

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique**  
**Université colonel Hadj Lakhder – BATNA**



**Faculté des sciences**  
**Département de physique**

**Mémoire**

**Présenté pour obtenir le diplôme de**

**Magister**

**Option : Physique des matériaux métalliques et semi-conducteurs**

**Thème**

**Etude de l'interaction électron-matière  
par la méthode Monte Carlo  
-Application sur silicium-**

**Par :**

***ELATECHE ZAHIA***

**Devant le jury :**

<b>Président :</b>	M. ZEREG	M.C. Univ. Hadj Lakhder- Batna
<b>Rapporteur :</b>	A.Nouiri	M.C. Univ. Mentouri – Constantine
<b>Examineurs :</b>	M.S.Aida.	Pr. Univ. Mentouri – Constantine
	A. Benhaya	M.C. Univ. Hadj Lakhder- Batna

## **Dédicace :**

- ❖ A mon oncle pour l'encouragement et le soutien moral et matériel
- ❖ A ma chère mère.
- ❖ A mon cher père
- ❖ A mes frères et mes sœurs
- ❖ A mes neveux et mes nièces, et surtout, la petite Manel
- ❖ A tous ceux qui me sont chers et proches
- ❖ Et enfin, à tous ceux qui m'ont aidé à réaliser ce travail.

Je dédis ce travail...

Mille mercis

*Zahia*

## **Remerciements :**

Ce travail doit beaucoup :

- A son initiateur et propulseur Monsieur **A. Nouri maître de conférence à l'université de Constantine**, à qui je rends un vibrant hommage pour ses conseils toujours sûrs et son soutien constant qui m'ont été bénéfiques à plus d'un titre. Comme je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude pour m'avoir fait profiter de son expérience et d'avoir accepté de participer au jury de ma thèse en tant que rapporteur.
- A Monsieur **M. Zereg maître de conférence à l'université de Batna**, qui, après m'avoir initié à la mécanique quantique au cours des années que j'ai passées au département de physique - université du colonel Hadj Lakhdar - , me fait l'honneur de présider ce travail.
- A Monsieur **M.S Aida professeur à l'université de Constantine**, qui avec toute sa compétence, a examiné ce travail et malgré ses responsabilités très prenantes, a bien accepté d'être parmi les membres du jury.
- A Monsieur **A. Benhaya maître de conférence à l'université de Batna**, qui avait beaucoup contribué à l'épanouissement de cette étude en m'ayant enseigné les bases physiques

dans le domaine de l'interaction rayonnement-matière en poste graduation, dont l'intérêt m'a été très précieux, et maintenant il m'accorde un grand honneur en acceptant d'être membre de jury.

- A mon activateur Monsieur **N. Boukheit chef du département de physique à l'université de Constantine**, qui, grâce à ses conseils pertinents, sa contribution permanente et judicieuse et son acharnement que ce travail a pu être achevé.
- A la collaboration efficace de Monsieur **H. Bounecer maître assistant à l'université de Constantine**.
- A l'affectation et sans défaillance de ma famille qui réduit un parcours de mille milles en un pas.

Je voudrais remercier ici chacun, chacune, sincèrement.

**Z. Elateche**



# Sommaire :

<u>Titre</u>	<u>Pages</u>
<b>Introduction générale</b> .....	<b>02</b>
<b><u>Chapitre I : Notions et principes fondamentaux</u></b>	
I.1.Introduction.....	<b>05</b>
I.2.La technique E.B.I.C.....	<b>06</b>
I.2.1.Introduction.....	<b>06</b>
I.2.2.Historique.....	<b>07</b>
I.2.3. Principe et montages expérimentaux.....	<b>07</b>
I.2.3.1. Le M.E.B.....	<b>08</b>
I.2.3.1.1. Principe.....	<b>08</b>
I.2.3.1.2. Fonctionnement.....	<b>09</b>
I.2.3.2. Description de la technique E.B.I.C.....	<b>11</b>
I.2.3.3. Différentes géométries de la technique E.B.I.C.....	<b>14</b>
I.2.3.3.1. Excitation parallèle.....	<b>16</b>
I.2.3.3.2. Excitation en biseau.....	<b>16</b>
I.2.3.3.3. Excitation perpendiculaire.....	<b>17</b>
I.2.4. Applications de la technique EBIC.....	<b>17</b>
I.2.4.1. Application qualitative.....	<b>17</b>
I.2.4.2. Application quantitative.....	<b>19</b>
I.2.4.2.1. Introduction.....	<b>19</b>
I.2.4.2.2. Détermination de la longueur de diffusion.....	<b>19</b>
I.2.5. Conclusion.....	<b>21</b>
I.3. L'interaction électron-matière (SC).....	<b>22</b>
I.3.1. Introduction.....	<b>22</b>
I.3.2. Historique.....	<b>22</b>
I.3.3. Mécanismes physiques de l'interaction électron-matière.....	<b>23</b>
I.3.3.1. Les diffusions élastiques.....	<b>23</b>
I.3.3.2. Les diffusions inélastiques.....	<b>24</b>
I.3.4. Dissipation de l'énergie des électrons dans le matériau.....	<b>25</b>

I.3.4.1. Collision électron-noyau .....	25
I.3.4.2. Collision électron-électron .....	28
I.3.4.3. Fonction de dissipation d'énergie $\Phi(u)$ .....	29
I.3.4.3.1.Fonction $\Phi(u)$ d'Everhart –Hoff .....	30
I.3.4.3.2.Fonction $\Phi(u)$ de Wittry-Kyser.....	31
I.3.5. Parcours électronique.....	31
I.3.6. Volume de génération.....	33
I.3.7. Phénomène de génération de porteurs dans les SC.....	34
I.3.7.1. Energie de formation d'une paire électron-trou .....	35
I.3.7.2. Taux de génération total .....	39
I.3.7.3. Fonction de génération.....	39
I.3.8. Phénomène de recombinaison.....	41
I.3.8.1. Les processus de recombinaison .....	42
I.3.8.1.1. La recombinaison radiative.....	42
I.3.8.1.2. La recombinaison non- radiative.....	43
I.3.8.1.3. La recombinaison excitonique.....	44
I.3.9. Collecte de porteurs .....	44
I.3.9.1. Observation en régime permanent .....	44
I.3.9.2. Détermination du niveau d'injection.....	45
I.4. Le silicium (Si) : sa physique, et sa technologie.....	47
I.4.1. Introduction.....	47
I.4.2. La physique du silicium.....	48
I.4.2.1. Les propriétés du silicium.....	48
I.4.2.1.1. Propriétés structurales.....	48
I.4.2.1.2. Propriétés électroniques.....	50
I.4.2.1.3. Propriétés optiques .....	58
I.4.2.2. Contact métal/semiconducteur (M/S) .....	59
I.4.3. La technologie du silicium.....	64
I.4.3.1. Importance technologique du silicium.....	64
I.4.3.2. Préparation du silicium de qualité semiconducteur.....	65
I.4.3.3. Application de l'EBIC sur des échantillons de Si.....	66
I.5. La méthode Monté Carlo.....	67

I.5.1. Introduction.....	67
I.5.2. Historique .....	67
I.5.3. Efficacité de la méthode Monte Carlo .....	68
I.5.4. Nombres aléatoires .....	69
I.5.4.1. Nombres aléatoires et pseudo-aléatoires .....	69
I.5.4.2. Génération de nombres aléatoires.....	69
I.5.4.2.1. Méthodes indirectes .....	70
a- méthode de congruence.....	70
b- méthodes de congruence mélangées .....	71
c- Algorithmes de registre à décalage .....	71
d- Générateurs traînés de Fibonacci .....	72
e- Génération gaussienne .....	73
I.5.4.2.2. Les différents essais pour la qualité de ces générateurs.....	73
I.5.4.2.3. Méthodes directes .....	75
a. Distribution non rectangulaire.....	75
b. Méthode du rejet de Von Neumann .....	76
I.5.5. Application de la méthode Monte Carlo .....	76
I.5.5.1. Simulation de trajectoires avec collisions .....	76
I.5.5.2. Calculs d'intégrales .....	78
I.5.5.3. La marche aléatoire (Random Walks) .....	79
I.5.6. Autres méthodes de simulation (dynamique moléculaire) .....	80
I.5.6.1. Les méthodes d'intégration.....	81
I.5.6.2. D'autres ensembles.....	81
I.5.6.3. Méthodes hybrides .....	82
I.5.6.4. Dynamique moléculaire Ab initio .....	83
I.5.6.5. Dynamique de rotation Quasi- Classique.....	83
I.6. Conclusion.....	84

## Chapitre II : Modélisation

II.1. Introduction.....	86
II.2. Générateur de nombres aléatoires .....	87
II.2.1. La fonction ran .....	87
II.2.1.1. La définition de la fonction Ran .....	87

II.2.1.2. La syntaxe de la fonction Ran.....	88
II.2.2. Test pour la fonction Ran .....	88
II.2.2.1. Le premier test – test de stationnement -.....	89
II.2.2.2. Le deuxième test – calcul de $\pi$ -.....	91
II.3. Détails du modèle.....	93
II.3.1. les bases physiques.....	93
II.3.2. les étapes de calcul.....	95
II.3.2.1. Trajectoire des électrons.....	96
II.3.2.2. profondeur de pénétration.....	97
II.3.2.3. Profil de distribution .....	97
II.3.2.4. Signal EBIC .....	98
II.4. Organigramme.....	101
II.5. Conclusion.....	102

### Chapitre III : Résultats et discussion

III.1. Introduction.....	104
III.2. La profondeur de pénétration .....	105
III.3. Les trajectoires des électrons.....	107
III.4. La concentration des paires (é -h) créés .....	109
III.5. Le courant collecté I <sub>cc</sub> .....	110
III.6. Conclusion.....	114
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>116</b>
<b>Références .....</b>	<b>118</b>
<b>Annexes</b>	

# Introduction générale

## Introduction générale :

Les techniques d'injection de porteurs électroniques par une source d'excitation extérieur (électrons, photons...) constituent un outil précieux pour l'étude des propriétés électriques des défauts dans les matériaux semiconducteurs [3].

La technique **E**lectron **B**eam **I**nduced **C**urrent (qui est basée sur la création des paires électron-trou, leur diffusion à l'intérieur du matériau ainsi que leur collecte sous forme de courant) permet l'étude de la recombinaison de ces paires au niveau des défauts étendus, tels que les précipités, les dislocations et les joints de grains. L'activité électrique de tels défauts peut être imagée (image EBIC) [3].

L'analyse quantitative du signal EBIC permet d'obtenir un certain nombre de paramètres physiques caractérisant la recombinaison des porteurs tels que la longueur de diffusion.

A cet effet, un effort important a été consacré ces dernières années à la modélisation du signal EBIC.

La génération des paires  $e$ - $h$  provient de la dissipation de l'énergie des électrons incidents. Pour décrire cette dissipation de l'énergie du faisceau d'électrons dans la matière, plusieurs modèles ont été proposés. Nous citons par exemple, la méthode de la gaussienne modifiée, la fonction de déplacement exponentielle, et la méthode Monte Carlo [14]. Cette dernière est une méthode numérique qui a prouvé son efficacité grâce à ses résultats qui sont très proches des résultats expérimentales.

Bien que le germanium a fait l'objet des premières réalisations de dispositifs électroniques (transistors), le silicium a monopolisé l'essentiel des études orientées aux propriétés électriques, compte tenu des avantages technologiques qu'il présente liés principalement aux propriétés de l'oxyde  $\text{SiO}_2$  [3].

De plus, les méthodes numériques deviennent un outil important pour étudier les nanostructures.

Pour ces raisons (le dernier point en particulier), on a voulu consacrer notre travail à :

**« L'étude de l'interaction électron-matière par la technique EBIC et la méthode Monte Carlo- Application sur le Silicium- ».**

L'organisation de ce mémoire est la suivante :

**Le premier chapitre :** traite, un rappel théorique sur les notions fondamentales et les principes de la technique EBIC, la description de l'interaction électron-matière ainsi que le phénomène de recombinaison, une étude bibliographique des propriétés du matériau (Si) qui est sélectionné comme matériau d'application pour le modèle proposé et le concept théorique utilisé dans la méthode Monte Carlo et ses applications.

**Dans le 2<sup>ème</sup> chapitre :** on va présenter notre modèle proposé (qui est l'intérêt majeur de ce mémoire) en précisant les différentes bases physiques utilisées et l'organigramme du programme Fortran (un calcul numérique a été utilisé pour étudier quelques propriétés qui caractérisent l'interaction électron-matière en appliquant le modèle sur le silicium).

**Dans le 3<sup>ème</sup> chapitre :** les résultats des calculs concernant les trajectoires des électrons, la profondeur de pénétration  $R(E_0)$ , le profil de distribution et le courant collecté  $I_{EBIC}(E_0)$  sont présentés.

Une étude de l'influence de quelques paramètres (longueur de diffusion, énergie de création d'une paire (é -h)) sur les courbes  $I_{EBIC}(E_0)$  va être exploitée.

En fin, nous confrontons le modèle numérique à l'expérience en ajustant les courbes théoriques  $I_{EBIC}(E_0)$  aux points expérimentaux, et ainsi nous déduisons quelques paramètres physiques liés à l'échantillon analysé.

## I.1. Introduction :

La technique EBIC est une méthode fréquemment utilisée pour la détermination des caractéristiques électroniques de semiconducteurs, telles que la longueur de diffusion, la vitesse de recombinaison interfaciale, la durée de vie et la zone de désertion. Elle s'applique également à l'observation plus qualitative de défauts cristallins tels que dislocations et joints de grains [1].

Etant donné que les mesures quantitatives de l'EBIC restent un problème difficile, si bien que n'importe quelle approche concernant ces mesures doit être basée sur une bonne connaissance de l'interaction électron-matière [2].

Dans ce contexte, il faut noter que, la méthode Monte Carlo a été utilisée depuis longtemps pour la simulation des trajectoires de particules dans la matière et l'étude du phénomène de dissipation de leur énergie [1].

Le principe de la méthode Monte Carlo consiste à générer des nombres aléatoires, pour simuler sur ordinateur, l'interaction du faisceau d'électrons avec le milieu diffusant. C'est une technique statistique basée sur le recueil d'informations sur un grand nombre de particules. Pour obtenir des résultats représentatifs, il faut calculer la valeur moyenne d'un grand nombre de trajectoires [1].

## Chapitre I :

# Notions et principes fondamentaux

Dans ce chapitre, on présentera des notions et des principes fondamentaux sur : la technique E.B.I.C, l'interaction électron-matière, le matériau d'application (Si) et la méthode Monte Carlo.

## I.2. La technique E.B.I.C

### I.2.1. Introduction :

Plusieurs techniques conventionnelles utilisent la lumière pour la création de paires électron-trou dans les semiconducteurs. Dans les expériences de photo-réponse spectrale, les mesures du courant induit par une radiation monochromatique donnée sous des conditions données (photo-tension constante ou polarisation par une lumière blanche) conduisent à des résultats qui sont la combinaison complexe de propriétés optiques et électroniques du matériau [1]. Même dans une simple couche, l'estimation du nombre absolu des paires électron-trou photogénérées nécessite une bonne connaissance de la constante diélectrique du matériau et de l'efficacité quantique de la lumière utilisée [1]. Pour une couche semi - infinie, l'intensité de la lumière décroît exponentiellement et les mesures sont très influencées par la surface. Dans des structures plus complexes, la distribution des photons dans le volume devient très difficile à estimer en raison des interférences et des absorptions dans les différentes couches [1].

Un faisceau d'électrons peut être utilisé comme sonde, et l'EBIC (**E**lectron **B**eam **I**nduced **C**urrent) c'est-à-dire courant induit par faisceau d'électrons a été largement appliquée aux semiconducteurs cristallins pour déterminer leurs propriétés de transport ou pour analyser les caractéristiques des dispositifs [1]. Elle peut également être appliquée aux dispositifs à base de semiconducteurs amorphes où on peut envisager différentes applications telles que : détection de défauts dans les photopiles et mesure de densité d'états en utilisant un faisceau modulé [1].

La génération de paires par des électrons plutôt que par des photons présente aussi certains avantages. D'une part l'intensité du faisceau est mesurable de façon absolue ainsi que la fraction d'électrons rétrodiffusés. D'autre part les fonctions de génération des paires présentent un maximum qui s'éloigne de la surface du dispositif lorsque l'énergie croît. On s'attend alors à ce que ces deux propriétés fassent de la technique EBIC un bon moyen d'investigation qui pourra d'ailleurs être complémentaire de la photo-réponse spectrale [1].

### I.2.2. Historique :

C'est en 1958 qu'Everhart fait la première observation en microscopie électronique à balayage en mode de courant induit sur un dispositif à semiconducteurs. Le sigle anglais EBIC, est alors consacré [2]. Depuis, cette technique n'a cessé d'évoluer. On pourrait retracer son histoire en évoquant les travaux de Lander et al. (1963), Everhart (1964), ou Wittry et al. (1965), et plus récemment ceux de Bresse (1974,1977) sur l'analyse quantitative du signal, Texier (1980) pour ses travaux sur les joints de grains[2], Tabet et Tarento (1989) [3] , ainsi que les articles de revues de Kimerling et al (1977), Hanoka et Bell (1981) ou Leamy (1982) [2].

Aujourd'hui, la technique est largement utilisée pour la caractérisation de matériaux semiconducteurs : Mesure des paramètres caractérisant les propriétés de transport telles que longueur de diffusion et durée de vie, détermination des profondeurs de jonction, etc....parallèlement aux travaux sur le matériau massif, les études de défauts ont connu un fort développement.

Des cartographies de centres recombinants associés aux défauts sont réalisables par EBIC. De plus, les travaux théoriques sur le pouvoir de recombinaison des défauts, de Donolato et Marek, ont renforcés l'intérêt de la technique en permettant une approche quantitative des phénomènes [2].

