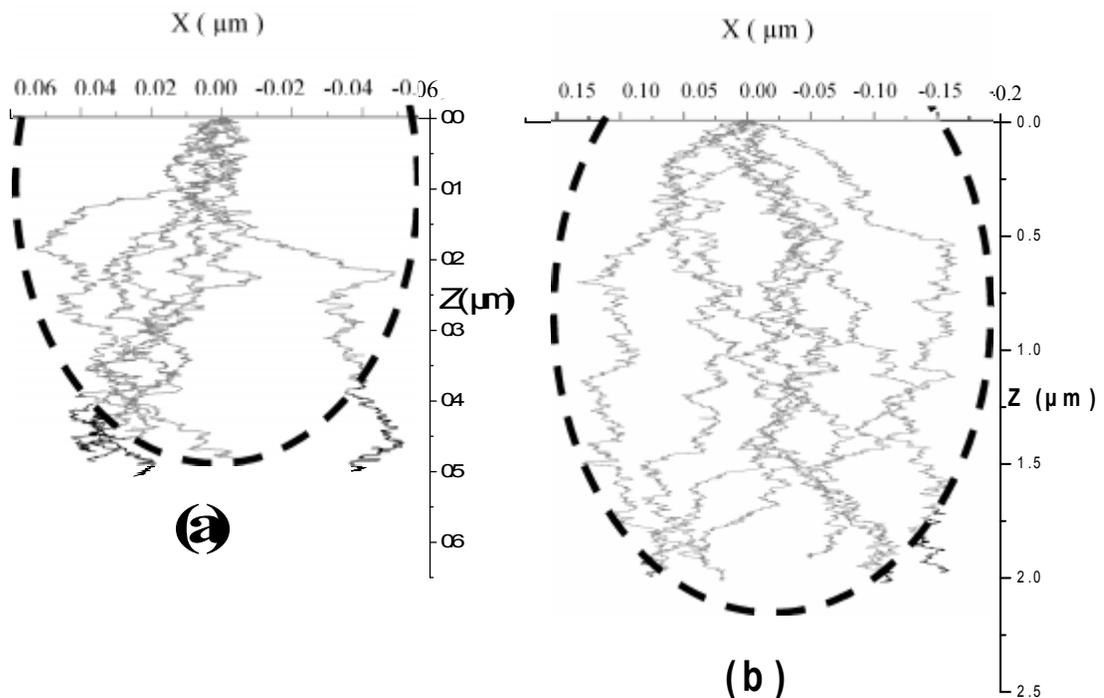
Pour montrer la consistance du modèle le 4^{ème} chapitre est consacré aux résultats obtenus.

IV. INTRODUCTION

Le parcours des électrons suites à leurs interactions avec le matériau semiconducteur ainsi que leurs profondeurs de pénétration varient avec l'énergie d'accélération de ces électrons, cette variation implique par la suite le calcul de l'intensité cathodoluminescence. Dans l'ordre de prévoir les paramètres responsables de cette variation et même leurs influences sur l'intensité CL on présentera les résultats de la simulation basés sur notre modèle et afin de valider ce dernier nous avons fait une comparaison avec les résultats expérimentaux reportés dans la littérature.

IV.1. TRAJECTOIRE DES ELECTRONS:

Dans des études précédentes la trajectoire des électrons a été bien éclaircie mais notre résultat n'est qu'un autre appuis de plus, car comme il est schématisé (montré sur la figure (4.1)), la trajectoire de 10 électrons dans un échantillon GaAs-p pour quatre valeurs d'énergie d'accélération 10, 20, 30, et 40 KeV.



Il est clair que la profondeur de pénétration et même le volume de génération dépendent de l'énergie de ces électrons. Ce résultat conforme et confirme des résultats prouvés bien avant par d'autres modèles[7,12].

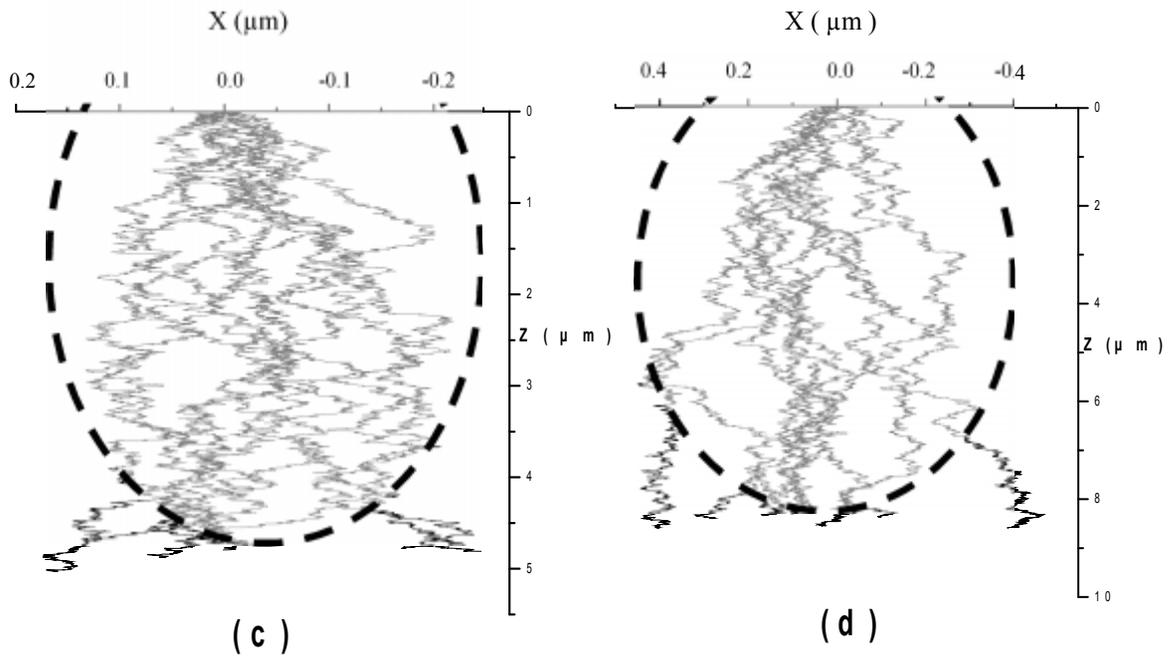


Figure (4.1) : trajectoires de dix électrons dans le GaAs pour différentes valeurs de l'énergie d'accélération 10 KeV (a), 20 KeV (b), 30 KeV (c) et 40 KeV (d)

La forme du volume de génération n'est pas bien déterminée(connue),mais d'après nos résultats on peut dire qu'elle est hémisphérique. Selon les travaux précédents en ce basant sur eux, cette forme dépend du numéro atomique Z , mais dans notre calcul il n'y a pas une confirmation au propos de ce sujet là, mais comme même, il y a deux paramètres susceptibles (probables) qui influent sur cette forme de génération, le numéro atomique Z et la densité ρ . Notant aussi que pour une cible à éléments mixtes c'est-à-dire multicouche ou alliage il y a d'autres paramètres qui entrent en jeux.