### I.2.3. Principe et montages expérimentaux :

La dénomination EBIC est utilisée pour décrire le processus de collecte des porteurs minoritaires en excès créés par l'impact d'un faisceau électronique sur un semiconducteur. C'est un effet électrovoltaïque comparable à l'effet photovoltaïque [3].

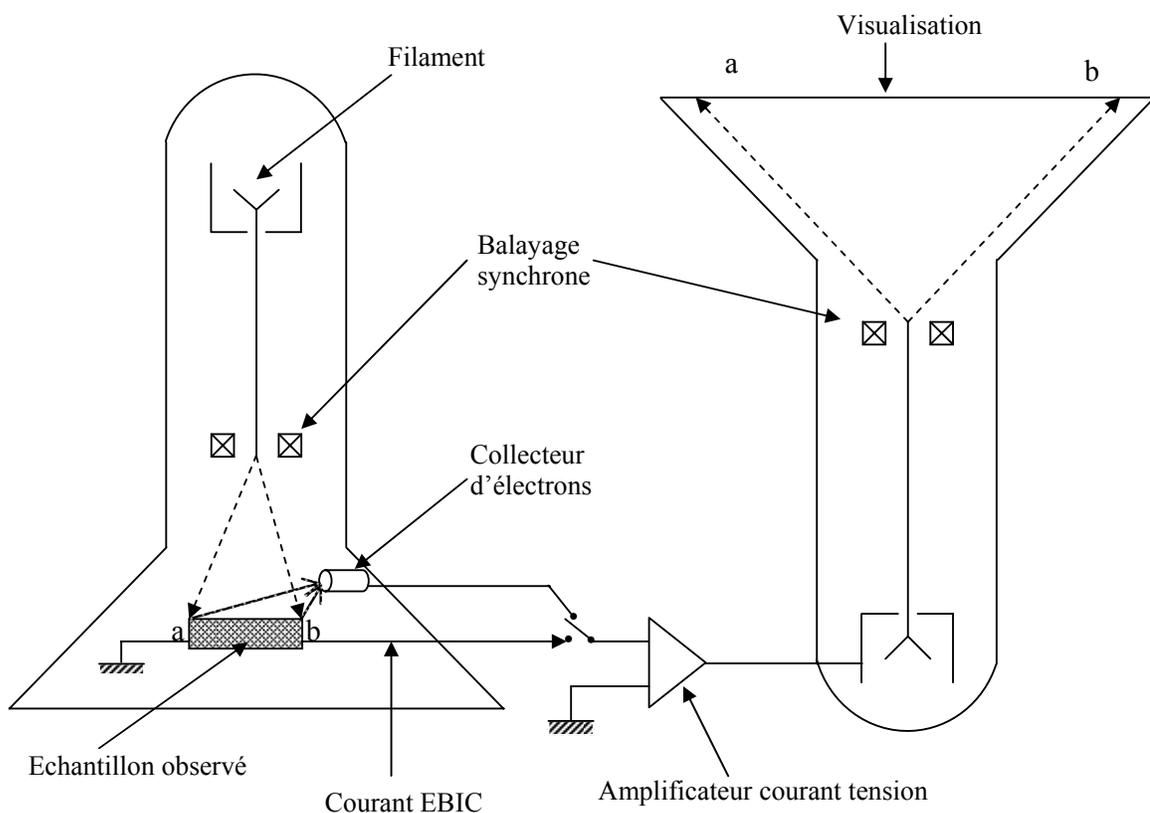
Afin de définir le mode de mesure du courant induit par faisceau d'électrons (EBIC), mode d'utilisation principal durant ce travail, et à cause de la forte liaison entre l'EBIC et le MEB (**M**icroscope **E**lectronique à **B**alayage) ,nous présentons dans le paragraphe suivant une description globale de ce dernier.

### I.2.3.1. Le M.E.B :

#### I.2.3.1.1. Principe :

La fonction principale de cet appareil (le MEB) est de fournir une image en relief d'un objet balayé par un faisceau électronique. Elle doit permettre un examen des propriétés structurales et texturales du matériau étudié [1].

La figure (I.1) représente un schéma simplifié du MEB.



**Fig I.1** schéma simplifié d'un microscope électronique à balayage  
(D'après S. Najjar 1992) [1]

On y distingue les deux tubes cathodiques :

- le premier représente la colonne du microscope
- le deuxième permet l'observation de l'image sur l'écran.

Dans le premier tube un faisceau électronique balaye la surface de l'objet examiné. Ce dernier répond alors par différents types de signaux : électrons secondaires, électrons

rétrodiffusés, photons X... Ces particules émises peuvent être collectées et utilisées pour reconstruire une image de l'objet, comme on le verra au paragraphe suivant. En haut de ce tube se trouve le canon qui génère le faisceau d'électrons. On y distingue la cathode qui est un filament en tungstène contrôlé thermiquement et porté à un potentiel fortement négatif.

Les électrons du filament ayant une énergie située autour du niveau de Fermi, par mécanisme d'émission thermoïonique, arrivent à vaincre le travail d'extraction du métal et sont alors injectés dans le vide. L'émission est concentrée sur une petite surface autour de la cathode grâce à une électrode faiblement polarisée négativement : la grille. Le champ électrique qui règne entre la cathode et l'anode (portée à la masse), accélère les électrons, l'énergie cinétique des électrons augmente pour atteindre la valeur  $eV$  où  $V$  est le potentiel de polarisation de la cathode. Après la traversée de l'anode cylindrique, le faisceau passe dans la colonne électro-optique [1].

Un système de trois lentilles électromagnétiques agit sur le faisceau d'une manière comparable au microscope optique. Leur fonctionnement est basé sur l'action des champs électromagnétiques sur les électrons, d'où l'avantage de contrôler leur effet par commande des courants qui génèrent ces champs. L'action successive de ces lentilles permet de réduire le diamètre du spot qui va balayer la surface de l'échantillon. Dans la majorité des MEB, les deux premières lentilles assurent pratiquement la totalité de la réduction de la taille du spot, alors que la troisième le focalise sur la surface de l'échantillon. Une taille de spot bien réduite permet d'augmenter la résolution et d'effectuer des observations nettes à des grossissements élevés [1].

La troisième partie du tube constitue le système de déflexion. La déflexion est nécessaire puisqu'elle permet le balayage du faisceau à la surface de l'échantillon. Le système de balayage commande, en synchronisme, le faisceau du tube de visualisation. Cette propriété est fondamentale pour la formation de l'image [1].

### **I.2.3.1.2. Fonctionnement :**

Lorsque le faisceau primaire balaye la surface de l'échantillon, les particules émises par celle-ci (photons, électrons secondaires et rétrodiffusés...) sont recueillies sur un collecteur. Lorsqu'on s'intéresse aux électrons, le collecteur est une photodiode dont la surface est portée à un potentiel positif élevé afin d'augmenter son rendement de collecte [1].

Selon leur énergie d'émission les électrons ne sont pas collectés de la même façon. On distingue ainsi entre les électrons rétrodiffusés, qui sont des électrons primaires n'ayant perdu qu'une fraction de leurs énergie initiale et donc capables de gagner la cible même quand elle est légèrement polarisée-, et les électrons secondaires générés sous l'interaction du faisceau incident avec les atomes du réseau. Ces électrons secondaires sont beaucoup moins énergétiques que les électrons rétrodiffusés. Pour les collecter, il faut appliquer une tension élevée qui les accélère vers le collecteur. Dans la photodiode, ces particules génèrent des paires électron-trou, qui sous l'effet d'un champ électrique, sont séparées et fournissent, dans le circuit de la photodiode, un courant électrique [1].

Ce courant, amplifié, est converti en tension venant moduler le potentiel de la grille du second tube. Ceci a pour conséquence de moduler l'énergie du faisceau lors de son impact sur l'écran fluorescent modifiant ainsi sa luminescence. Grâce au synchronisme entre les deux faisceaux et à la rapidité de l'électronique de conversion, une image point par point de l'échantillon est reproduite sur l'écran : c'est le fonctionnement en mode d'imagerie par électrons secondaires [1]. Donc si entre deux points d'un échantillon il existe une différence de propriété structurale ou texturale de telle sorte que ces deux points n'émettent pas de la même façon des électrons secondaires, on doit s'attendre à un contraste entre ces deux points sur l'image reconstruite [1]. Ce contraste peut être topologique : lié à la géométrie et la rugosité de la surface, ou chimique lié à une différence des numéros atomiques ou encore électrique lié à des fluctuations du potentiel de la surface [1].

Si l'échantillon observé est un semiconducteur, le faisceau électronique y génère des paires électron-trou. Lorsqu'un champ électrique règne dans la zone de génération, alors les paires se séparent et un phénomène de collection de charges a lieu une fois que le circuit extérieur est fermé. Le signal observé est un courant induit par faisceau d'électrons (EBIC) [1]. Ce signal peut également être amplifié et converti en tension de manière à commander la grille du tube de visualisation. C'est le mode d'imagerie EBIC. Dans ce mode l'échantillon joue lui-même le rôle de collecteur de charges [1].

Comme on a déjà cité, le phénomène de collection de charges, sur lequel est basé ce mode d'imagerie, a été pour la première fois mis en évidence par Everhart. Everhart remarqua que sous l'effet du bombardement par le faisceau d'électrons, le courant inverse d'une jonction p-n subissait de larges variations. Il conclut que ce phénomène est un cas

particulier de la variation de la conductivité électrique par l'intermédiaire de la création par une radiation ionisante, de porteurs de charges mobiles [1].

### I.2.3.2. Description de la technique E.B.I.C :

La collision des électrons du faisceau avec les atomes du semiconducteur excite les électrons de la bande de valence vers la bande de conduction en créant des trous.

Donc, lorsqu'un électron accéléré sous plusieurs kiloélectronvolts pénètre dans un semiconducteur, il perd une partie de son énergie en créant des paires ( $e^- - h^+$ ).

Le mécanisme de cette génération de porteurs est schématisé sur la figure (I.2) [2].

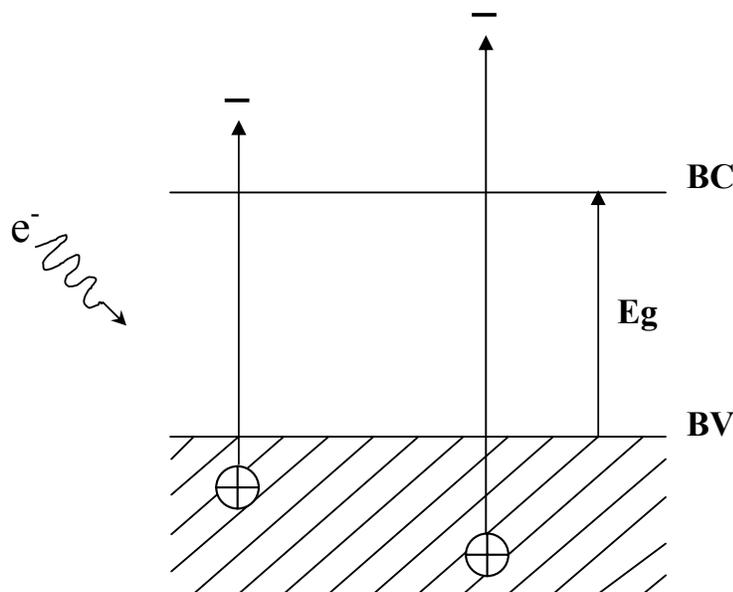


Fig I.2

Cette création de paires ( $e^- - h^+$ ) aura lieu dans un volume appelé volume de génération, qui est assimilé à une poire dans le silicium.

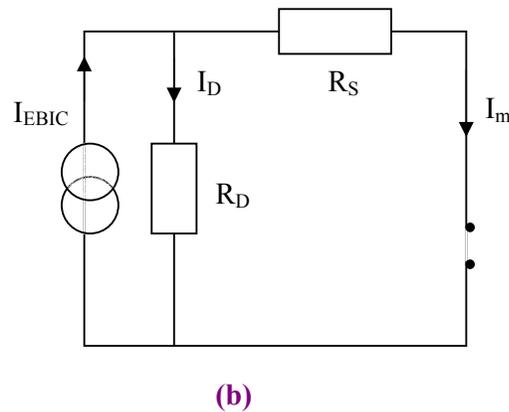
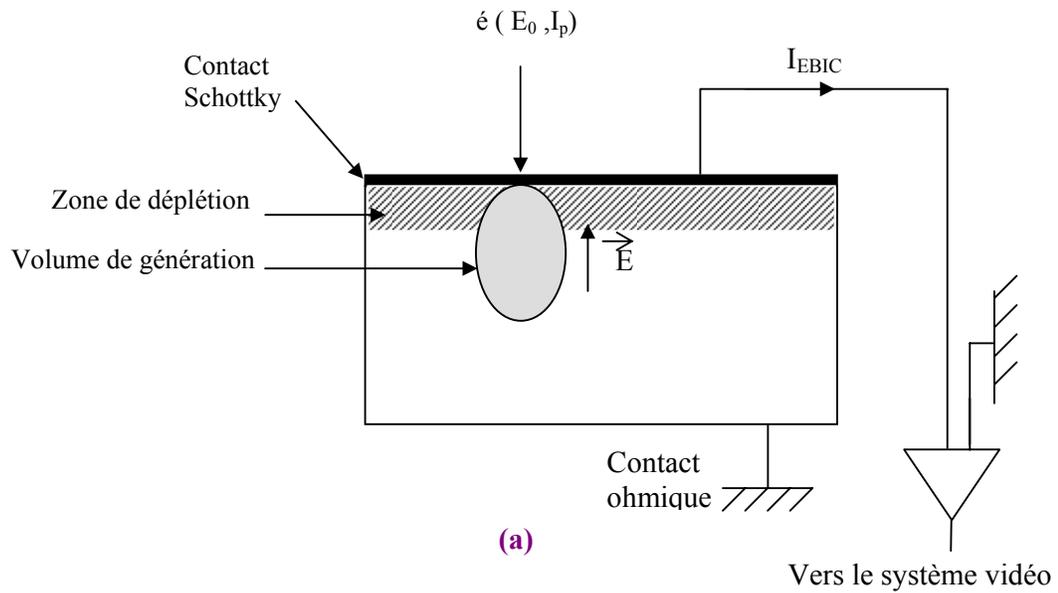
En l'absence de champs électrique, les porteurs en excès sont animés d'un mouvement de diffusion sous l'effet d'un gradient de leur concentration pendant lequel ils parcourront une distance appelée la longueur de diffusion  $L$  pendant un temps appelé durée de vie  $\tau$ , avant de se recombiner. Autrement dit, ils finissent par se thermaliser rapidement ( $10^{-11}$ s) en bord de bande pour devenir indiscernables par rapport aux porteurs préexistants à l'équilibre dans le matériau [3].

Par contre, en présence d'un champ électrique les paires sont séparées ; alors électron et trou dérivent en sens opposés. Un courant prend alors naissance dans le circuit extérieur. Le champ électrique peut être interne, c'est-à-dire lié à la structure elle-même ou externe, créée par une polarisation extérieure, ou encore par une combinaison des deux [1].

Le cas d'un pur champ externe correspond à celui de deux contacts ohmiques sur un semiconducteur. Dans ce cas la mesure porte sur le changement de la conductivité induit par l'injection des porteurs [1]. Deux cas typiques de champ électrique purement interne peuvent être cités : la jonction p-n et la diode Schottky en court-circuit [1]. A l'équilibre, en l'absence d'excitation extérieure, dans la jonction p-n la diffusion des porteurs majoritaires de part et d'autre du contact conduit à la formation de charges d'espace fixes. Ces charges engendrent à leur tour un champ électrique qui s'oppose à l'effet de la diffusion de telle sorte qu'à l'équilibre aucun courant ne traverse la jonction [1]. La zone de charge d'espace, s'étend sur une largeur qui dépend du taux de dopage, de la qualité du matériau, et dans le cas de polarisation inverse de la valeur de cette tension. Dans la diode Schottky (figure I.3.a), elle se limite au côté semiconducteur [1]. Lorsque le faisceau d'électrons arrive à la surface de l'échantillon, suivant son énergie, il peut pénétrer plus ou moins en volume. Le volume de génération peut couvrir partiellement ou totalement la zone de charge d'espace. Les porteurs créés dans cette zone se séparent et seront presque en totalité collectés (contribuent au courant EBIC) [1]. Même résultat est remarqué pour les porteurs qui atteignent grâce à leur mouvement de diffusion les limites de cette zone (Fig. I.4 –dans le cas d'une diode Schottky-). Les autres paires sont situées dans des zones neutres ou à faible champ [1].

Les densités d'électrons  $n$  et de trou  $p$  excédentaires sont égales. Les conditions d'observation sont telles que la concentration  $p$  engendrée par le faisceau est négligeable devant la concentration en dopants  $N_d$ , c'est-à-dire pour un matériau de type N :

$n = p \ll N_d$ . Cette condition est dite de faible injection [2]. Ainsi, la concentration en porteurs majoritaires n'est pas modifiée. Par contre, la concentration en porteurs minoritaires augmente de façon importante. L'excédent de porteurs minoritaires va alors se propager dans le matériau par diffusion [2].

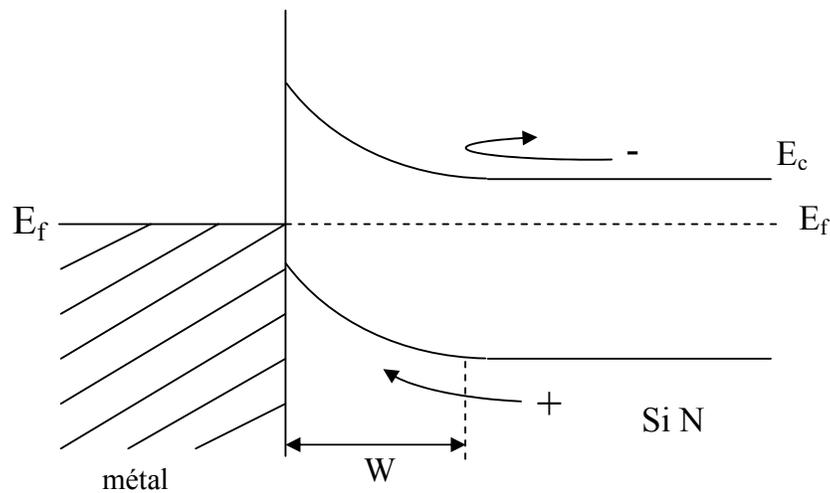


**Figure I.3**  
(D'après Y. Beggah 1992) [3]

**(Fig.I.3.a)** : Schéma illustrant la génération et la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semiconducteur de type N .La direction du champ électrique  $\vec{E}$  vers le haut (courant EBIC est celui des trous et perpendiculaire au faisceau électronique de courant  $I_p$  et de tension d'accélération  $E_0$ ).

**(Fig.I.3.b)** : Schéma du circuit équivalent de la mesure EBIC . $R_S$  est la résistance série comprenant celle de l'échantillon, des contacts ohmiques et la résistance du circuit de mesure.  $R_D$  est la résistance de la jonction de collecte du courant EBIC.  $I_m$  et  $I_{EBIC}$  sont respectivement les signaux du courant EBIC mesuré et idéale.

Dans une investigation par la technique EBIC, l'échantillon est loin de se comporter d'une façon idéale – ce qui peut affecter les mesures de contraste par exemple-. Pour un échantillon non idéal et en présence de résistance série finie  $R_S$ , ce dernier est assimilé à une source de courant en parallèle avec la diode formé par la jonction de collection du courant EBIC de résistance  $R_D$ . La résistance  $R_S$  est en série avec cette source de courant ; elle est due à la résistance de l'échantillon lui-même, aux contacts ohmiques et aux résistances du circuit extérieur utilisé pour mesurer le courant EBIC (Fig.I.3.b). Le courant généré dans l'échantillon se partage entre  $R_D$  et  $R_S$ . Le courant mesurer  $I_m$  sera égale au courant générer  $I_{EBIC}$  quand la résistance  $R_S$  est faible [3].



$W$  : largeur de la zone de charge d'espace

Figure I.4 [2]

### I.2.3.3. Différentes géométries de la technique E.B.I.C :

Pour la technique EBIC, on peut utiliser deux types extrêmes d'excitations par faisceau électronique : Une excitation parallèle où les électrons arrivent parallèlement à la jonction, et une configuration perpendiculaire où ils la traversent perpendiculairement. Entre ces deux types extrêmes d'excitation, il existe une troisième géométrie d'utilisation du mode EBIC : elle consiste à pratiquer une coupe en biseau sur l'échantillon suivant un angle donné de façon à varier la distance entre le point d'impact et la zone de désertion [1].

Les principaux dispositifs rencontrés en technique EBIC sont illustrés par la figure (I.5).

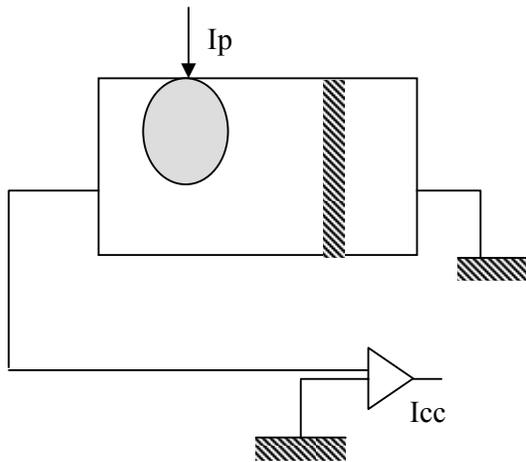


Fig.1.5.a. Jonction p-n parallèle au faisceau incident  $I_p$  [3]

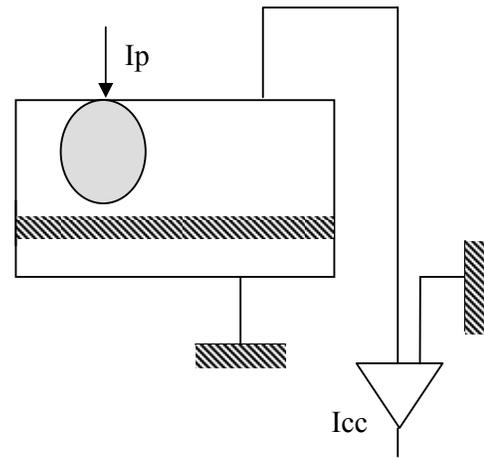


Fig.1.5.b. Jonction p-n perpendiculaire au faisceau incident  $I_p$  [3]

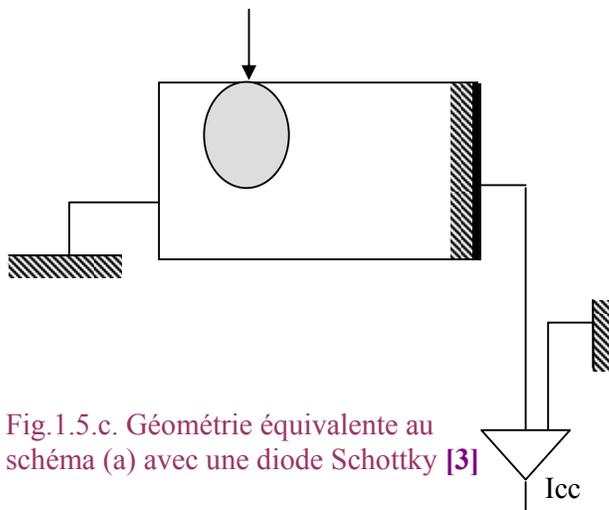


Fig.1.5.c. Géométrie équivalente au schéma (a) avec une diode Schottky [3]

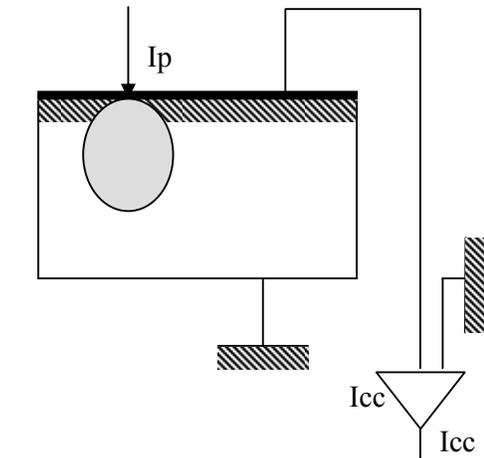


Fig.1.5.d. Géométrie équivalente au schéma (b) avec une diode Schottky [3]

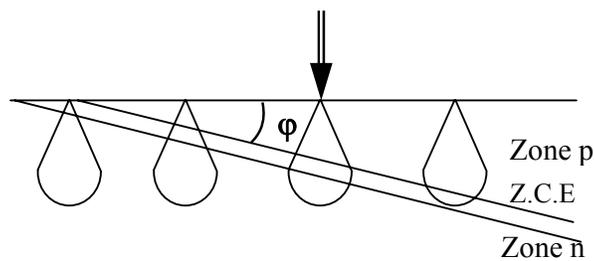


Fig.1.5.e. Mode EBIC avec coupe en biseau sur une jonction p-n [1]

Fig.I.5. Schéma illustrant les différentes géométries utilisées dans la technique E.B.I.C

### **I.2.3.3.1. Excitation parallèle :**

Les figures (I.5.a) et (I.5.c) illustrent le cas de jonction p-n et Schottky respectivement, qui sont perpendiculaires à la surface de l'échantillon. Dans ce cas, le faisceau arrive parallèlement à la surface de la jonction et le balayage s'effectue sur la tranche [1]. Le courant EBIC instantané dépend de l'environnement immédiat du point d'impact. Il contient une information sur la façon dont les porteurs générés en ce point sont transportés à travers le dispositif. En effet, une partie des porteurs générés dans les zones neutres peut par diffusion arriver jusqu'à la zone de désertion où ils se séparent sous l'effet du champ électrique qui y règne. Ils participent ainsi au courant induit. Quant aux porteurs créés dans la zone de charge d'espace, ils sont automatiquement séparés et collectés sans perte [1]. Dans cette configuration, il est donc possible de faire une mesure directe de la largeur de la zone de désertion [4] et de sa position ainsi que d'estimer les courbures de bandes dans des jonctions ou des hétérojonctions [5]. De même, elle a été également utilisée pour faire des mesures de la longueur de diffusion des porteurs [6]. Malheureusement dans le cas des dispositifs amorphes, les couches sont très minces et ce mode d'utilisation de l'EBIC s'avère difficile [1].

### **I.2.3.3.2. Excitation en biseau :**

Des informations supplémentaires peuvent être obtenues en pratiquant une coupe en biseau de l'échantillon (Figure.I.5.e). La largeur de la zone de charge d'espace et sa position en profondeur peuvent encore être mesurées après une correction tenant compte de l'angle d'inclinaison [7]. De même, cette technique a été proposée pour la détermination de la longueur de diffusion dans le cas de forte recombinaison en surface [8].

Notons enfin que cette configuration peut également être utilisée pour la détermination du profil de génération. En effet, Werner et al ont étudié le problème de perte d'énergie des électrons de quelques KeV dans du silicium cristallin [9] en utilisant ce mode qu'ils ont préalablement appliqué au GaAsP, leur a permis de déterminer la dose latérale [10] et en profondeur [11]. Le balayage du spot dans la direction horizontale modifie la distance entre le point d'impact du faisceau incident et la zone de charge d'espace où les électrons sont immédiatement collectés. Une fonction universelle a également été déduite de cette étude et exprimée sous forme d'une Gaussienne modifiée [1]. La difficulté de cette méthode vient de la difficulté de préparation de l'échantillon, plus particulièrement lorsque celui-ci est très mince, comme dans le cas des dispositifs en a-Si :H [1].

### **I.2.3.3. Excitation perpendiculaire :**

Les figures (I.5.b) et (I.5.d) illustrent le cas de jonction p-n et Schottky respectivement qui sont parallèles à la surface de l'échantillon. Dans cette configuration, le faisceau arrive perpendiculairement à la surface du dispositif et aux plans des différentes jonctions. Pour des matériaux latéralement homogènes, le courant EBIC instantané ne révèle aucun contraste avec le balayage. Cependant, en faisant varier l'énergie du faisceau incident, le parcours des électrons augmente et le volume de génération dans le dispositif s'élargit. L'évolution du courant en fonction de l'énergie renseigne ainsi sur la génération et l'évacuation des charges à travers le dispositif [1].

### **I.2.4. Applications de la technique EBIC :**

#### **I.2.4.1. Application qualitative (Images EBIC de contrastes de défauts actifs) :**

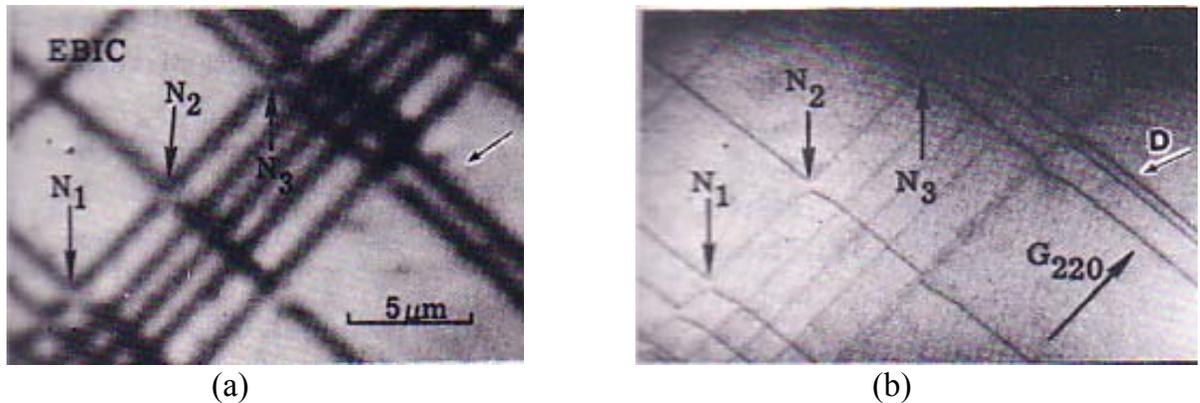
L'imagerie était la première application de la technique EBIC associée à la microscopie électronique à balayage (Fig.I.6). Elle renseigne sur l'activité électrique des défauts localisés (agrégats, dislocations et joints de grains) et les hétérogénéités dans les semiconducteurs [3].

L'intensité du courant EBIC augmente avec la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, et la présence d'un défaut localisé dans le volume de génération entraîne une diminution locale du nombre des porteurs minoritaires collectés donc du courant EBIC, et par suite l'image de ces défauts électriquement actifs apparaît noire sur un fond clair [3]. On peut réaliser des " images EBIC " en modulant l'intensité du faisceau cathodique par la tension de sortie de l'amplificateur en effectuant un balayage synchrone de la surface de l'échantillon et de l'écran du microscope électronique à balayage (MEB) [3].

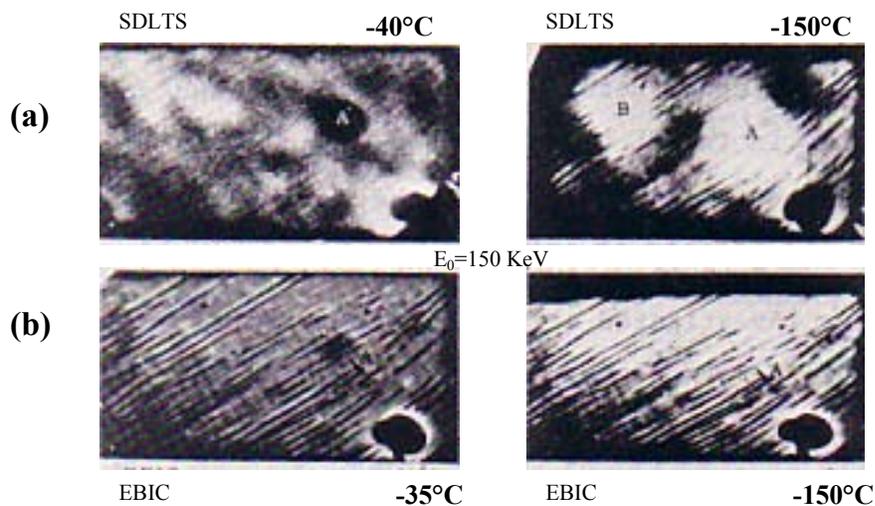
La dépendance en température des images EBIC de contraste (Fig.I.7) fournit d'importantes informations sur le processus de recombinaison au niveau de ces défauts. Ceci a conduit au développement de plusieurs modèles phénoménologiques pour la description de la recombinaison des porteurs au niveau de ces défauts [3].

Pour utiliser le signal EBIC comme signal vidéo, il faudrait utiliser un amplificateur de faible impédance d'entrée et de bande passante d'au moins 10 KHz pour qu'il y ait formation d'images à des vitesses de balayage normales ( $10^{-4}$  -  $10^{-5}$ /s). En MEB l'image est formée par au moins 1000 lignes où chaque ligne compte 1000 points [3]. Le balayage du faisceau incident est en synchronisation avec celui de l'écran d'observation dont la

variation de la luminosité traduit la modulation de l'intensité de l'émission qui provient de l'interaction électron- matière. La nature de l'émission caractérise le mode utilisé dans l'obtention des images. Pour l'observation de l'image en mode EBIC cette synchronisation à la surface de l'échantillon permet d'obtenir des images dont chaque point a une intensité proportionnelle au courant EBIC. On pourra citer dans ce contexte et à titre d'exemple les travaux de Marek (1982), Donlato (1983), Tabet et al (1989) etc... [3]



**Fig.1.6.** Deux images obtenues par EBIC (a), et STEM (microscopie électronique à balayage en transmission) (b) pour des dislocations, les recombinaisons apparaissent en tant que secteurs foncés dans l'EBIC (D'après .P.M. Petroff) [12].



**Fig.1.7.** Exemple d'obtention des images par SDLTS (spectroscopie en balayage des transitoires associés aux niveaux profonds) (a) et EBIC (b) pour GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Le contraste EBIC est tel qu'une augmentation de recombinaison de porteur correspond aux régions noires (D'après .P.M. Petroff) [12].

## **I.2.4.2. Application quantitative :**

### **I.2.4.2.1. Introduction :**

L'intérêt majeur d'une étude quantitative par la technique EBIC réside dans la détermination directe de paramètres physique tels que, le niveau de dopage, la vitesse de recombinaison en surface, la vitesse de recombinaison au niveau des joints de grains, la longueur de diffusion etc....De telles mesures quantitatives requièrent des dispositifs expérimentaux avec des géométries spécifiques de l'échantillon [3]. Pour accéder à des informations quantitatives, la procédure est selon le cas plus au moins lourde que la mesure elle-même. La détection du signal EBIC nécessite la fabrication d'une jonction (Jonction p-n ou diode Schottky) ce qui est une tâche longue pour la préparation des échantillons et qui n'est pas toujours réussie. Comme on a déjà vu, les principaux dispositifs rencontrés en technique EBIC sont illustrés par la figure (I.5).

On donnera dans le paragraphe suivant, un bref aperçu sur les principales approches développées pour chaque géométrie en insistant sur un paramètre critique pour la caractérisation des matériaux qui est la longueur de diffusion. On peut noter que ce paramètre a fait l'objet de plusieurs travaux en mode EBIC et que la fiabilité de sa mesure dans ce mode est parfois meilleure par rapport à d'autres techniques. A titre indicatif, l'article de Leamy publié en 1982 citait 120 références concernant seulement les méthodes de détermination de  $L$  ! [3].