IV.2. PROFONDEUR DE PENETRATION:

La profondeur de pénétration est aussi calculée en fonction de l'énergie d'accélération pour le matériau GaAs, toujours dans la gamme d'énergie de 0 à 40 KeV, concernant notre modèle, les calculs coïncides avec les deux modèles de Kanaya-Okayama et Wittry-Kyser ce qui renforce notre résultat, mais on remarque que le modèle proposé par Everhat-Hoff est différent, et ceci reste toujours inexplicable, car à basses énergies on ignore jusqu'à présent la réelle et la vraie dépendance de cette profondeur de pénétration.

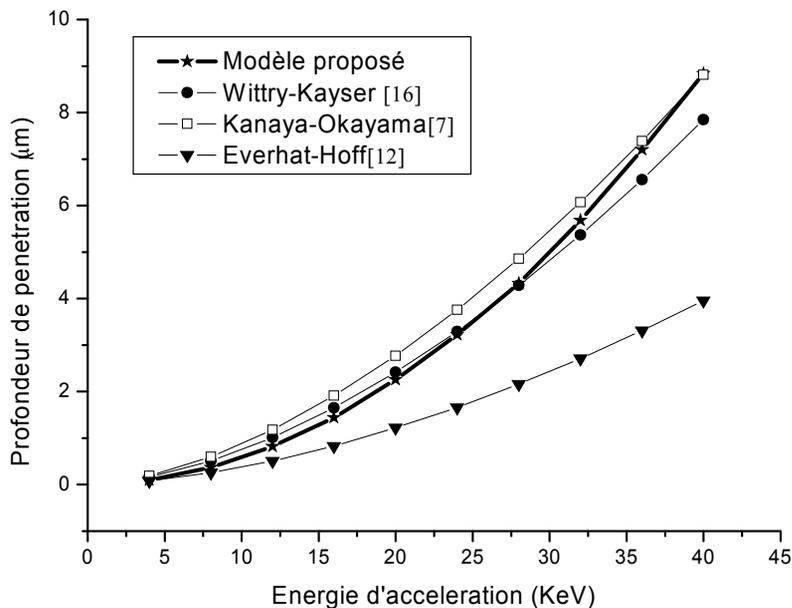


Figure (4.2) : profondeur de pénétration en fonction de l'énergie d'accélération et comparaison avec trois modèles.

IV.3. PROFIL DE DISTRIBUTION

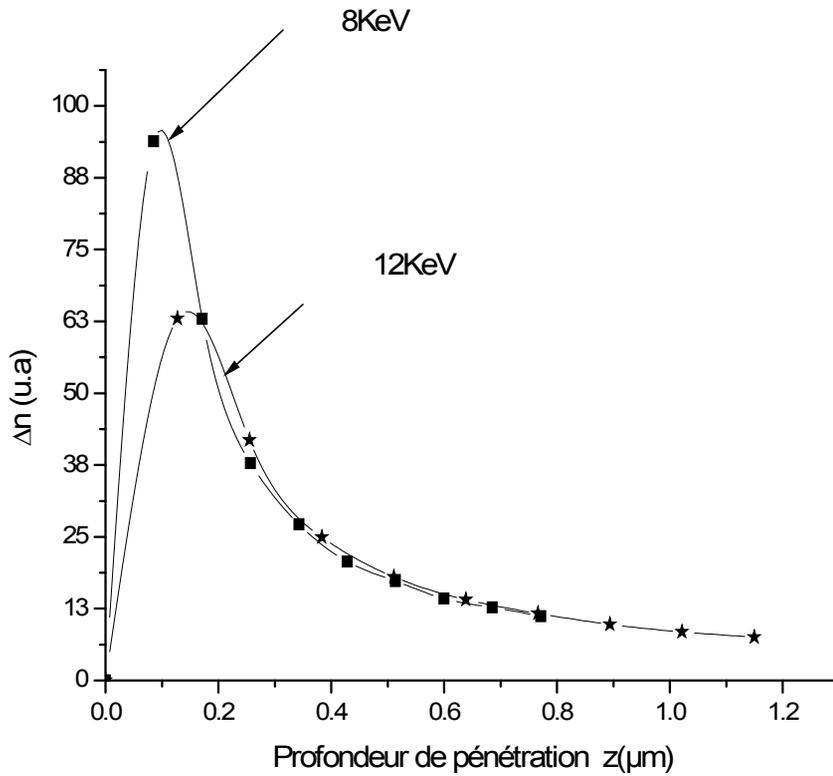


figure (4.3) : profil de distribution des porteurs

La figure (4.3) illustre l'excès des porteurs en fonction de la profondeur de pénétration pour deux valeurs de l'énergie d'accélération 8 et 12 KeV.

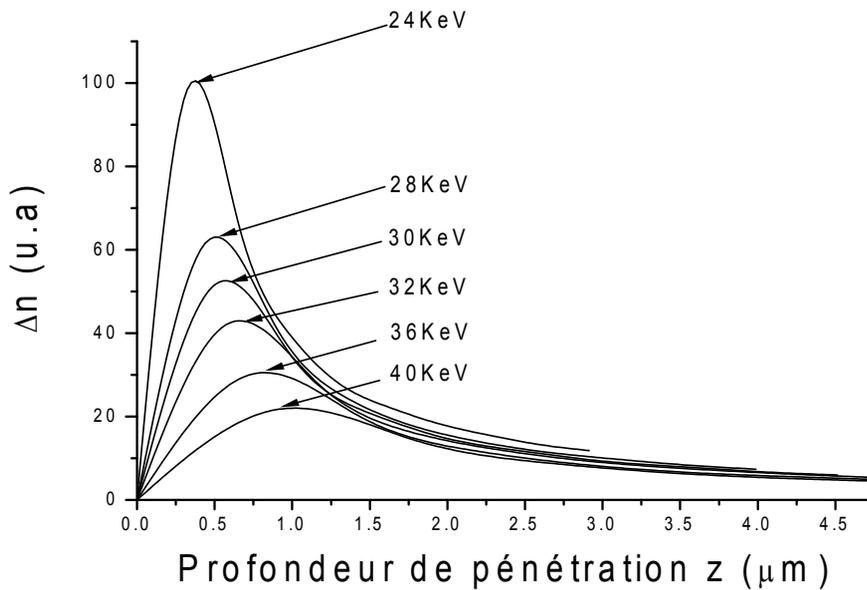


figure (4.4) : profil de distribution des porteurs

Ainsi que la figure (4.4) illustre le profil de distribution pour différentes énergies d'accélération et il est clair qu'au fur et à mesure, le maximum se déplace vers des pénétrations plus profondes que l'énergie d'accélération augmente.