### **I.2.4.2.2. Détermination de la longueur de diffusion :**

#### **a. Le cas de la jonction perpendiculaire à la surface de l'échantillon :**

Concernant les deux structures (figure I.5.a, et Figure I.5.c), plusieurs tentatives séparées ont fait l'objet d'étude théorique pour dériver une équation EBIC du profil courant - distance  $x$ . Ainsi, Van Roosbroeck (1965) donne un calcul analytique exact de ce profil pour une source ponctuelle de génération située en surface. Bresse et Lafeuille (1971) considèrent plutôt une source située à une certaine profondeur de la surface de l'échantillon mais seulement pour des vitesses de recombinaison en surface  $S=0$  ou  $\infty$ [3]. Berez et Kuiken (1976) généralisent ces résultats pour une vitesse  $S$  quelconque. Von Roos (1979) détermine la vitesse  $S$ , la longueur de diffusion  $L$  et la durée de vie  $\tau$  des porteurs en régime transitoire en modulant l'amplitude du faisceau pour des fréquences

spécifiques ; cela nécessite un accessoire qui n'est pas commun en microscopie électronique à balayage conventionnelle [3].

Beaucoup de travaux ont été développés concernant le même problème aussi bien en régime transitoire qu'en régime stationnaire. On pourra citer encore les travaux de Donolato (1982) , Luke et Von Roos (1983) qui ont développé des calculs plus simples pour l'équation de ce profil en utilisant des fonctions mathématiques élémentaires [3]. Donolato (1983) développe une méthode de détermination de  $L$  en étudiant la décroissance du courant en fonction de  $x$  qui est la distance entre le point d'impact du faisceau et la jonction pour différentes tensions incidentes. Cette méthode lui a évité l'ajustement de courbes théoriques et expérimentales avec deux paramètres  $S$  et  $L$  [3].

L'inconvénient essentiel des structures données par ces figures est la modification des résultats pour les basses tensions. Cette influence correspond à la diminution de la valeur absolue du courant EBIC et par suite de l'efficacité de collecte. Le problème aussi se pose pour les hautes tensions dans l'utilisation d'une distribution de génération exacte. Fuyuki et al (1980) ont reconsidéré ce problème en le traitant à trois dimensions, tout en se basant sur le modèle de Kanaya et Okayama (1972) [3].

Il faut noter aussi qu'avec cette méthode de mesure de profil courant- distance  $x$  , on ne peut détecter les inhomogénéités de longueur de diffusion  $L$  et qu'on ne peut mesurer qu'une valeur moyenne ou effective de cette longueur de diffusion. L'avantage de ces deux structures est que les calculs seront insensibles aux pièges dans la région de charge d'espace ainsi qu'à l'épaisseur du métal dans le cas de la figure (I.5.c) [3].

### **b. Le cas de la jonction parallèle à la surface de l'échantillon :**

Dans le cas des structures schématisé par les figures (I.5.b) et (I.5.d) le calcul du courant EBIC est donné sous forme d'une expression contenant le terme de longueur de diffusion  $L$  et par suite la détermination de ce courant en fonction de l'énergie Incidente  $E_0$  conduit à la détermination de  $L$  en ajustant les courbes théoriques et expérimentales de l'efficacité de collecte [3]. Pour des raisons pratiques, la structure donnée par la figure (I.5.d) d'une jonction Schottky est préférable à la structure donnée par la figure (I.5.b) d'une jonction p-n, puisque pour la première, le problème de la vitesse de recombinaison  $S$  en surface ne se pose pas [3]. Ce montage est d'un grand intérêt pratique puisqu'il va permettre la détermination locale des faibles valeurs de la longueur de diffusion. Cette

particularité fait de la technique EBIC un outil de caractérisation locale et permet d'étudier l'hétérogénéité de la recombinaison [3].

Cette structure à base d'une diode Schottky a été proposée pour la première fois par Kamm (1976) et utilisée par Wu et Wittry en 1978. Ces derniers ont pu montrer qu'elle peut être utilisée aussi bien pour les matériaux ayant aussi bien une grande ( $L \approx 50 \mu\text{m}$ ) qu'une faible ( $L \approx 1 \mu\text{m}$ ) longueur de diffusion. Cette dernière est surtout déterminée avec une grande précision pour les hautes tensions du faisceau incident [3].

Dans le cas de ces deux structures, on peut citer les travaux de Jakubowicz (1980), Kittler et al (1985) Koch et al (1988), Tabet et Tarento (1989) etc....

On notera que les méthodes de détermination de cette longueur de diffusion n'arrête pas de se développer partant de ces structures soit en introduisant des améliorations de l'électronique du système de mesure (Bresse et Rivière en 1984) soit en imaginant d'autres dispositions du faisceau par rapport à la surface de l'échantillon dans le but toujours de diminuer le nombre de paramètre d'ajustement (Kittler et Seiffert en 1989) [3].

Jusqu'à ce jour, la technique EBIC reste un outil important pour étudier les propriétés des semiconducteurs [13] [14].

### **I.2.5. Conclusion :**

Les informations contenues dans le signal EBIC peuvent être exploitées grâce à une modélisation de ce dernier.

Ceci impose donc une compréhension des phénomènes physiques mis en jeu lors d'une investigation par la technique EBIC c'est à dire l'analyse de l'interaction électron-matière notamment la pénétration et la perte d'énergie des électrons dans les solides, la génération des porteurs libres, la diffusion et la collection des porteurs.

Ceci fait l'objet de la partie suivante.

## **I.3. L'interaction électron-matière (SC)**

### **I.3.1. Introduction :**

Un microscope électronique à balayage permet une accélération des électrons dans un domaine d'énergie allant de 1 à 50 KeV. Leur trajectoire dans la matière dépend de leur énergie et des propriétés physiques des matériaux. Les électrons qui pénètrent dans le matériau subissent des interactions électromagnétiques qui ont deux effets : une déviation de leur direction et une variation de leur énergie cinétique primaire [1].

Dans ces interactions interviennent les noyaux des atomes, leurs électrons du cœur fortement liés et leurs électrons de valence [1].

### **I.3.2. Historique :**

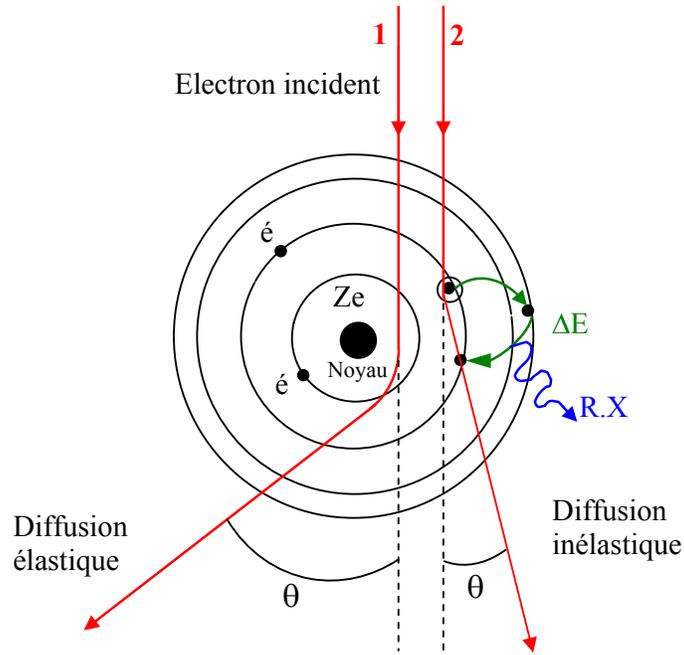
L'étude de l'interaction des électrons avec la matière solide a débuté vers la fin de l'avant dernier siècle (Lenard en 1895). Les premières théories Bothe (1933) et (1949), Bethe (1933) et (1938) s'intéressaient au domaine des hautes énergies [15].

Les divers phénomènes se produisant durant l'irradiation du solide par les électrons constituent la base des informations concernant la distribution spatiale et l'énergie de ce faisceau pénétrant. Une première tentative pour déduire cette distribution a été élaborée empiriquement par Makhov (1960) en se basant sur la théorie de Spencer (1955) qui était jusque là la seule théorie complète de l'intensité du faisceau incident et de ces fluctuations [15].

Ce genre de modèle empirique est assez limité pour conduire à une approche globale. Dans le même domaine des énergies citées, Archard (1961) proposa un modèle en se basant sur la théorie de perte d'énergie de Bethe (1940) et la théorie des collisions élastique d'Everhart (1960). Ce n'est qu'à partir de 1964 que Cosslett et Thomas publièrent des résultats sous une forme généralisée et collective pour le domaine des énergies moyennes (5 à 50 KeV) avec discussion des différentes théories et modèles de ceux qui les ont précédés. L'approche théorique a fourni une description physique détaillée des phénomènes en question. En 1972, Kanaya et Okayama démontrèrent les limitations 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 [15].

### I.3.3. Mécanismes physiques de l'interaction électron-matière :

Le bombardement d'un corps solide par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue global on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques (Fig.I.8).



**Fig.I.8.** Schéma illustrant les deux types de diffusion d'un faisceau d'électrons dans une cible solide

#### I.3.3.1. Les diffusions élastiques :

Les diffusions élastiques sont essentiellement des interactions coulombiennes avec les noyaux des atomes. Au cours de ces collisions, l'énergie cinétique des particules et leur quantité de mouvement sont conservées. Leur masse étant très supérieure à celles des électrons incidents, les noyaux qui induisent dans leur environnement immédiat un champ électrique très intense, peuvent faire subir à la direction de l'électron une variation allant jusqu'à un angle de 180 degrés [1].

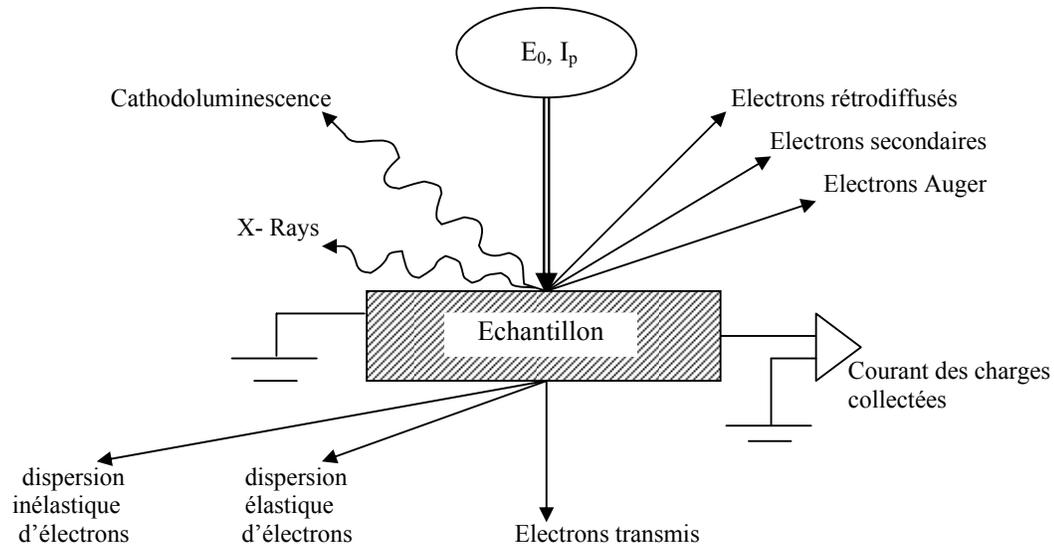
Dans le cas d'interaction proche de la surface, l'électron peut ressortir par la face avant du matériau. On dit qu'il est rétrodiffusé. La proportion et les énergies de tels électrons dépendent de leurs énergies primaires ainsi que des propriétés physiques du

matériau considéré. Cependant, la majorité des électrons suivent leurs chemins sans trop s'approcher du noyau en raison de l'écrantage produit par les électrons atomiques [1]. L'énergie perdue par l'électron incident est transférée aux noyaux au cours de ce type de collision, peut donc être considérée comme négligeable, en vertu des rapports de masse des deux partenaires [1].

### **I.3.3.2. Les diffusions inélastiques :**

En revanche, les interactions inélastiques se font entre électrons incidents et électrons atomiques. Cependant, il faut distinguer les électrons du cœur et ceux des couches externes. Les électrons du cœur sont très liés au noyau et leur excitation met en jeu une énergie inférieure à leur énergie de liaison. Sous l'impact de l'électron incident, ils subissent une transition vers un niveau inoccupé d'énergie plus élevée. L'électron incident voit alors son énergie cinétique diminuer. Le processus de désexcitation se produit immédiatement après et l'entité excitée restitue rapidement l'énergie qu'elle a acquise dans ce processus soit radiativement, soit par transfert à un électron externe ou à un électron interne de niveau plus élevée. Celui ci retombe au niveau du cœur inoccupé. L'excès d'énergie est libéré sous forme d'un rayonnement électromagnétique (rayon X) ou d'énergie cinétique à un autre électron atomique du cœur [1].

Dans le cas des semiconducteurs et des isolants, on assiste pour les électrons externes à une transition inter-bande et donc à la création d'une paire (é-h). Alors que dans un métal cette transition s'effectue au sein d'une même bande d'un état vers un autre état plus énergétique [1]. On peut conclure que la dispersion inélastique donne naissance à une grande variété de signaux utiles tel que : RX, l'émission d'électrons secondaires, l'effet Auger, la cathodoluminescence et les effets d'échauffement (Fig.I.9).



**Fig. I.9.** Mécanismes de dispersion des électrons incidents  
(D'après A.Nouiri 2000) [16]

Les deux types de collisions que nous venons de citer ainsi que les phénomènes qui les accompagnent sont responsables de la dissipation d'énergie de l'électron incident dans la matière qu'il traverse ainsi que la forme de sa trajectoire [1].

Afin d'expliquer la forme des fonctions de génération et les parcours des électrons dans le matériau qui vont figurer à plusieurs reprises dans notre étude, nous nous contenons de rappeler brièvement, quelques aspects qualitatifs et quantitatifs du problème. Seuls la mécanique quantique permet de le résoudre correctement.

### I.3.4. Dissipation de l'énergie des électrons dans le matériau :

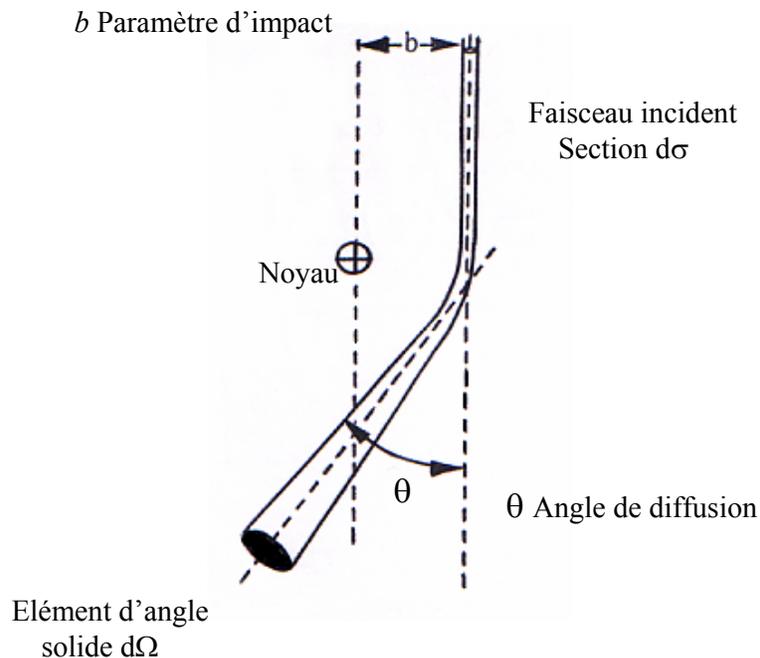
#### I.3.4.1. Collision électron-noyau :

L'électron, à cause de sa faible masse devant celle du noyau, ne perd que peu d'énergie dans ce genre de collisions. Par contre, ces dernières modifient sa direction et affectent ainsi, sa probabilité d'interaction inélastique dans laquelle il perd de l'énergie. Le premier modèle élaboré pour expliquer le phénomène de diffusion des particules par la matière est dû à Rutherford. Le calcul utilise la mécanique classique pour déterminer l'action du champ coulombien du noyau supposé fixe sur la particule incidente. L'influence des électrons atomiques, qui se traduit par un écrantage du noyau et une modification du champ électrostatique qu'il génère dans son environnement, est

négligeable[1]. Appliqué à un électron incident de masse  $m$  et de vitesse  $v$  non relativiste passant à la distance  $b$  d'un noyau isolé (Figure I.10), le modèle de Rutherford permet de calculer une trajectoire hyperbolique et une expression de la fraction d'un faisceau homocinétique déviée par unité d'angle solide  $d\Omega$  autour de la direction  $\theta$ . Cette quantité est appelée section efficace différentielle de diffusion. Elle a la forme suivante [1] :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{4m^2 v^4 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (\text{I.1})$$

$Z$  est le numéro atomique et  $\theta$  est l'angle de déviation représenté sur la figure (I.10). Cette relation montre que les éléments les plus lourds sont plus diffusifs et que les particules les plus rapides sont moins déviées. De plus, elle présente une singularité vers  $\theta = 0$  qui signifie qu'à large paramètre d'impact, on ne peut continuer à ignorer l'écrantage du noyau [1]. La formule surestime ainsi la section efficace de diffusion. Cette expression n'est donc valable que pour les diffusions produisant de grandes déviations.



**Fig I.10.** Diffusion des électrons incidents par le noyau atomique :  $d\sigma/d\Omega$  définit la section efficace différentielle de diffusion [1].

La description la plus générale de l'écrantage se fait par le calcul de la distribution spatiale des fonctions d'ondes des électrons atomiques [1]. Les calculs sont délicats mais en première approximation, le potentiel peut être exprimé par un développement en série exponentielle. Dans une approximation plus grossière, connue sous le nom de modèle de Wentzel, seul le terme prépondérant de la série est retenu soit [1] :

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (\text{I.2})$$

avec  $a_0$  le rayon effectif d'écrantage du noyau par les électrons atomiques, dont une expression est donnée par :

$$a_0 = 0.8853 a_H Z^{1/3}$$

$a_H$  représente le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène,  $Z$  le numéro atomique du matériau et  $r$  la coordonnée radiale. L'expression de la section efficace de diffusion qui tient compte de cette correction devient alors [17] :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{4m^2 v^4 \left( \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \right)^2} \quad (\text{I.3})$$

où  $\theta_0$  vérifie  $\sin(\theta_0/2) = \lambda / 4\pi a_0$ ,  $\lambda$  étant la longueur d'onde de deBroglie du faisceau incident.

La prise en compte, dans l'expression du potentiel atomique de l'effet d'écrantage, lève l'indétermination sur les faibles diffusions angulaires rencontrées dans la relation (I.1) alors que pour les larges angles de déflexion, les deux expressions deviennent identiques [1].

Toutes ces sections efficaces de diffusion sont calculées selon la première approximation de Born. Ce traitement n'est valable qu'à large paramètre d'impact, c'est-à-dire à faible angle de déviation. Notons également que les deux directions de spin de l'électron sont aussi ignorées [1].

D'autres modèles d'interaction sont aussi rencontrés dans la littérature ; par exemple celui de Kanaya [18] qui simplifie au maximum les étapes de diffusion. Dans ce modèle, on suppose que le processus de diffusion comporte deux étapes : dans la première l'électron pénètre directement en ligne droite jusqu'à une distance  $x$ . Dans la deuxième les électrons diffusent d'une manière isotropique jusqu'à la fin de leur trajectoire.

La section efficace de diffusion dans ce modèle dérive d'un potentiel électrostatique comparable à celui de l'expression (I.2).

Le calcul exact de la section efficace de diffusion à large angle a été effectué par Mott. Le résultat diffère des valeurs obtenues à partir de l'expression de Rutherford à larges angles, surtout pour les éléments à poids atomique plus élevé. Aux faibles déviations et pour les éléments légers, l'expression de Rutherford reste donc une bonne approximation [1].

### **I.3.4.2. Collision électron-électron :**

Le ralentissement de l'électron incident est essentiellement dû aux collisions inélastiques avec les électrons atomiques qu'il excite ou éjecte [1].

Contrairement aux interactions élastiques, les cibles sont ici, des particules légères. Par conséquent le transfert d'énergie cinétique est important [1].

Soit  $\Delta E$  le transfert d'énergie dans une collision électron-électron atomique, où celui-ci est considéré faiblement lié et situé à la distance  $b$  (paramètre d'impact) de la trajectoire de l'électron incident. Un calcul classique donne [19] :

$$\Delta E = \frac{2e^4}{mv^2} \cdot \frac{1}{b^2} \quad (\text{I.4})$$

L'énergie transférée, varie comme l'inverse du carré du paramètre d'impact. Il est évident que l'énergie maximale que peut transférer l'électron est limitée (la limite supérieure est la valeur de l'énergie incidente), le paramètre d'impact  $b$  est limité inférieurement il est aussi limité supérieurement par la densité des électrons dans la matière. Par ailleurs, l'électron étant lié à son noyau, l'effet de la particule incidente dépend de la période de son mouvement et de la durée de la collision. Si la collision est très lente comparée à cette période, l'électron ne subit pas de transfert d'énergie, et son mouvement n'est pratiquement pas perturbé [1].

Si par contre, la durée de collision est très courte comparée à cette période, l'électron cible pourra être considéré comme libre et la relation donnée ci-dessus est valable. Par conséquent, en restant toujours dans cette approche classique, on voit que pour déterminer l'énergie transférée à un élément de volume cylindrique située à une position  $x$ , il faut se donner un domaine de validité de la formule pour le paramètre d'impact  $b$  [19]. Pour un matériau de masse volumique  $\rho_0$  et de poids atomique  $A$  le nombre

d'électrons par unité de volume est  $(\rho_0 ZN_a/A)$  où  $N_a$  est le nombre d'Avogadro. Par intégration, l'énergie transférée à l'élément de volume cylindrique d'épaisseur  $dx$  est :

$$dE = 2\pi N_a e^4 \rho_0 (Z/AE) \ln(B) dx \quad (\text{I.5})$$

où la quantité  $B$  tient compte des deux limites inférieures et supérieures de  $b$ . Cette approche montre, comment on peut aboutir à la forme de la perte d'énergie d'une particule incidente lors de son interaction avec les électrons. Ceci n'est évidemment qu'un préliminaire très simplifié. Sans entrer dans les détails de calculs, on peut énoncer une loi qui est couramment utilisée [20], [21], [22] pour décrire ce processus de dissipation d'énergie ; c'est la loi de Bethe, son expression pour des électrons non relativistes est :

$$dE = 2\pi N_a e^4 \rho_0 (Z/AE) \ln(aE/I) dx \quad (\text{I.6})$$

Le paramètre  $a$  qui vaut 1 par un calcul classique est corrigé quantiquement à 1,166. Mais ce choix a une faible influence puisque  $a$  figure à l'intérieur du logarithme.  $I$  est le potentiel d'ionisation moyen. C'est un paramètre caractéristique du matériau qui dépend de son numéro atomique  $Z$ . Différentes relations empiriques expriment cette dépendance [18]. Leur validité dépend du domaine de  $Z$ .

$$I = 13 Z \quad Z < 6 \quad (\text{I.7})$$

$$I = (9,76 + 58,8Z^{-1,19}) Z \quad (\text{I.8})$$

Pour le silicium la relation (I.8) donne  $I = 172\text{eV}$  alors que pour l'hydrogène la relation (I.7) conduit à  $I = 13\text{eV}$  peu différent du potentiel de première ionisation  $13,6\text{eV}$ .

### I.3.4.3. Fonction de dissipation d'énergie $\Phi(u)$ :

L'analyse de dissipation du faisceau d'électrons dans un semiconducteur est de grande importance. Elle est définie par la perte d'énergie des électrons primaires dans une direction normale à la surface de la cible comme fonction  $\Phi(u)$  appelée Depth Dose Fonction, où  $u$  est un paramètre sans dimension traduisant la pénétration normalisée au parcours électronique  $R$  calculé en  $\text{g/cm}^2$  avec [15] :

$$u = \rho \frac{z}{R} \quad (\text{I.9})$$

$Z$  : Profondeur de l'échantillon.

$\rho$  : la masse volumique du semi-conducteur.

$R$  : Parcours électronique.

\* La fonction  $\Phi(z/R)$  est donnée par l'expression suivante [3] :

$$\Phi(z/R) = \frac{d(E_A/E_0)}{d(z/R)} \quad (\text{I.10})$$

$E_A$  est l'énergie absorbée en fin du parcours normalisé et dont l'expression est donnée par Kanaya et Okayama (1972) [18] :

$$E_A = E_0 - \eta_T E - \eta_B E_B \quad (\text{I.11})$$

$\eta_T$  et  $\eta_B$  sont les fractions d'électrons transmis et rétrodiffusés respectivement.

$E_B$  est l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés.

Le terme invariant  $\bar{K} = E_B/E_0$  est donné par la formule de Sternglass (1954) :

$$\bar{K} = 0.45 + 2.10^{-3} Z \quad (\text{I.12})$$

Cette dernière équation est valable pour  $0.2 < E_0 < 32$  keV et  $8 < Z < 47$ .

### I.3.4.3.1. Fonction $\Phi(u)$ d'Everhart –Hoff :

Everhart et Hoff (1971) propose une expression analytique polynomiale de la fonction  $\Phi(u)$  d'après des mesures de courant EBIC d'un échantillon à base de Silicium.

C'est probablement l'équation la plus utilisée pour sa simplicité [20] :

$$\Phi(u) = (1-f) \cdot (0.60 + 6.21u - 12.4u^2 + 5.69u^3) \quad (\text{I.13})$$

$f$  : La fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion. D'après les travaux de Sternglass (1954), la rétrodiffusion est presque constante sur l'intervalle d'énergie 5-50 KeV. Il s'exprime par :

$$f = \eta_B \cdot E_B / E_0 \quad (\text{I.14})$$

Malgré la restriction notée sur le numéro atomique  $Z$  et l'intervalle de tension du faisceau électronique valable pour l'utilisation de celui-ci dans le cas du Ge ( $Z=32$ ), l'expression  $\Phi(u)$  d'Everhart-Hoff a été utilisée dans la littérature pour la totalité des matériaux et sous les conditions de travail allant de 1 à 40KeV.

### I.3.4.3.2. Fonction $\Phi(u)$ de Wittry-Kyser :

Une approximation gaussienne a été proposée par Wittry et Kyser (1967) à partir d'une étude de la cathodoluminescence dans le GaAs[23]. De sa part, Kyser (1972) l'a modifiée en introduisant un autre terme en exponentielle à partir d'une étude de l'émission X par une cible de Cu. La forme finale d'une approximation gaussienne modifiée de  $\Phi(u)$  est donnée par l'expression suivante [24] :

$$\Phi(u) = A \exp\left[-\left(\frac{u - u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \exp\left[-\frac{bu}{u_0}\right] \quad (\text{I.15})$$

Avec  $u_0 = 0.125$ ,  $\Delta u = 0.35$ ,  $(B/A) = 0.4$  et  $b = 4.0$

### I.3.5. Parcours électronique :

Dans le cas des particules lourdes, dont les trajectoires dans la matière sont pratiquement rectilignes, la formule (I.6) donne directement l'énergie déposée dans le matériau en fonction de la profondeur. Par contre, les électrons incidents subissent des séries successives de dispersions élastiques et inélastiques dans le semiconducteur, et ont alors des trajectoires quelconques [1]. Leur profondeur de pénétration ( $R$ ) est donnée par plusieurs expressions qui sont proposées par différents auteurs.

La relation générale de parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie du faisceau incident  $E_0$  sous la forme suivante [15] :

$$R_e = \left(\frac{K}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad (\text{I.16})$$

Où :

$\rho$ : la masse volumique du matériau.

$K, \alpha$  : sont des constantes dépendent du nombre atomique du matériau et aussi de  $E_0$ .

$E_0$  : est l'énergie du faisceau incident.

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

En utilisant l'approximation du freinage continu et par intégration de la formule de pénétration de Bohr-Bethe normalisée à l'énergie  $E$ , entre l'énergie initiale  $E$  et la valeur  $E=0$ , on obtient la pénétration de Bohr et Bethe notée  $R_B$  est donnée par l'expression suivante[3] :

$$R_B = \int_E^0 \frac{dE}{dE / (d\rho z)} \quad (\text{I.17})$$

$\rho$  : est la masse volumique du matériau considéré.

Grasse à cette méthode, Kyser (1972) propose l'expression du parcours électronique suivante [24] :

$$R_K = 2.56(E_0 / 30)^{1.68} \quad (\text{I.18})$$

$R$  : est exprimée en  $\text{mg}/\text{cm}^2$

$E_0$  : est exprimée en KeV

Avant cette expression et en 1957, les travaux de Grün concernant la dissipation de l'énergie des électrons dans l'air l'ont conduit à un parcours donnée par extrapolation de la partie linéaire de la fonction  $\phi(u)$  (fonction de dissipation d'énergie) à zéro .Il trouve comme expression de R la relation suivante [3] :

$$R_G = 4.57 E_0^{1.75} \quad (\text{I.19})$$

$R_G$  : est exprimé en  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$

$E_0$  : est exprimée en KeV, ( $5 < E_0 < 25$  KeV).

Et après en 1971, Everhart et Hoff proposent de leur part pour les matériaux qui ont un nombre atomique  $Z$  tel que  $10 < Z < 15$  et pour des énergies d'excitation  $E_0$  tel que  $5 < E_0 < 35$  (KeV) la relation suivante [20] :

$$R_{EH} (\mu\text{m}) = (0.0398 / \rho) E_0^{1.75} \quad (\text{I.20})$$

$\rho$ : est exprimé en  $\text{g}/\text{cm}^3$

$E_0$  : est exprimé en KeV.

Une autre relation plus générale a été dérivée par Kanaya et Okayama en 1972 sous la forme suivante [18] :

$$R_{K-O} (\mu\text{m}) = \left( \frac{0.0276 A}{\rho Z^{0.889}} \right) E_0^{1.67} \quad (\text{I.21})$$

$E_0$  : est exprimée en KeV

$A$  : est le poids atomique en  $\text{g}/\text{mol}$ ,  $\rho$  est en  $\text{g}/\text{cm}^3$ , et  $Z$  est le nombre atomique.

La figure (I.11) [25] montre une comparaison entre le parcours électronique calculé suivant le modèle de Everhart-Hoff et le modèle de Kanaya-Okayama pour quelques matériaux.

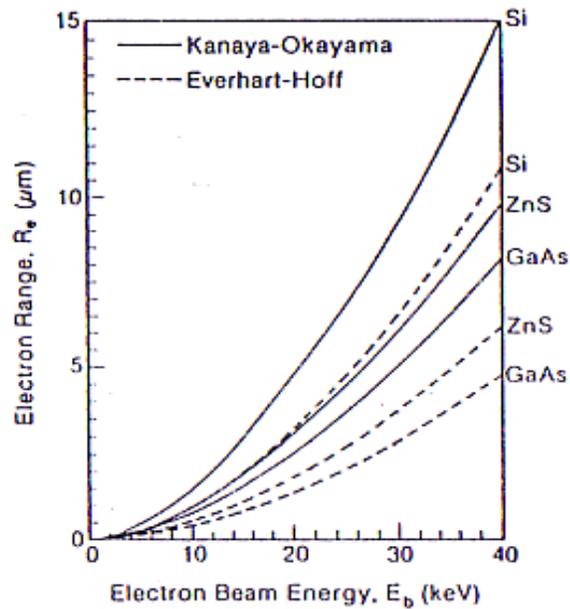


Fig.I.11. Profondeur de pénétration des électrons en fonction de  $E_0$  [25]

### I.3.6. Volume de génération :

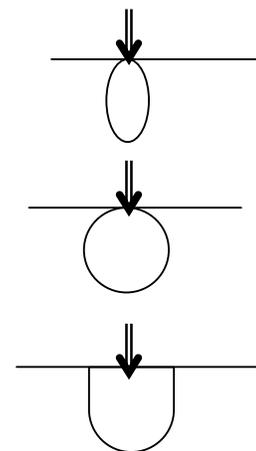
Le volume de génération est le lieu de création des paires (é-h), il prend une forme qui dépend du nombre atomique du matériau ( $Z$ ) et de  $E_0$ .

Suivant le model de Kanaya- Okayama [16], le volume de génération prend trois formes différentes, suivant la valeur de  $Z$  :

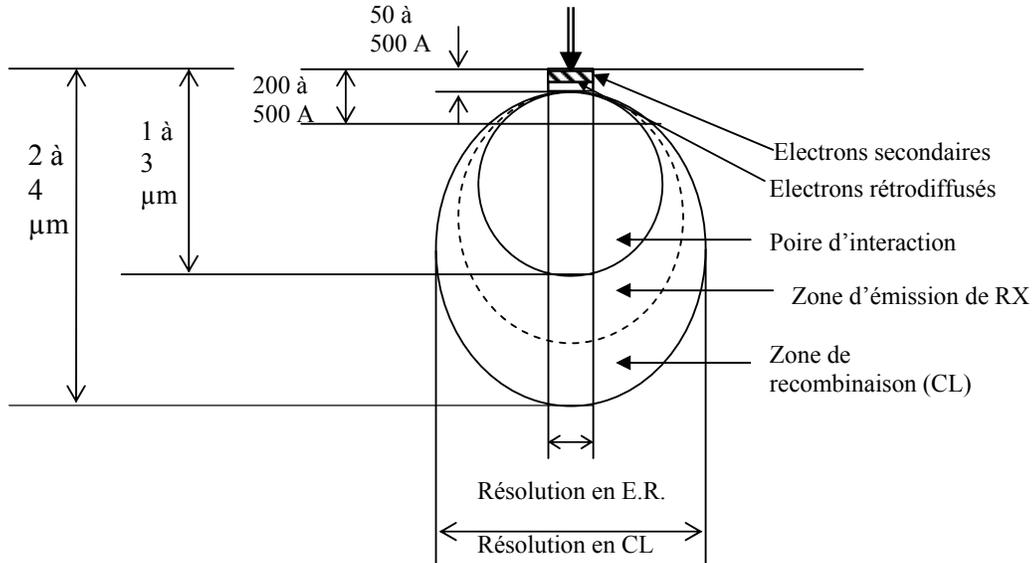
$Z < 15$                       Formes en poire

$15 < Z < 40$               Forme sphérique

$Z < 40$                       Formes hémisphérique



La résolution spatiale des différents phénomènes de l'interaction électron matière dans le volume de génération est montrée dans la figure suivante (Fig.I.12) [16].



**Fig.I.12.** La résolution spatiale des différents phénomènes dans le volume de génération [16]

D'autre part l'interaction électron- matière est caractérisée par d'autres paramètres tel que l'énergie de formation de paire (é-h) et le taux de génération qui sont analysés dans les paragraphes suivants.

### **I.3.7. Phénomène de génération de porteurs dans les SC :**

Les interactions du faisceau incident avec le matériau sont donc responsables de l'excitation et l'ionisation des atomes. Dans un semiconducteur, ces excitations conduisent, entre autre, à la formation de paires électron-trou.