IV.4. SIGNAL CATHODOLUMINESCENCE

Les courbes qu'on exploite en général en CL sont les courbes $I_{CL} = f(E_0)$, parce que dans la plus part des cas, les auteurs utilisent ces courbes pour déterminer les paramètres physiques. La forme générale des courbes $I_{CL} = f(E_0)$ est similaire pour tous les modèles utilisés. L'allure de la courbe I_{CL} en fonction de E_0 présente, en générale, un maximum, elle est déterminée par la génération et la recombinaison des porteurs à faibles énergies d'accélération et par l'absorption à hautes énergies d'accélération.

La figure (4.5) représente la dépendance de l'intensité de la cathodoluminescence comme une fonction de l'énergie d'accélération pour 100 électrons et pour un coefficient d'absorption $\alpha = 5.10^3 \text{ cm}^{-1}$ et une longueur de diffusion $L_n = 0.7 \mu\text{m}$.

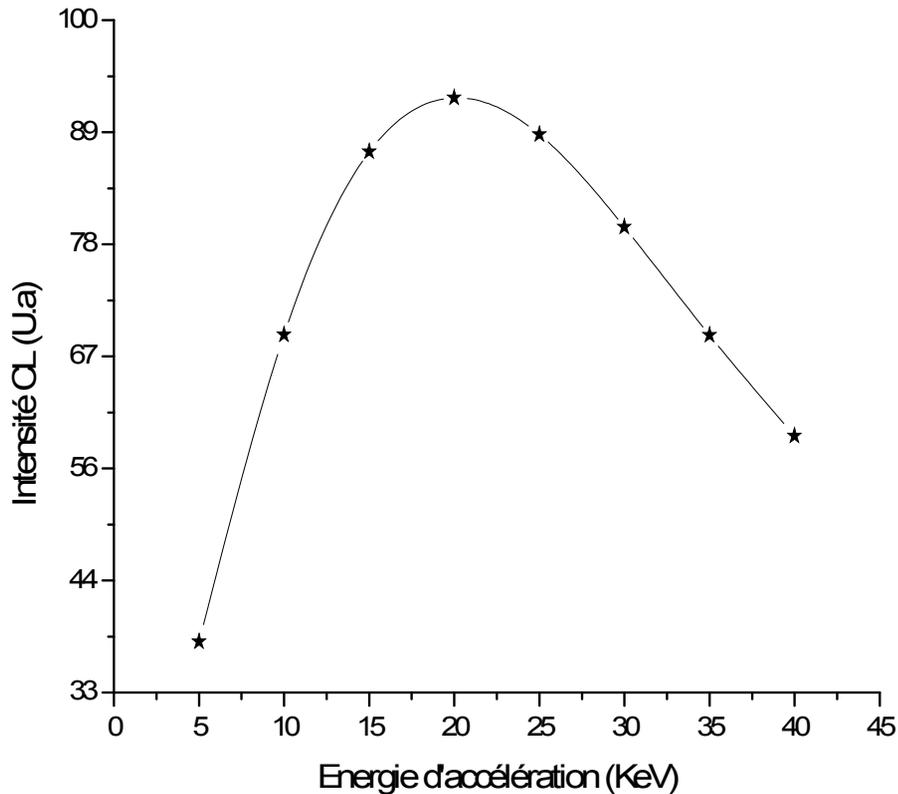


Figure (4.5) : L'intensité Cathodoluminescence I_{CL} en fonction de l'énergie d'accélération E_0 pour ($N_{ele} = 100$, $\alpha = 5.10^3 \text{ cm}^{-1}$, $L_n = 0.7 \mu\text{m}$)

IV.5. INFLUENCE DES PARAMETRES DE VOLUME (L_n , α)

Dans ce paragraphe on présentera l'influence de quelques paramètres physiques, sur le comportement des courbes théoriques de l'intensité de la CL (I_{CL}) en fonction de l'énergie d'accélération E_0 .

IV.5.1. Influence du Coefficient d'Absorption (α)

La figure (4.6) montre la variation de I_{CL} en fonction de E_0 sous l'influence du coefficient d'absorption α . Mais on constate bien que l'intensité CL soit dégradée lorsqu'on augmente le coefficient d'absorption. Ce résultat est similaire à celui trouvé dans la littérature[7].

Les paires d'électrons-trous sont produites, il y a une augmentation de l'intensité de CL et alors elle diminue après atteinte d'un maximum, cette décroissance dépend du coefficient d'absorption.

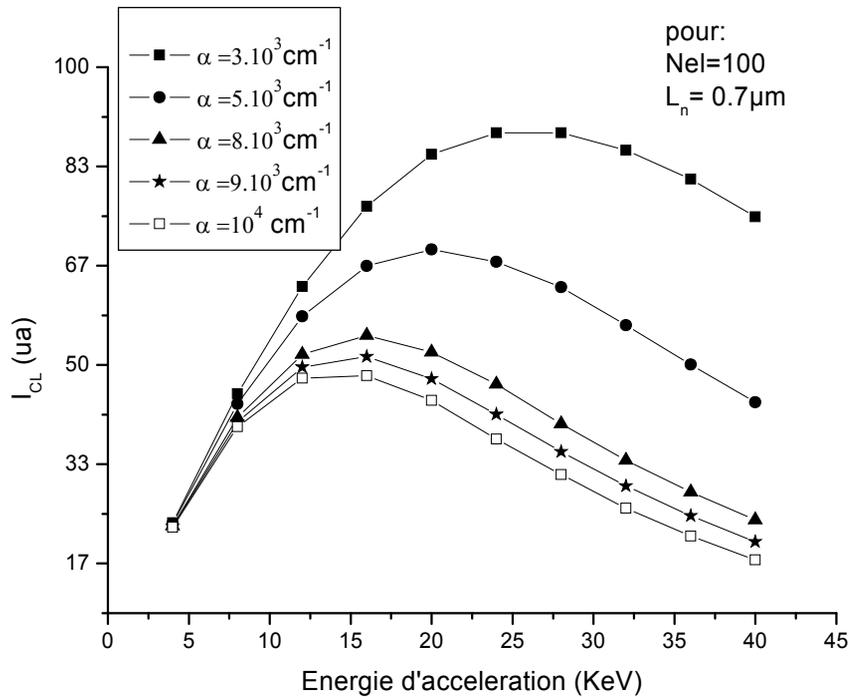


Figure (4.6) : I_{CL} en fonction de l'énergie d'accélération E_0 pour différentes valeurs du coefficient d'absorption

IV.5.2. Influence de la Longueur de Diffusion (L_n)

Un des paramètres de volume les plus important est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires L_n qui joue un grand rôle dans l'étude caractéristique des matériaux semiconducteurs.

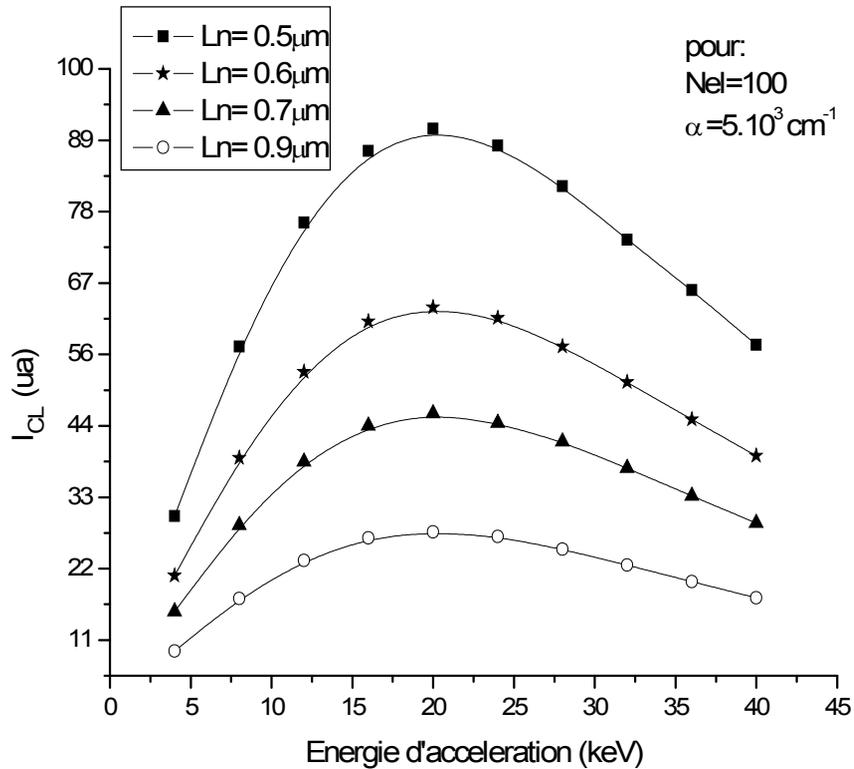


Figure (4.7) : I_{CL} en fonction de l'énergie d'accélération E_0 pour différentes valeurs de la longueur de diffusion

Dans les zones neutres où le champ électrique est nul, la longueur de diffusion est donnée par la relation suivante :

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$$

Où D_n et τ_n sont le coefficient de diffusion et la durée de vie des porteurs minoritaires respectivement.

L'augmentation de la longueur de diffusion signifie une diffusion plus grande des porteurs minoritaires. La figure (4.7) montre la variation de I_{CL} en fonction de E_0 pour différent L_n (0.5, 0.6, 0.7, et 0.9) μm , dans tous les cas , I_{CL} décroît quand la longueur de diffusion augmente.

Ce résultat est en accord avec celui observé par différent auteurs[6,7,11,12].

IV.6. INFLUENCE DES PARAMETRES DU FAISCEAU (E_0 , N_{el})

Le calcul par la méthode Monte Carlo montre l'influence du nombre d'électrons sur le volume d'interaction dans un échantillon semiconducteur (GaAs) figure (4.8). On constate bien que le volume de génération et la profondeur de pénétration sont presque constants pour les 6 cas (5,11,25,50,75 et 100 électrons).

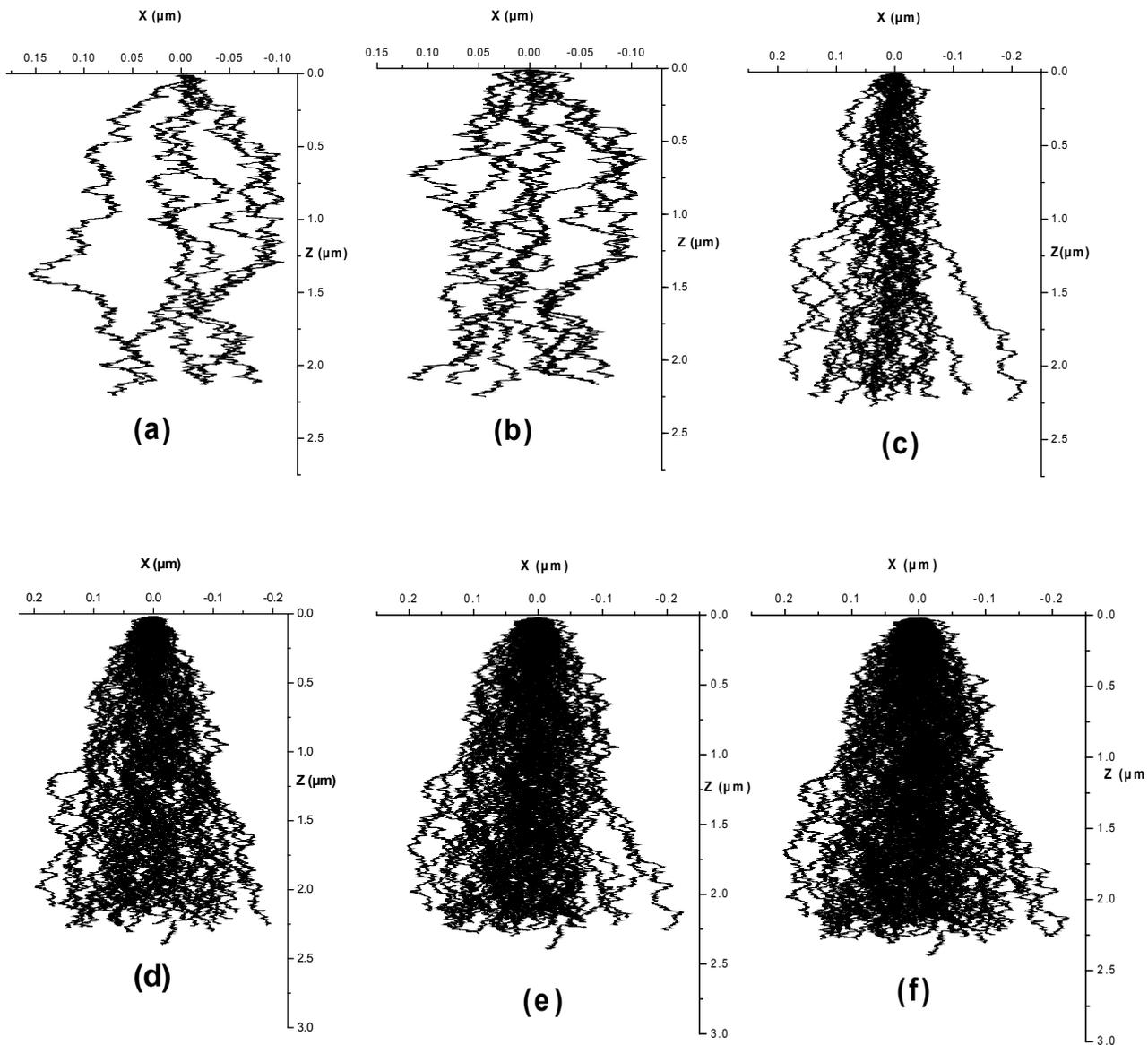


Figure (4.8) : l'influence du nombre d'électrons sur le volume d'interaction
 (a)5, (b)11, (c)25, (d)50, (e)75 et (f)100 électrons.