On caractérise la création des porteurs dans le SC par un paramètre  $G'$  ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) qui mesure le nombre de porteurs créés par unité de volume et unité de temps. Ce paramètre résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs. Il existe d'une part les générations spontanées de porteurs due à l'agitation thermique que l'on caractérisera par un paramètre  $G_{\text{th}}$  que nous appellerons taux de génération thermique, et il existe d'autre part les générations induites de porteurs qui résultent de l'excitation du SC par une source extérieure [15]. Ces générations peuvent résulter d'une excitation optique, d'une irradiation par des particules, d'un champ électrique intense ou d'une injection électronique. Ce type de génération est caractérisé par un paramètre  $G$  qui est spécifique du processus mis en jeu. Par contre, le paramètre  $G_{\text{th}}$  est spécifique du matériau [13].

Etudiant la détermination de la fonction de génération induite  $G(x,y,z)$  qui décrit la distribution des paires électron-trou dans le volume et qui correspond au nombre de paires créés par unité de volume et unité de temps ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ). On peut traiter le problème en utilisant une fonction à une seule variable  $G(z)$  puisque le faisceau est normal à la surface de l'échantillon. Donc la résolution autour de l'axe du faisceau incident est symétrique dont on peut obtenir  $G(z)$  par projection de  $G(x,y,z)$  sur le plan XY [15] :

$$G(z) = \int_{xy} G(x, y, z) \cdot dx \cdot dy \quad (\text{I.22})$$

Mais pour déterminer cette fonction  $G(z)$  il est préférable de définir l'énergie de formation d'une paire électron-trou ( $E_{e-h}$ ) et le taux total de génération  $G$  [15].

### I.3.7.1. Energie de formation d'une paire électron-trou :

Cette énergie est définie comme une énergie moyenne dissipée par paire (é-h) générée. Cette énergie est différente de l'énergie du gap puisque l'interaction produit en chaîne aussi bien des photons que des paires (é-h). Cependant plusieurs modèles sont proposés pour la calculer. Ils sont soit trop compliqués et par conséquent peu pratiques, soit trop simplifiés donc approchés [1].

En 1968, Klein proposa un modèle de ce processus assez bien applicable. Son modèle est le suivant : l'énergie de la particule incidente étant nettement supérieure à celle du gap, elle crée une distribution de porteurs chauds (électrons occupant des états hauts dans la bande de conduction et trous occupant des états profonds dans la bande de valence). Ces paires très chaudes vont à leur tour, par un mécanisme en cascade, exciter d'autres paires, jusqu'à ce que leur énergie disponible soit inférieure au seuil de création de la paire. L'énergie restante se dissipera par excitation de phonons [1]. Le diagramme de Klein résumant les différentes étapes du mécanisme est représenté sur la figure (I.13).

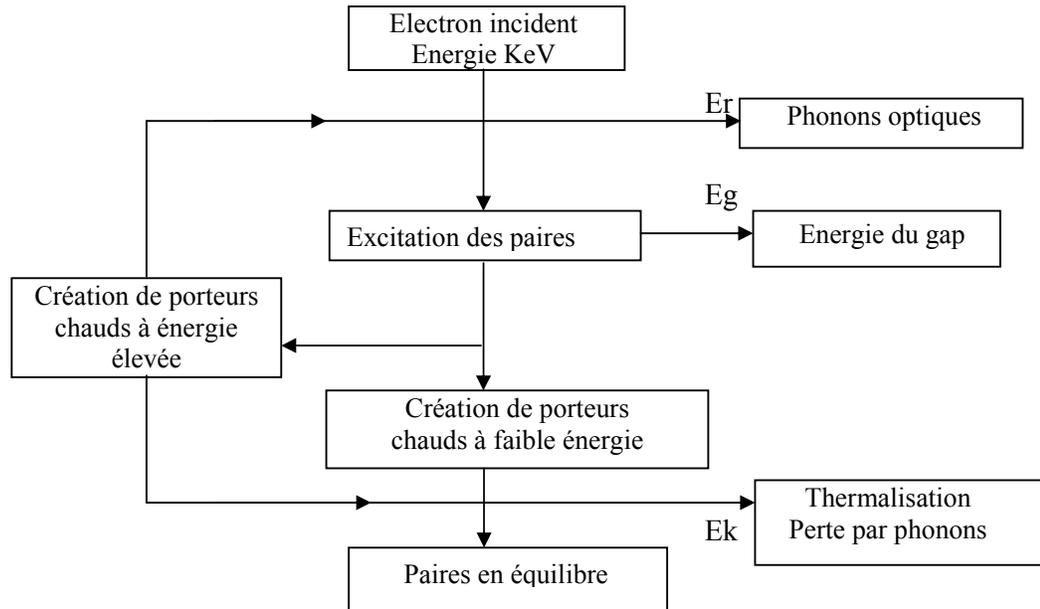
Le calcul théorique basé sur le modèle de Klein, conduit à une énergie de formation d'une paire électron-trou ( $E_{e-h}$ ) peut être écrite sous la forme d'une somme de trois termes [1] :

$$E_{e-h} = E_g + \overline{E}_r + \overline{E}_k \quad (\text{I.23})$$

$\overline{E}_g$  : énergie du gap

$\overline{E}_r$  : l'énergie moyenne de création de phonons optique.

$\overline{E}_k$  : l'énergie moyenne de thermalisation par vibrations du réseau.



**Fig. I.13.** Diagramme de Klein : création de paires et processus de perte d'énergie de l'électron incident dans le SC [1].

Klein a démontré que :

$$\overline{E}_k = (9/5) E_g \quad (\text{I.24})$$

Alors que le deuxième a été évalué par Shockley en terme de phonons optiques par [1] :

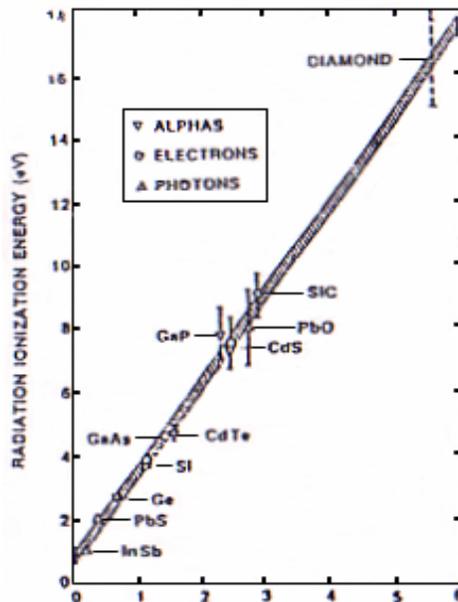
$$\overline{E}_r = r_0 h\nu \quad (\text{I.25})$$

Pour le silicium cristallin,  $r_0$  est estimé à 8 et  $h\nu$  est déterminé expérimentalement par diffraction de neutrons à 0,037 eV. Dans ces conditions, la valeur de  $E_{e-h}$  est de 3,6 eV. L'expression précédente de  $E_{e-h}$  montre aussi une relation de linéarité par rapport à la largeur de bande interdite, propriété que Klein a vérifié pour plusieurs semiconducteurs [1].

On peut citer aussi le modèle de Zulliger (1971) qui ne diffère pas trop de celui de Klein. Les valeurs limites supérieures données par ce modèle correspondent exactement aux valeurs calculées par Klein. Drumond et Moll (1971) rapportent une valeur de  $E_{e-h} = 2,96$  eV à 90 K [1].

Après Norris et al qui ont utilisé des électrons 4-14 KeV pour déterminer une valeur de  $E_{e-h}$  de 3,64 eV avec une incertitude de 20 %, Fiebiger et al ont repris des mesures par des électrons entre 10 et 24 KeV et avec une précision satisfaisante, la valeur de  $E_{e-h}$  trouvée est de 3,6 eV confirmant la valeur universelle. Il faut noter que la cause de l'inégalité de ces valeurs est attribuée à la complexité de la structure de bandes [1].

La figure (I.14) représente l'énergie  $E_{e-h}$  (présentée par Klein en 1968) pour différents matériaux en utilisant trois types d'irradiation (rayons  $\alpha$ , électrons, photons) [25].



**Fig. I.14.** Variation de l'énergie de formation de paires en fonction de l'énergie du gap pour différents semiconducteurs d'après Klein (1968) [25].

L'énergie du gap  $E_g$  qui est la différence entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence tous deux dépendent de la température.

Les gaps des différents semiconducteurs sont portés dans le tableau suivant :

SC	Energie du gap		Type
	$E_g$ (0°K) (eV)	$E_g$ (300°K) (eV)	
Ge	0,74	0,66	Indirect
Si	1,17	1,12	Indirect
InP	1,42	1,35	Direct
GaAs	1,52	1,42	Direct
GaP	2,34	2,26	Indirect
CdTe	1,60	1,50	Direct
CdS	2,56	2,42	Direct
ZnSe	2,80	2,58	Direct
ZnS	3,84	3,68	Direct

**Tableau I.1.** Valeurs des différents gaps et types de quelques semiconducteurs [15]

Le tableau I.2 résume des valeurs expérimentales de l'énergie de création des paires (é-h) dans Si (à 300°K) proposées par plusieurs auteurs en utilisant différentes sources d'irradiation.

$E_{e-h}$ (eV/paire)	Source d'irradiation	références
3.61±0.01 3.79±0.01	$\alpha$ , 5.486 MeV ( $^{241}\text{Am}$ ) $\beta$ , 363.8 KeV ( $^{113}\text{Sn}$ )	Busslati et al [26]
3.62±0.02 3.67±0.02 3.67±0.02	$\alpha$ , 5.344-8.785 MeV ( $^{228}\text{Th}$ et $^{241}\text{Am}$ ) $\beta$ , 114.86 KeV ( $^{57}\text{Co}$ ) à 1.048 MeV ( $^{207}\text{Bi}$ ) $\delta$ , 121.97 KeV ( $^{57}\text{Co}$ )	Pehl et al [27]
3.63	$e^-$ , 25KeV (EB)	Bresse [28]
3.625±0.0025 3.631±0.0025	$\alpha$ , 5.483 MeV ( $^{241}\text{Am}$ ) $\beta$ , 975.2 KeV ( $^{207}\text{Bi}$ )	Ryan [29]
3.6	$e^-$ , <15 KeV (EB)	Siekanowics et al [30]
3.44±0.2	$e^-$ , <30KeV (EB)	Nomordi et Thompson [31]
3.75±0.11	$e^-$ , 10-50KeV (EB)	Wu et wittry [6]

**Tableau I.2.** : Valeurs expérimentales de l'énergie de création des paires (é-h) dans Si (à 300°k)

### I.3.7.2. Taux de génération total :

Le taux de génération total  $G_0(s^{-1})$  est défini comme le nombre de paires électron-trou créés par unité de temps dans l'échantillon.

En connaissant l'énergie de création de paires (é-h)  $E_{e-h}$  et l'énergie effective perdue dans l'échantillon  $E_{eff}$  on peut calculer le taux de génération total qui s'exprime par [15] :

$$G = \frac{E_{eff}}{E_{e-h}} \quad (I.26)$$

D'autre part  $E_{eff}$  est la différence entre l'énergie incidente de la totalité des électrons et l'énergie perdue par les électrons rétrodiffusés, elle s'écrit alors [15] :

$$E_{eff} = N_0 E_0 (1-f) \quad (I.27)$$

$f$  : la fraction d'énergie rétrodiffusée.

$N_0$  : le nombre d'électrons incidents par unité de temps, exprimé [3] par  $N_0 = \frac{I_0}{|e|}$

$I_0$  : l'intensité du faisceau incident

$e$  : la charge d'électron.

Finalement,  $G_0$  peut être exprimée par la relation suivante [3] :

$$G_0 = \frac{I_0 E_0}{|e| E_{e-h}} (1 - f) \quad (I.28)$$

### I.3.7.3. Fonction de génération :

L'énergie perdue par l'électron incident lors de sa traversée du matériau semiconducteur sert en grande partie à la création de paires (é-h). C'est ainsi qu'on désigne par fonction de génération  $g(z)$  la valeur moyenne de la densité de paires (é-h) en fonction de  $z$  [1].

La connaissance de ce profil de génération est d'un intérêt particulier pour les mesures de cathodoluminescence, de rayon X, EBIC, ainsi que les mesures en transmission d'électrons. Elle est également importante pour étudier les dégâts causés par l'irradiation, en particulier en lithographie par faisceau d'électrons, pour chiffrer les temps d'exposition de photorésistance [1]. C'est ainsi que plusieurs méthodes ont été utilisées pour mesurer les profils de perte d'énergies [9-11], [20], [32], [33] dans différents matériaux.

On sait déterminer la perte d'énergie en fonction de la profondeur dans le solide, et, à partir de là, la distribution de génération  $g(z, E)$  de l'excès de porteurs peut être calculée en supposant que cet excès est directement proportionnel à la perte d'énergie. Sur la base de cette hypothèse, et à partir de la relation (I.28), on peut écrire cette fonction de distribution sous la forme suivante [3] :

$$g(z) = \frac{I_p}{qE_{\dot{e}-h}} \frac{dE_A}{dz} \quad (\text{I.29})$$

où  $(dE_A/dz)$  est la perte d'énergie projetée suivant  $z$

Compte tenu de l'expression  $\Phi(u)$  donnée par l'équation (I.10) la fonction  $g(z)$  devient :

$$g(z) = \frac{I_p E_0}{qE_{\dot{e}-h} R} \Phi(z/R) \quad (\text{I.30})$$

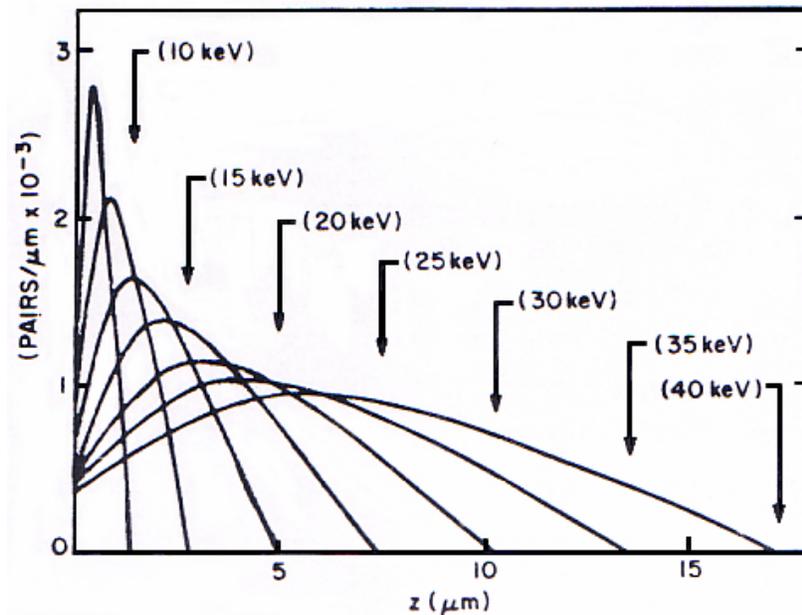
La fonction  $g(z)$  calcule le nombre de paires (é-h) créés par unité de profondeur et de temps à la distance  $z$  de la surface irradiée.

Notons que dans le cas d'une cible de silicium, et les autres matériaux qui ont un numéro atomique  $Z$ , tels que  $10 < Z < 15$ , on aura  $\Phi(Z/R)$  sous forme d'un polynôme et correspond à la relation (I.13).

Dans le cas de la structure la plus adoptée (Fig.I.5.d) le faisceau est normal à la surface de l'échantillon. Le problème présente une symétrie de révolution autour de l'axe du faisceau incident. En conséquence, on peut traiter le problème en utilisant une fonction à une seule variable  $g(z)$ . Celle-ci peut être obtenue par projection de  $g(x, y, z)$  sur le plan XY [3] :

$$g(z) = \int_{xy} g(x, y, z) \cdot dx \cdot dy \quad (\text{I.31})$$

La fonction  $g(x, y, z)$  décrit la distribution des paires (é-h) dans le volume, elle correspond au nombre de paires créés par unité de volume et unité de temps ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) tandis que la fonction  $g(z)$  correspond au nombre de paires créés par unité de profondeur et par unité de temps ( $\text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) [3].



**Fig. I.15.** Le nombre de paires (é-h) générées est une fonction de la profondeur à partir de la surface

(Figure obtenue pour un électron énergétique dans un échantillon de Si, d'après Petroff 1983 [12])

### **I.3.8. Phénomène de recombinaison :**

La recombinaison au sein d'un semiconducteur d'électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes [14] :

- i) par transition d'un électron de la bande de conduction ( $E_c$ ) vers la bande de valence ( $E_v$ ) (recombinaison « directe »).
- ii) par l'intermédiaire de centres de recombinaison; l'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successive; tout d'abord l'électron (le trou) est capté par un centre localisé (dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou (l'électron) qui recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison « indirecte »).

La contribution relative de ces deux mécanismes au processus de recombinaison dépend [14] :

- 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 de porteurs à l'équilibre
- de la température.

### I.3.8.1. 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 de recombinaison on distingue les processus suivant :

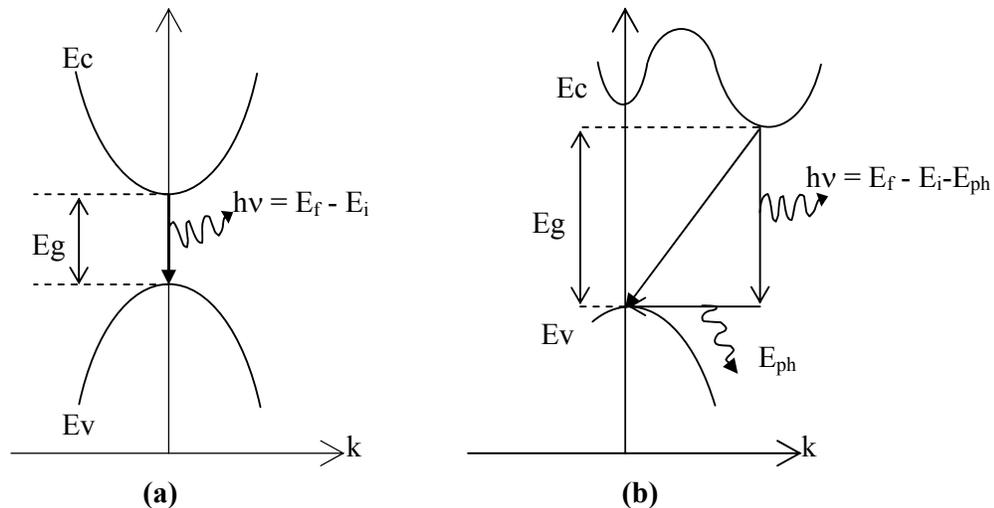
#### I.3.8.1.1. La recombinaison radiative :

Elle donne naissance à des photons. Elle a été étudiée en détail depuis 1953[34]. Le retour à l'état d'équilibre du matériau, par recombinaison de l'électron avec le trou peut se faire d'une façon intrinsèque ou extrinsèque.