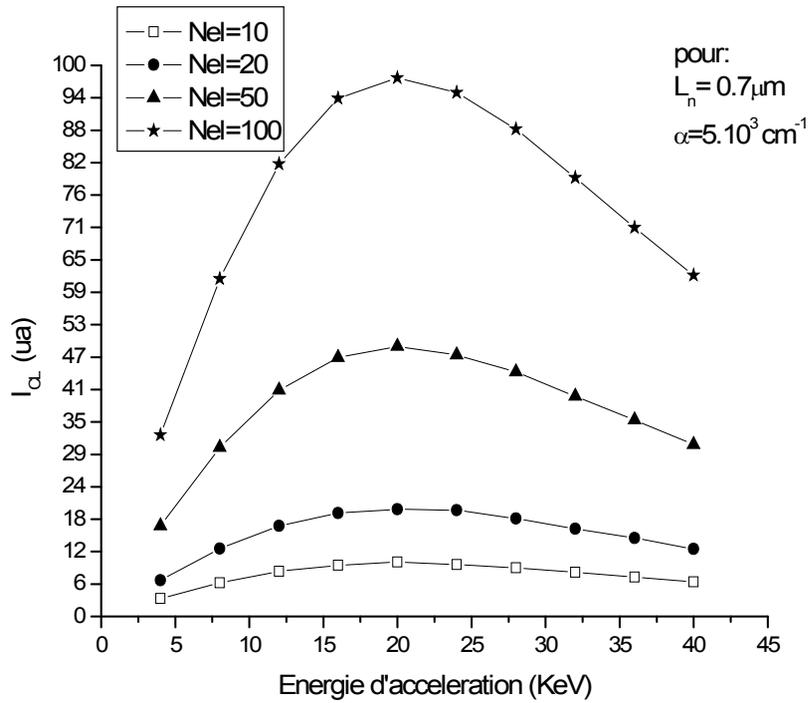


Figure (4.9) : I_{CL} en fonction de l'énergie d'accélération E_0 pour différentes valeurs de nombre d'électrons.

D'autre part on remarque que la zone noire qui représente le volume de génération augmente quand le nombre d'électrons augmente (augmentation du courant I_p), en plus l'intensité de la cathodoluminescence (I_{CL}) augmente à chaque fois que le nombre d'électrons est plus grand, ceci tombe en accord avec l'augmentation du courant I_p [69]. La figure (4.9) montre un exemple de courbe $I_{CL}=f(E_0)$ pour différent N_{el} .

IV.7. COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE

La figure (4.10) montre une comparaison des résultats obtenus via la simulation avec ceux des données expérimentales obtenus par [70] pour un échantillon GaAs polis chimiquement. Et grâce à cette simulation on a pu déterminer la longueur de diffusion ainsi que le coefficient d'absorption dont :

$$L_n = 0.7 \mu\text{m} \text{ et } \alpha = 5.10^3 \text{ cm}^{-1}$$

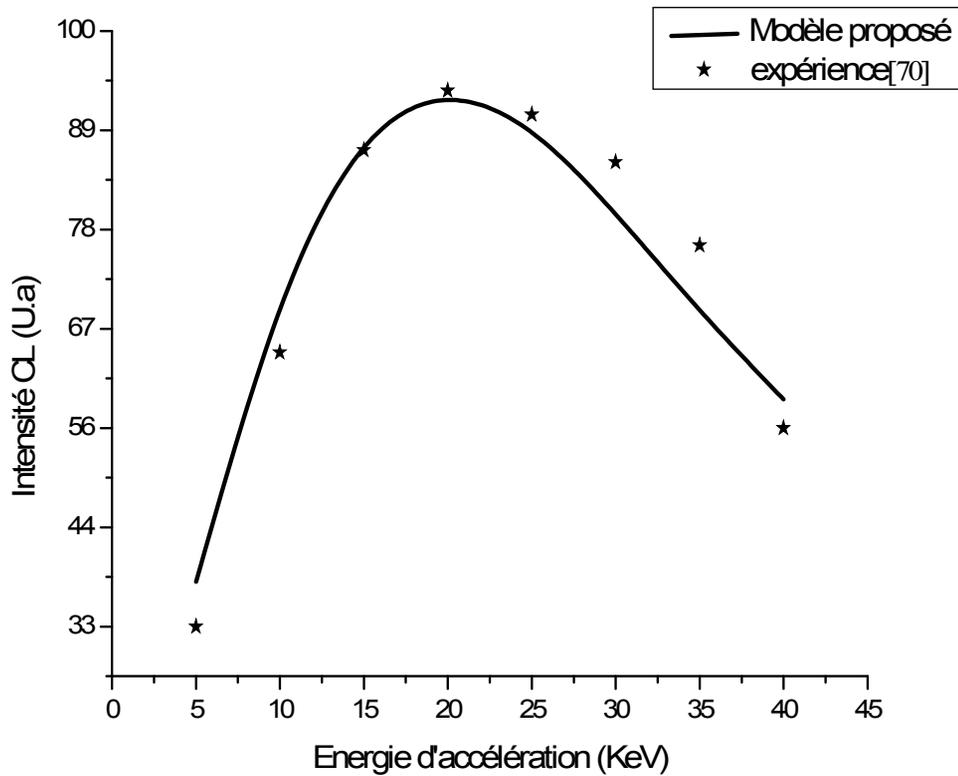


Figure (4.10) : I_{CL} en fonction de E_0 . Comparaison des résultats obtenus par la simulation avec ceux de l'expérience [70].

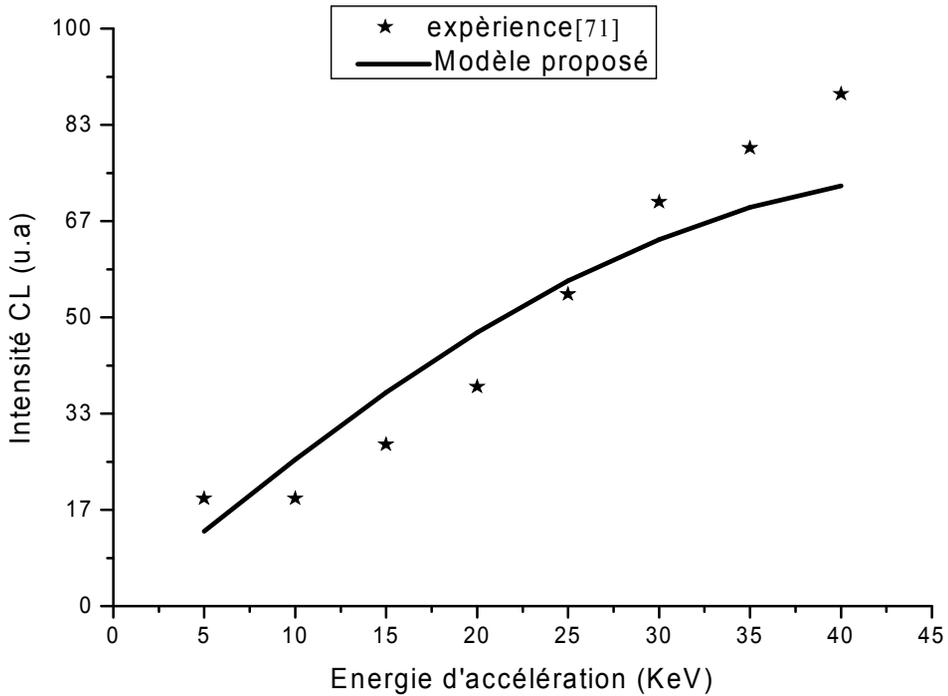


Figure (4.11) : I_{CL} en fonction de E_0 . Comparaison des résultats obtenus par la simulation avec ceux de l'expérience [71].

La figure (4.11) illustre une comparaison des résultats expérimentaux [71] d'un échantillon GaAs bien polis avec ceux obtenus par la voie de la simulation qui nous a permis de trouver la longueur de diffusion et le coefficient d'absorption dont :

$$L_n = 0.8 \mu\text{m} \text{ et } \alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}.$$

Pour améliorer le fitting, il faut introduire d'autres paramètres, tels que, le diamètre du faisceau (d_0), et la recombinaison en surface.

IV.8. CONCLUSION

La plus part des courbes théoriques $I_{CL}=f(E_0)$ présente un maximum dû essentiellement à la génération et la recombinaison des porteurs pour les faibles énergies d'accélération et à l'absorption pour les fortes énergies d'accélération. Chaque paramètre du matériau donne sa signature sur l'allure de la courbe $I_{CL}=f(E_0)$, ce qui rend possible la détermination de ces paramètres à partir de la comparaison des courbes théoriques avec les résultats expérimentaux.

La profondeur de pénétration des électrons et l'intensité de CL ont été calculées, et ainsi qu'une comparaison avec d'autres modèles est réalisée. .

Les calculs de Monte Carlo indiquent que les limites du volume de génération ne sont pas bien définies, mais il prend presque la forme hémisphérique. On observe également que la densité de la trajectoire d'électron change de manière significative et que la dissipation d'énergie n'est pas uniforme.

Conclusion générale

Durant ces deux années de travail nous nous sommes attachés d'abord à la compréhension des phénomènes liés à l'interaction électrons-matière, la génération des porteurs et leur recombinaison, et aux phénomènes de luminescence qui sont importants pour l'analyse du signal CL émis.

Nous avons proposé un modèle MC, qui est basé sur la marche aléatoire des électrons en interaction avec le matériau, nous s'appuyant sur la formule de Bethe.

Le volume de génération a presque une forme hémisphérique, et il varie en fonction de l'énergie d'accélération, par contre il n'y a aucune influence du nombre des électrons incidents sur le volume de génération.

La profondeur de pénétration obtenue dans ce modèle est en bon accord avec d'autres modèles surtout à basse énergie excepté celui de Everhat-Hoff.

La variation de I_{CL} en fonction de E_0 présente un maximum qui est principalement due aux phénomènes de génération et recombinaison des porteurs produits dans le volume de génération qui sont accompagnées d'absorption et d'émission, dont la position dépend de différents paramètres.

Les résultats acquis suite à l'application de ce modèle de simulation a permet une comparaison entre les courbes théoriques et les courbes expérimentales qui sont reporté dans la littérature pour différents échantillons GaAs, et de déduire les valeurs de différents paramètres.

Les valeurs déduites concernant la longueur de diffusion et le coefficient d'absorption son en accord avec les valeurs publiées.

Il faut noter tout de même que le modèle proposé présente certaines restrictions qui sont :

- l'absence de la recombinaison en surface.
- La prise des coordonnées à deux dimensions seulement.

Ainsi d'autres vois d'amélioration du modèle sont ouvertes en perspective.

Références

- [1] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 4^{em} édition, 1998
- [2] Y. Sayad, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2003
- [3] M. Hadeff, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 1999
- [4] A. Nouiri, Thèse d'état, Université Mentouri Constantine, 2000
- [5] D. Bahri, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2002
- [6] B.G. Yacobi, D.B. Holt, J. Appl. Phys. 59 (4) R1 1986
- [7] K. Kanaya, S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys. 5, pp. 43, 1972
- [8] K. Guergouri, Thèse d'état, Université Paris 6, 1987
- [9] B.G. Yacobi and D.B. Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids", Edition Plenum Press, New York and London, 1990
- [10] R. Shimizu, Ze-Jun. D. Rep. Prog. Phys, 55, 1992
- [11] H.E. Bishop, Brit. J. Appl. Phys, Vol 18, 1967
- [12] T.E. Everhart and P.H. Hoff, J. Appl. Phys. 42(13), 1971
- [13] G. Fontaine «Emission Electronique et Contrastes », Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 123, 1978
- [14] T.S. Rao-Sahib and D.B. Wittry, J. Appl. Phys. 40(9), 3745, 1969
- [15] A.E. Gruen and Z. Naturforsch, 12A, 89, 1957
- [16] D.B. Wittry and D.F. Keyser, J. Appl. Phys., 38, 375, 1967
- [17] C. Klein, J. Appl. Phys. 39(4), 2029, 1968
- [18] D. Pastré, Thèse de doctorat, Université De Reims Champagne Ardenne, 1999
- [19] V.I. Petrov, R.S. Gvozdover, Scanning, 13, 410, 1991
- [20] H. Saijo and M. Shiojri, ICEM 14, Cancun (Mexico), symp. Vol 1, 433, 1998
- [21] S. Hildebrandt, J. Schreiber, W. Hergert, V.I. Petrov, Phys. Stat. Sol(a) 110, 1988
- [22] J. Schreiber, S. Hildebrandt, H.S. Leipner, Phys. Stat. Sol(a) 138, 1993
- [23] V. Barbin and M. Schoever, C.R. Acad. Sci. Paris, 325, 157, 1997
- [24] F. Cesbon, A. Baumer, P. Blanc et D. Ohnenstetter, C.R. Acad. Sci. Paris t. 324, série 3a, 353, 1997
- [25] G.V. Saporin, Biophysical Electron Microscopy, Academic Press London, 451, 1990