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

On distingue deux transitions :

- i) **Transition directe** : Dans ce cas, le minimum de la bande de conduction ( $E_c$ ) 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 (Figure.I.16.a) [16] .
- 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 des quantités de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, qui est



**Fig. I.16.** Les énergies de transition dans les semiconducteurs à gap directe **(a)** et gap indirecte **(b)** entre les états initial  $E_i$  et final  $E_f$ .

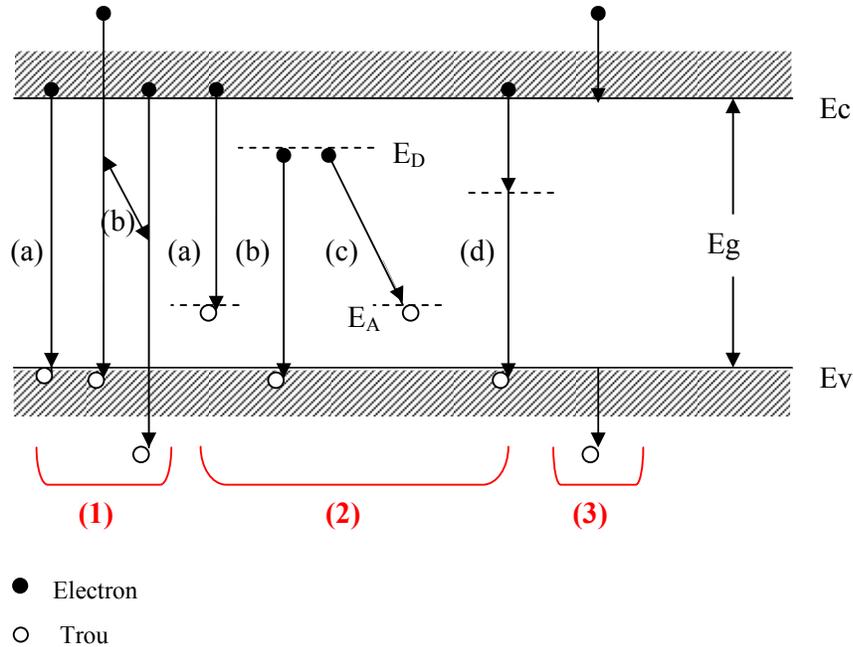
(Pour les transitions indirectes, la participation du phonon ( $E_{ph}$ ) est indispensable)

le « phonon » de vecteur d'onde  $k_1$  (Figure.I.16.b). Il s'agit donc ici d'une interaction à 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 [16].

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

La luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et défauts.

La figure (I.17) montre les différentes transitions possibles dans un SC.



**Fig.I.17. [35]**

- (1)** transition bande-bande. (a) : émission directe correspondant très étroitement à l'énergie du gap, où les phonons ou les excitons peuvent être impliqués, et (b) transition haut d'énergie impliquant les porteurs chauds.
- (2)** la transition impliquant les impuretés chimiques ou les défauts physiques; (a) bande de conduction à l'accepteur, (b) donneur au bande de valence, (c) donneur à l'accepteur (émission de paire), et (d) niveaux profonds.
- (3)** la transition entre niveaux profonds impliquant les porteurs chauds, parfois appelé l'émission de décélération.

### **I.3.8.1.2. La recombinaison non- radiative :**

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

**a. La recombinaison par choc :** est tel que l'énergie libérée dans l'acte de recombinaison est transmise à un troisième porteur qui la dissipe ensuite par interaction avec les vibrations du réseau. Selon (Scalar et Burstein) [36], ce mécanisme de recombinaison peut jouer un rôle notable dans Ge, avec la particularité que les sections efficaces de capture des porteurs sont proportionnelles aux concentrations de porteurs de charge. Mais, l'absence d'une dépendance de la section efficace de capture avec la concentration constatée par d'autres auteurs montre que tout au moins jusqu'à  $\approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , la recombinaison par choc n'est pas le processus prédominant dans Ge.

**b. La recombinaison plastique :** est tel que l'énergie libérée est transmise aux oscillations du plasma de porteurs. Ce mécanisme de recombinaison n'est réalisable que dans des cristaux fortement dopés ( $n_0 \geq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), mais à ce niveau de dopage les sections efficaces de capture d'électrons (et de trous) peuvent atteindre  $10^{-13}$ -  $10^{-15} \text{ cm}^2$  [34].

### I.3.8.1.3. La recombinaison excitonique :

C'est le couplage qui se produit à basse température entre électron et trou pour donner une pseudo-particule « exciton libre ». Celui-ci peut être piégé sur une impureté « exciton piégé » en donnant naissance à de niveaux d'énergie bien définis dans le gap [14].

### I.3.9. Collecte de porteurs :

On a déjà vu, que tous les porteurs minoritaires créés dans la zone de charge d'espace, ou qui auront atteint par diffusion les limites de celle-ci, seront collectés par la jonction pour former le signal EBIC ou courant collecté  $I_{cc}$ .

#### I.3.9.1. Observation en régime permanent :

Lorsqu'un équilibre est atteint entre le taux de génération et le taux de recombinaison des porteurs, on parle alors d'une observation en régime permanent. Cet équilibre est caractérisé par une densité de porteurs créés  $\Delta p$  [2] :

$$\Delta p = \frac{G \tau}{\frac{1}{6} \pi R^3} \quad (\text{I.32})$$

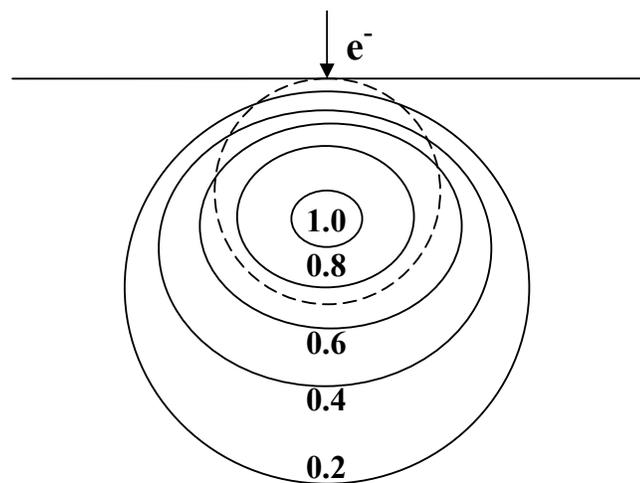
où  $(\pi R^3/6)$  est le volume de la sphère de génération de diamètre R, G le nombre de trous créés par seconde,  $\tau$  la durée de vie des porteurs minoritaires dans le matériau massif.

En fait, cette densité ne s'applique que pour un semiconducteur infini. Dans le cas où l'échantillon est semi-infini et la jonction imposant une densité nulle de porteurs en surface, entraînent de nouvelles conditions aux limites qui modifient la distribution homogène donnée par la relation précédente [2].

Berz et kuiken (1976) et Donolato (1979) ont étudié ces phénomènes. Leurs résultats montrent que les porteurs se répartissent de façon inhomogène dans le volume (Figure I.18). Ils atteignent une densité maximale  $\Delta p_{\max}$  telle que [2] :

$$\Delta p_{\max} = \frac{G}{4 \pi R D} \quad (\text{I.33})$$

Où D est le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires.



**Fig.I.18.** Courbes d'isoconcentration en fraction de  $\Delta p_{\max}$  donnée par (I.33) pour une vitesse de recombinaison de surface infinie [2]

### I.3.9.2. Détermination du niveau d'injection :

Cette densité maximale est utilisée pour estimer le taux d'injection lors de l'observation. Les conditions d'injection sont généralement déterminées par comparaison au taux de dopage du matériau étudié. Pour du silicium dopé 10 ohm.cm,  $N_d = 5.10^{14}/\text{cm}^3$ , soit à l'équilibre, des concentrations d'électrons  $n_0 = 5.10^{14} / \text{cm}^3$  et de trous  $p_0 = 2.10^5/\text{cm}^3$  qui satisfont la condition d'équilibre [2] :

$$n_0 \cdot p_0 = n_i^2 = 10^{20}/\text{cm}^6.$$

Sous bombardement électronique, les concentrations de porteurs, respectivement  $n$  et  $p$  dans les bandes de conduction et de valence, seront telles que [2] :

$$n = n_0 + \Delta n \qquad p = p_0 + \Delta p$$

Les conditions de faible injection requises pour l'observation seront satisfaites si :

$$\Delta n = \Delta p \ll n_0$$

Dans ces conditions, seule la concentration en porteurs minoritaires est affectée.

Lors d'une observation EBIC telle que  $E = 30 \text{ KeV}$  et  $I_b = 0.1 \text{ nA}$ , on a :

$$n = n_0 = 5.10^{14}/\text{cm}^3$$

$$p = \Delta p = 5.10^{13}/\text{cm}^3$$

Le nombre de porteurs minoritaires est 100 millions de fois supérieur comparé à l'équilibre alors que la concentration en majoritaires est pratiquement inchangée.

Dans ces conditions le courant collecté  $I_{cc}$  est de l'ordre de grandeur du microampère. Nous recueillons donc un signal de plusieurs ordres de grandeur supérieur au signal excitateur. L'échantillon se comporte alors comme un amplificateur de courant.

Remarquons que la densité de porteurs serait de l'ordre de  $10^{16}/\text{cm}^3$  si l'on avait considéré dans ce calcul la distribution homogène donnée par la relation (I.32).

## **I.4. Le silicium (Si) :**

### **"Sa physique, et sa technologie"**

#### **I.4.1. Introduction :**

C'est en 1823 que le silicium (un élément du **IV** groupe du système périodique) fut séparé de ses composés par le chimiste suédois Jöns Jakob Berzelius, mais il faut noter que dès 1787, Antoine Laurent de Lavoisier en avait soupçonné l'existence. L'origine du nom silicium vient du mot latin « *silicis* » signifiant « *silex* ». Et depuis ce temps là, il est connu comme l'élément semiconducteur le plus répandu.

Depuis l'invention du transistor bipolaire en 1947, un nombre considérable d'applications des matériaux semiconducteurs se sont développées. Le secteur de prédilection est l'électronique moderne. Il existe, par ailleurs, un nombre considérable de domaines d'applications différents des semiconducteurs. Ces applications sont fondées sur les propriétés physiques particulières de cette classe de matériaux, les propriétés optiques, thermiques, même mécaniques qui peuvent être influencées grâce au contrôle des nombres volumiques de porteurs de charge [37].

A l'origine du riche éventail des applications des semiconducteurs, il y a deux faits inégalés dans l'évolution de la science des matériaux. D'une part, la technologie du silicium a été poussée à des limites de perfection et de reproductibilité extraordinaires. La technologie du silicium fait ainsi intervenir des techniques et des procédés perfectionnés à un niveau rarement atteint en production industrielle sur le plan des qualités chimiques et structurales. Cette prédominance n'exclut pas des développements encore plus poussés d'autres semiconducteurs, mais cela en vue d'applications spécifiques et restreintes. D'ailleurs, de nombreux procédés relatifs aux autres matériaux se réfèrent, par analogie, à ceux connus pour le silicium. D'autre part, le silicium est le corps solide le plus étudié et le mieux compris sur le plan théorique. Qu'il s'agisse de théories fondées sur des principes fondamentaux, d'interprétations de résultats expérimentaux ou de mesures sophistiquées, un tel niveau de connaissance du silicium n'est atteint dans aucun cas connu de matériaux. D'ailleurs, dans plusieurs domaines de la physique du solide, les théories et modèles particuliers sont étudiés et établis en référence à ceux qui s'appliquent aux propriétés du silicium. La maîtrise de la qualité du silicium, le niveau élevé de

connaissance de ses propriétés et la stabilité de son oxyde sont donc à l'origine de l'utilisation de ce matériau dans des applications variées [37].

## I.4.2. La physique du silicium :

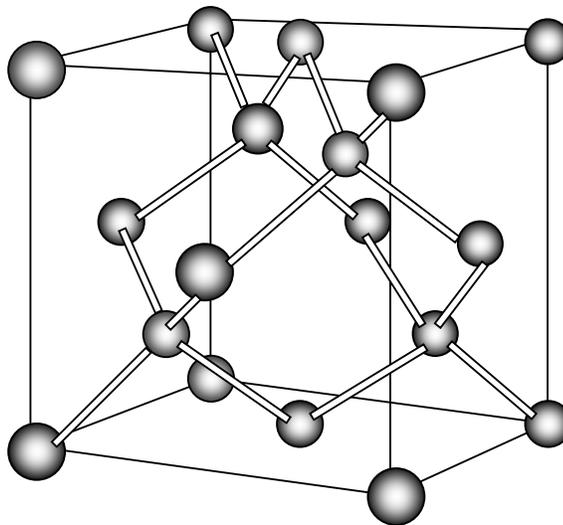
La physique des semiconducteurs est une partie de la physique du corps solide. A certains égards, la connaissance théorique des semiconducteurs, du silicium en particulier, dépasse de loin celle de la matière condensée et des matériaux en général. Cette maîtrise est due partiellement à la simplicité chimique et structurale des phases semionductrices. Le nombre d'électrons, sensiblement inférieur à celui d'un métal, est un facteur complémentaire de simplification [37].

### I.4. 2.1. Les propriétés du silicium :

#### I.4. 2.1.1. Propriétés structurales :

##### a. Structure cristalline :

Le silicium, le germanium et l'étain gris se cristallisent dans la structure du type diamant (fig.I.19).



**fig.I.19.**Structure cristalline du diamant [38]

Cette structure consiste en deux réseaux cubiques à faces centrées qui s'interpénètrent.

Chaque atome d'un des réseaux est entouré par quatre proches voisins équidistants de l'autre réseau, formant un tétraèdre, avec lesquels il échange ses quatre électrons de valence [37].

Les propriétés structurales du silicium ne sont pas limitées aux solides cristallins puisqu'il existe des structures amorphes comme le silicium hydrogéné déposés en couches minces dans un plasma de silane ( $\text{SiH}_4$ ) [37].

### **b. La liaison interatomique :**

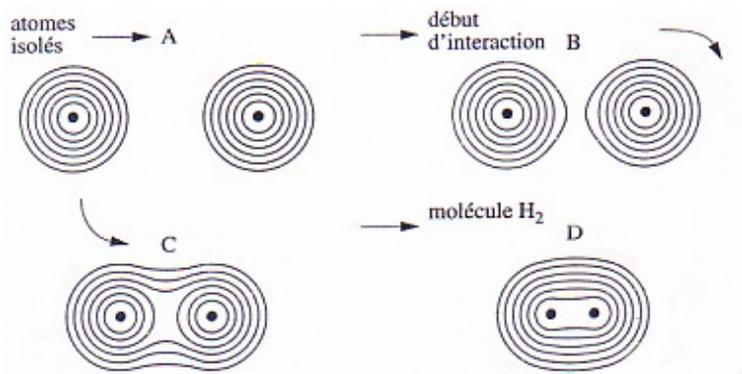
A base de la chimie moderne se trouve le concept de la liaison qui permet de décrire et de comprendre l'association d'atomes. Les types de liaison dépendent de la manière dont les électrons de valence s'agencent lorsque le solide est formé. Le critère essentiel est que dans le nouvel état lié, l'énergie totale du système doit être inférieure à celle avant liaison.

Une première classification fait état de liaisons fortes ou liaisons primaires et de liaisons faibles ou liaisons secondaires. Dans les premières, l'abaissement d'énergie par rapport à l'état non lié est fort important, tandis que dans les secondes il est beaucoup plus faible [38].

Il y a cinq types de liaisons : les liaisons métalliques, ioniques, covalentes, de Van der Waals, et celles d'hydrogène.

En général, les liaisons d'atomes dans un solide ne sont jamais exclusivement d'un seul type. Par exemple, des matériaux comme les semiconducteurs simples (Si, Ge), considérés comme covalents, sont partiellement liés métalliquement. Mais nous nous tiendrons compte uniquement que du caractère qui prédomine, c'est-à-dire, de la liaison covalente qui caractérise le silicium [38].

**La liaison covalente :** Dans la liaison covalente les électrons de valence de chaque atome se partagent avec ceux des proches voisins. Les deux électrons que se partagent deux atomes ont des spins antiparallèles et occupent la région entre les deux atomes liés faisant écran à la répulsion des deux noyaux. La combinaison de deux protons et de deux électrons nous permet d'illustrer ici (Figure.I.19) le principe de la liaison covalente à partir de la molécule d'hydrogène [38].



**Fig. I.19.** Principe de la liaison covalente illustré à partir de la combinaison de deux protons et de deux électrons dans la molécule d'hydrogène. [38]

D'un point de vue mécanique les matériaux covalents sont durs et cassants. Donc, le silicium, se clive difficilement. De même, du fait que la liaison est directionnelle, elle accepte difficilement les distorsions. D'un point de vue optique, cette liaison conduit à ce que le silicium soit transparent à l'infrarouge [38].