- [26] C.C.Klick and J.H.Schulman, Luminescence of solids, *Solid.Stat.Phys.*5,97, 1957
- [27] S.Kouissa, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2001.
- [28] G.R.Booker, *Microscopy of Semiconducting Materials*, 259, 1981
- [29] K.Lohnert, E.Kubalek, *Phys.Stat.Sol (a)* 83, 307, 1984
- [30] J.P.Smith, Paper N°38 presented at 3rd Nat'l, Conf. Electron Probe Analysis, Chicago, 1968
- [31] H.K.Kuiken, C.Van.Opdorp, *J.Appl.Phys.*57,2077, 1985
- [32] A.Jakubontcz, *J.Appl.Phys.*58, 1483, 1985
- [33] N.Tabet, R.J.Tarento, *Philosophical Magazine, B*, Vol59,N°2, 1989
- [34] R.J.Tarento, D.E.Mekki, *Phys.Stat.Sol(a)*123,233, 1991
- [35] C.Yang et al.*Nucl.Instr.and.Meth.in Phys.Res.*B158, 1999
- [36] W.Hergert, S.Hildebrandt, *Phys.Stat.Sol (a)* 103, 1987
- [37] W.Hergert, S.Hildebrandt, *Phys.Stat.Sol (a)* 109, 1988
- [38] C.J.Wu, D.B.Wittry, *J.Appl.Phys.*49(5),1978
- [39] Jasprit Singh, *Semiconductor Devices: Basic Principles*, John-Wiley, 2001
- [40] Zhi-Zhong Xu., *J. Phys.: Condens. Matter.* 7, 1995
- [41] A.Rnoul, thèse de doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble 1, 1998
- [42] S.M.Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd Edition, John-Wiley& Sons, 1981
- [43] D.P.Landau and K.Binder, "A guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics", Cambridge University Press, 2000
- [44] M.Boumahrat, A.Gourdin, *Méthodes Numériques Appliquées*, Office des Publications Universitaires, 1993
- [45] A.Zaoui, introduction à la simulation, école d'été Boumerdesse, 2002
- [46]] A.F.Bielajew, *Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*, The University of Michigan, September 17, 2001
- [47] K. Binder , *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer-Verlag, 1986
- [48] K.Nordlund, *Basics of Monte Carlo simulations*, University of Helsinki, 2005
- [49] S. Mertens and H. Bauke, *PHYSICAL REVIEW E* 69, 055702(R), 2004
- [50] B.Chalmond, *LA RECHERCHE* 354, juin, 2002
- [51] P. D. Coddington, *cond.mat* v2, 1993
- [52] F. James, *Comp. Phys. Comm.* 60, 329, 1990

- [53] P. L'Ecuyer, Comm. ACM 33-10, 85, 1990
- [54] G.Yang, A Monte Carlo Method of Integration, IB Diploma Programme Extended Essay in Mathematics, Nørre Gymnasium, Denmark, December, 2002
- [55] D.E.Knuth , The Art of Computer Programming Vol. 2: Semi numerical Methods (Addison-Wesley, Reading, Mass), 1981
- [56] G.A.Marsaglia, in Computational Science and Statistics: The Interface, ed .L. Balliard (Elsevier, Amsterdam), 1985
- [57] M.Chelle, Thèse de Doctorat, Université de Rennes I, 1997
- [58] D.F.Kyser, K.Murata, Electron Microprobe Film Analysis, IBM J. RES.DEVELOP, july, 1974
- [59] T.Itina, W.Marine and M.Autric, Appl. Surf. Sci. 127-171,1998
- [60] B.Pinçon, Une introduction à Scilab, Institut Elie Cartan Nancy, Université Henri Poincaré, 2003
- [61] Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for Scientists and Engineers, 2003
- [62] Murata.k, Mastukawa.T, Shimizu.R, Jap.J.Appl.Phys 10 P678, 1971
- [63] J.J.Hren, J.L.Goldstein and D.C.Joy, Introduction To Analytical Electron Microscopy, Plenum Press, New York, 1979
- [64] M.J.Berger and S.M.Seltzer, National Academy of Science National Research Council, Publ.1133 P205 Washington, 1964
- [65] A.Nouiri, A.Djemel, M.Hadef and R.J.Tarento, Synthèse n°10, 2001
- [66] S.E.Laux, M.V.Fischetti, D.J.Frank, Monte Carlo analysis of semiconductor devices, IBM.RES.DEVELOP.vol 34 N4 July, 1990
- [67] S.Achour, A.Harabi, N.Tabet, Materials Science and Engineering B42 289-292, 1996
- [68] A.Djemel, A.Nouiri, S.Kouissa, R.J.Tarento, Phys.Stat.Sol.(a)191, 223-229, 2002
- [69] A.Djemel, R.J.Tarento, Y.Marfaing, A.Nouiri, Phys.Stat.Sol.(a)168, 425, 1998
- [70] S.Achour, Thèse d'état, Université De Constantine, 1989
- [71] A.Nouiri, A.Djemel, and R-J.Tarento, Phys. Chem. News 13, 107-109, 2003

MONTE CARLO CALCULATION OF ELECTRON-MATTER INTERACTION. STUDY OF GaAs MATERIAL.

A. NOUIRI* , M-F. BENCHARIF*

* Dep. of Physics, University of Constantine Algeria
e-mail: benmedfa@yahoo.fr

Keys words: Monte-Carlo, Simulation, GaAs, cathodoluminescence

ABSTRACT

The characterization of semiconductors by a scanning electron microscopy (SEM) using technique like cathodoluminescence (CL) is great interest. GaAs is a very important material and it is also required in electronic industry and nanotechnology.

With the progress of computer capacity and processor speed, Monte Carlo (MC) simulation becomes an important method in studying typical effects in semiconductor devices[1]. The study of GaAs by Cathodoluminescence (CL) needs a good MC simulation of electron-matter interaction, in particular, the electron energy loss inside the semiconductor. In this paper, a MC model is proposed to simulate the electron trajectory in semiconductor. In our calculation we are interesting by the electron-hole pairs generated during the collision of incident electron by the atoms of material (random walk). After each collision the electron losses an energy E_{e-h} to generate one pair electron-hole. To simplify the calculation, two dimensions, X and Z are considered. The maximum of Z is considered as the electron range R_e .

Our results is compared with other analytical analysis. Concerning the electron depth, there is a good agreement with other models, in particular at low beam energy (fig.1). The electrons trajectory has been calculated (fig.2).

References

[1] Lando D. P. and Binder K., "A guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics", Cambridge University Press. 2000.

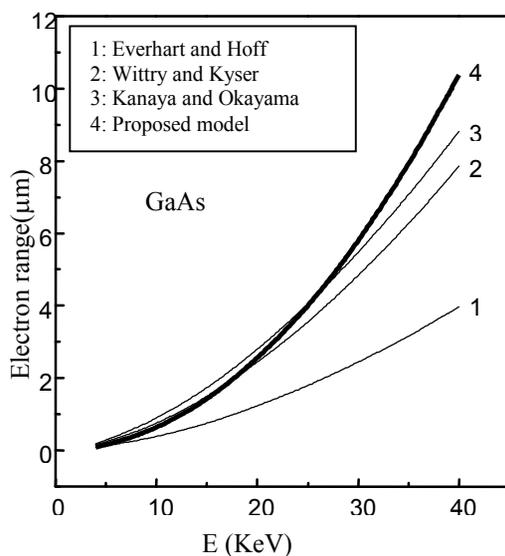


Fig.1: electron depth as a function of accelerating energy

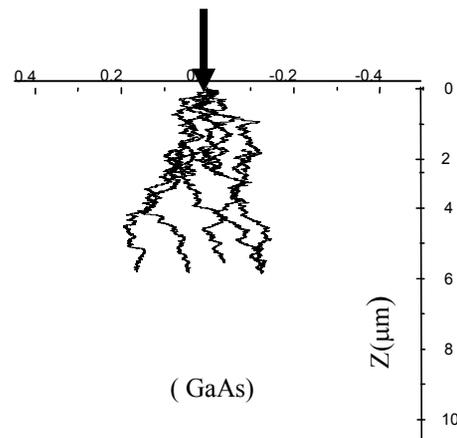


Fig.2: The electrons trajectory

ملخص

في هذه الأطروحة قمنا بدراسة التفاعل إلكترون-مادة ، و إنجاز نموذج حسابي باستعمال تقنية المحاكاة مونتني كارلو.

الدراسات النظرية و التجريبية لحركة الإلكترونات داخل المادة عديدة، و ذلك بسبب الأهمية البالغة التي تقدمها في المجهرية الإلكترونية و في مجالات أخرى مثل الإشعاعية.

من أجل وصف التصادم الحادث بين الإلكترونات الواردة و المادة، يتم نمذجة (محاكاة) التصادمات المرنة اعتمادا على المقطع الفعال للإنعراج ل Rutherford . بينما وصف التصادمات الغير مرنة تركز على العبارة النظرية ل Bethe .

طريقة الحساب المستعملة في هذه النمذجة تاخذ بعين الإعتبار السير العشوائي للإلكترونات و كذلك تأثير تأثير عوامل الحزمة الإلكترونية (عدد الإلكترونات (N_e) ، و طاقة التسريع (E_0)) و كذلك العوامل الفيزيائية الخاصة بالمادة (طول الإنتشار L_n ، و معامل الإمتصاص (α)).

مقارنة النتائج المتحصل عليها مع النتائج التجريبية الموجودة في المراجع و أخرى نظرية أظهرت توافق جيد، هذه المقارنة سمحت لنا باستنتاج قيم للمعاملات الفيزيائية هذا من جهة، و من جهة أخرى بربط هذه الأخيرة بأخرى مستعملة في نماذج أخرى .

كل هذا سمح لنا بالخروج بالنتيجة التالية و هي، رغم سهولة النموذج المستعمل فإن هذا الأخير صالح لوصف كامل لظاهرة التفاعل إلكترون-مادة.

كلمات مفاتيح : تفاعل، تألق مهبطي، محاكاة مونتني كارلو، طول الإنتشار، معامل الإمتصاص، GaAs نوع P .

ABSTRACT

In the present work, we study electron-matter interaction, and we have elaborated a numerical model based on Monte Carlo method.

Both theoretical and experimental study of electron transport do exist, because of the importance of these in the electron microscopy and in other areas as the radiology.

The description of the elastic scattering is based on the modified screened Rutherford differential cross section. So in the inelastic case, we have used Beth function expression.

The procedure used for such calculation has taken a count the random walk of the electron and the influence of the electron beam parameters (number of electrons N_{ele} , accelerating energy E_0), in addition to the influence of the physical parameters of material (diffusion length L_n , absorption coefficient α).

Our theoretical results are compared with the available experimental data and other theoretical results. This comparison between the theoretical calculation and experimental results, leads to can be deduce values for different physical parameters, and to make a correspondence between physical parameters introduced in different model, and the great coherent between these models.

The obtained results are in good agreement with the available experimental data and our model may be used for description of the electron-matter interaction.

Keywords: Interaction, Cathodoluminescence, Simulation Monte Carlo, Diffusion length, Absorption coefficient, GaAs type P.

RESUME

Dans ce présent travail, nous avons étudié l'interaction électron-matière, et nous avons élaboré un modèle numérique basé sur la méthode Monte Carlo.

Les études théoriques et expérimentales du transport des électrons sont nombreuses, à cause de leur importance dans la microscopie électronique et dans d'autres domaines tels que la radiologie.

A fin de décrire les collisions des électrons avec la matière, la modélisation de la diffusion élastique étant basée sur la section efficace ecrantée modifiée de Rutherford. Alors que la description des chocs inélastique étant basée sur l'utilisation de l'expression semi empirique de Bethe.

La procédure de calcul utilisé dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons et l'influence des paramètres du faisceau électronique (nombre des électrons N_{ele} , l'énergie d'accélération E_0), ainsi que l'influence des paramètres physique du matériau (longueur de diffusion L_n , coefficient d'absorption α).

Nos résultats sont comparés à ceux de l'expérience, disponible dans la littérature, ainsi que d'autres résultats théoriques et ils sont en bon accord. Cette comparaison a permis de déduire des valeurs pour les paramètres physiques d'une part, et de faire une correspondance entre des paramètres physiques introduits dans différents modèles d'autre part, et le rapprochement cohérent entre différents modèles. Ce qui nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle élaboré, ce dernier est fiable pour la description de l'interaction électron matière.

Mots clés : Interaction, Cathodoluminescence, Simulation Monte Carlo, Longueur de diffusion, Coefficient d'absorption, GaAs type P.