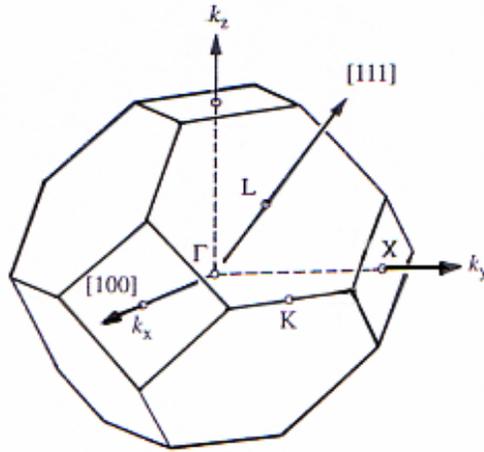
Il faut donc une énergie relativement élevée pour libérer un électron de valence, puisque pour ce faire il est nécessaire de briser une liaison. Un champ électrique modéré ne peut fournir cette énergie et de ce fait, les électrons ne répondent pas à ses sollicitations ; nous sommes en présence d'isolants électriques. Par contre, et dans d'autres cas, si les liaisons ne sont pas trop fortes, une proportion minime d'électrons peut être excitée thermiquement à haute température et donner lieu à une faible conductivité électrique, qui est bien le cas des semiconducteurs (Si,Ge). [38]

#### I.4. 2.1.2. Propriétés électroniques :

##### a. structure de bande :

Les propriétés électroniques fondamentales des semiconducteurs Si, Ge et GaAs sont décrites à partir de leur structure de bandes représentée dans le réseau réciproque. Ainsi que la structure cristalline des semiconducteurs classiques est décrite par un réseau de Bravais cubique faces centrées. Pour ce réseau, la zone de Brillouin est illustrée à la figure (I.20) avec les points de symétrie importants correspondant à des directions dans lesquelles la structure de bandes est représentée. Le point  $\Gamma$  est à l'origine du réseau

réciroque, au centre de la zone. Les directions  $\Gamma X$  ([100]) et  $\Gamma L$  ([111]) qui relient l'origine aux centres des faces de la zone sont les plus caractéristiques pour la structure de bandes au voisinage de la bande interdite.



**Fig.I.20.** Zone de Brillouin pour le réseau cubique faces centrées. Les caractéristiques importantes de la structure de bandes apparaissent dans les directions de haute symétrie [100] ( $\Gamma X$ ) et [111] ( $\Gamma L$ ). [37]

Pour le silicium, la structure de bandes  $E(k)$  est représentée à la figure (I.21) en fonction de  $k$  dans les deux directions choisies. L'origine de l'échelle des énergies est fixée au sommet de la bande de valence à  $k = 0$ . Le minimum de la bande de conduction se trouve dans la direction [100] à 85 % de la distance  $\Gamma X$ . La largeur de bande interdite à température ambiante vaut  $E_g = 1.1\text{eV}$  et augmente faiblement quand la température diminue (figure I.22). Le sommet de la bande de valence est dégénéré. En effet, à  $k = 0$ , trois bandes de courbures différentes coïncident. Les électrons qui occupent des états autour du minimum L sont les *électrons chauds*. Le retour à l'équilibre s'accompagne d'un retour des électrons chauds au minimum au centre de zone, avec émission de phonons en général (*thermalisation*) [37].

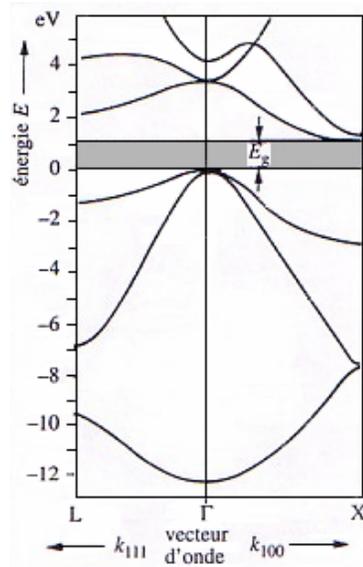


Fig.I.21. Structure de bandes d'énergie dans les directions [100] et [111] pour le silicium [37]

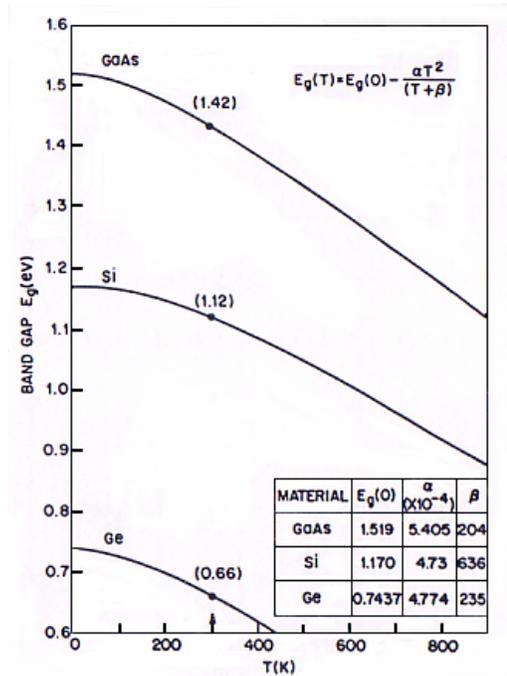


Fig.I.22. La largeur de la bande interdite est fonction de la température [35].

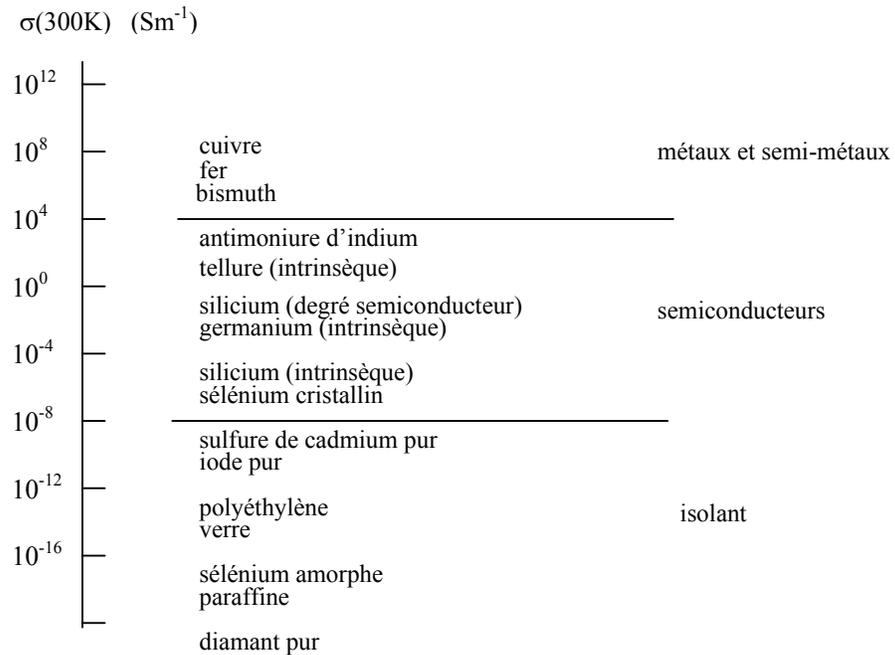
### b. Conductivité électrique :

Un conducteur possède des bandes partiellement remplies à 0 K. Un isolant, par contre, a une bande permise complètement pleine et la bande permise suivante complètement vide. Un semiconducteur n'est autre qu'un isolant ayant une bande interdite relativement étroite. La situation est donc la même pour le semiconducteur et l'isolant à la limite du

zéro absolu. Mais lorsque la température augmente, une conductivité électrique peut être observée dans le semiconducteur [38].

Donc l'expression semiconducteur suggère qu'il s'agit d'un cristal qui conduit l'électricité mieux qu'un isolant et moins bien qu'un métal. La conductivité électrique  $\sigma$  ou son inverse, la résistivité électrique  $\rho = 1/\sigma$ , sont des paramètres physiques qui pour le spectres des corps solides présentent l'un des plus vastes domaines de variation. De quelques  $10^{-16} \text{ sm}^{-1}$  pour le quartz pur ou certains milieux organiques, la conductivité peut atteindre  $10^9 \text{ sm}^{-1}$  dans les métaux nobles purs (Fig.I.23).

Sans que cela ne représente des limites rigides, les semiconducteurs ont des conductivités comprises entre  $10^{-6}$  et  $10^5 \text{ sm}^{-1}$ . Il est remarquable de trouver, par exemple, du silicium avec des valeurs de conductivité comprises entre  $10^{-2}$  et  $10^{-6} \text{ sm}^{-1}$



**Fig.I.23** : Conductivité électrique à température ambiante de quelques corps solides ; les limites entre les semiconducteurs et les métaux d'une part, les isolant d'autre part, ne sont pas strictes. [37]

Dans un semiconducteur, la conductivité électrique est donnée par l'équation générale :

$$\sigma = ne\mu_n + pe\mu_p \quad (\text{I.34})$$

Avec,  $\mu_n$  et  $\mu_p$ , sont respectivement la mobilité des électrons et celle des trous (ces deux paramètres sont représentés en fonction de la concentration des impuretés pour différents échantillons dans la figure I.24).

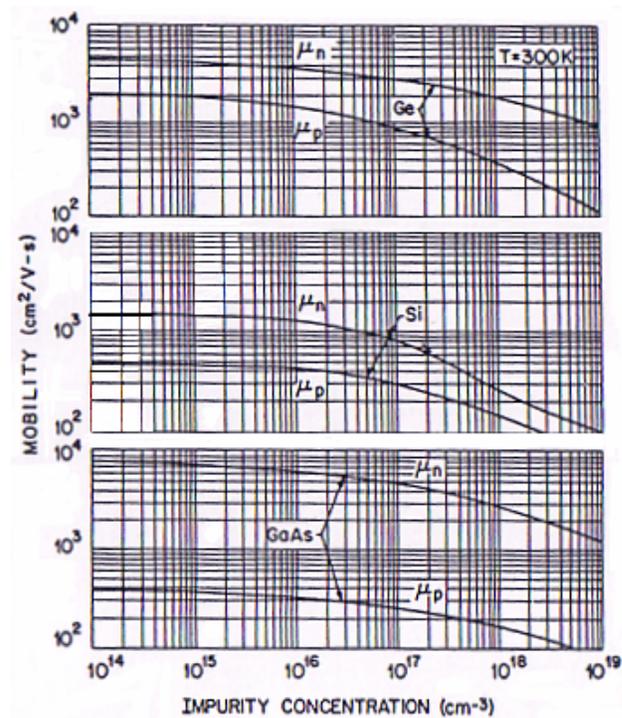


Fig.I.24. [35]

L'influence de la pureté des matériaux semiconducteurs est primordiale pour la grandeur de la conductivité électrique. En général, la conductivité électrique dépend, en outre, de la température, de la radiation électromagnétique, du champ magnétique et de toute forme d'irradiation et de défauts. Ce sont ces variations de la conductivité électrique, sous l'effet d'influences variées, qui font du silicium un matériau important pour l'électronique et ses applications [37].

Dans le sens où le silicium fait partie des matériaux diélectrique, il est polarisable. Placés dans un champ électrique, des échantillons de silicium sont donc le siège d'un champ électrique interne pour lequel la permittivité diélectrique  $\epsilon$  est le paramètre macroscopique déterminant. En conséquence, il est possible de définir le silicium (ou un autre matériau semiconducteur) comme un *corps solide polarisable et capable de conduire l'électricité* [37].

La figure (I.25) représente la resistivité d'un échantillon de silicium en fonction de la concentration volumique des impuretés à 300K.

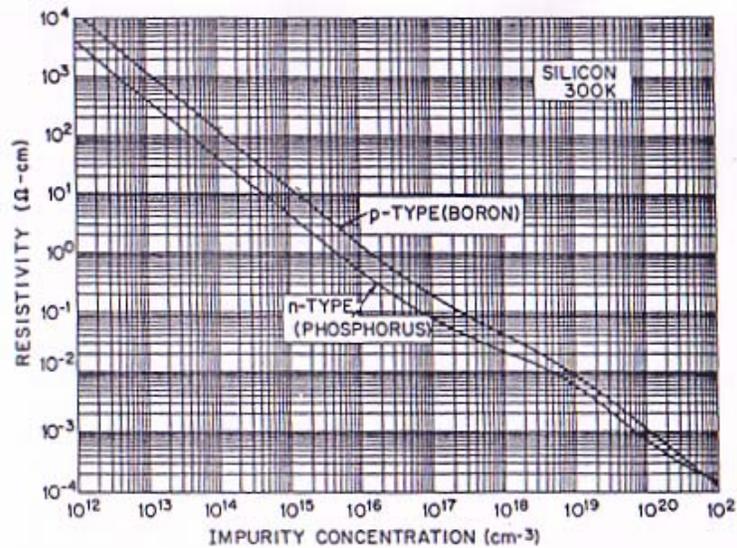


Fig.I.25. [35]

### ➤ Aspect corpusculaire :

Si lors de la solidification du silicium, tous les électrons de valence sont nécessaires pour assurer sa cohésion, c'est -à dire qu'ils sont tous utilisés pour former les liens de valence, on doit s'attendre à ce qu'au zéro absolu, tous les électrons soient localisés au voisinage des ions positifs. De ce fait, ils ne sont pas libres de se mouvoir à l'intérieur du cristal, contrairement au cas des métaux [38].

### α- semiconducteurs intrinsèques :

Si on chauffe un échantillon du silicium, certaines liaisons peuvent être rompues et les électrons ainsi libérés deviennent mobiles dans le réseau cristallin. Les électrons libres peuvent être accélérés par un champ électrique appliqué et conduire l'électricité. Il faut une énergie bien définie pour libérer un électron, de l'ordre de 1eV et cette énergie est en général de loin supérieure à l'énergie thermique moyenne qui est approximativement égal à  $K_B T$ , c'est -à- dire à **0,025eV** à température ambiante. Ici, la notion de statistique intervient. La statistique classique nous apprend que si l'énergie moyenne à **300 K** est de **0,025eV**, il existe une probabilité non nulle, bien qu'excessivement petite, de trouver dans la distribution une énergie très grande par rapport à  $K_B T$ , soit de l'ordre de **1eV**. C'est sur

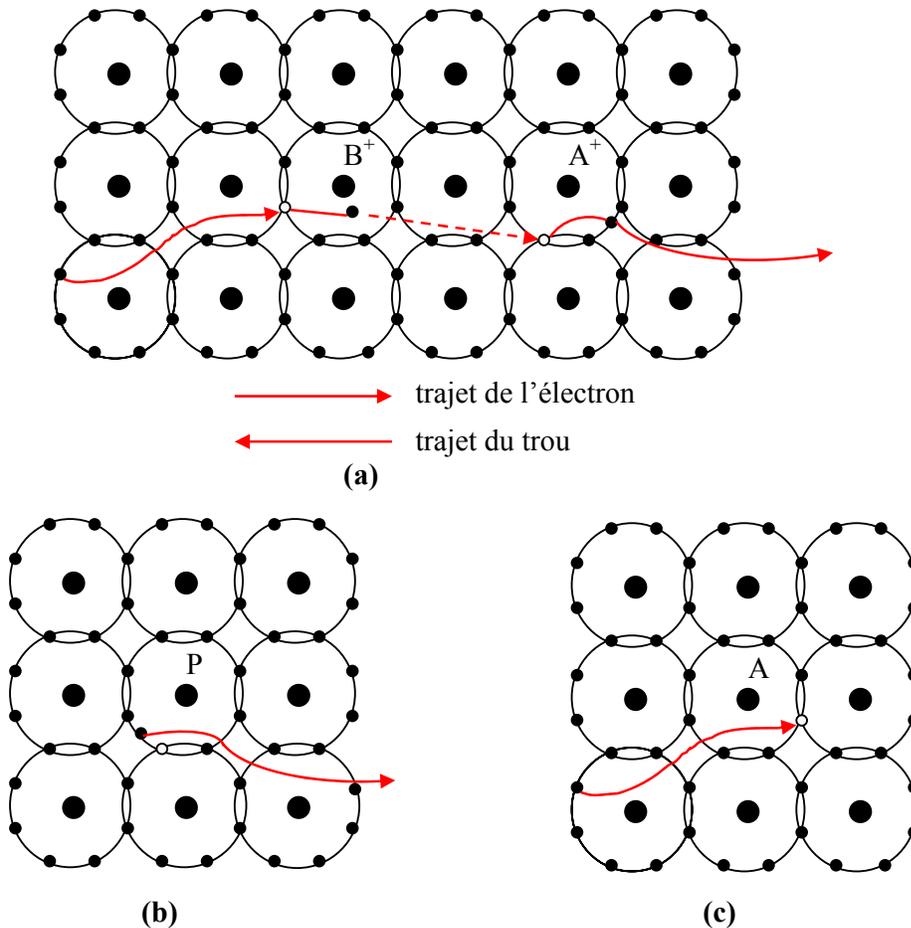
cette infime probabilité que se joue le sort des semiconducteurs et dont dépend la plupart de leurs propriétés électriques [38].

Dans le schéma corpusculaire (fig.I.26) cela se traduit par le fait que quelques liaisons covalentes puisent dans la distribution l'énergie nécessaire pour se briser et l'électron ainsi relâché peut se mouvoir librement dans le cristal, et éventuellement être accéléré par un champ électrique. De ce fait, au voisinage de l'atome A, d'où un électron vient de se libérer, il y a un excédent de charge positive qui peut éventuellement attirer un autre électron qui serait libéré de la même façon à partir d'un autre site B. Le mouvement de ce dernier électron de B vers A est équivalent au mouvement d'une charge positive fictive, le trou, de A vers B. C'est ainsi que dans un semiconducteur idéalement pur, la libération d'électrons est accompagnée de la libération d'un nombre égal de trous positifs, et les deux types de charge participent au courant électrique. Ce mécanisme est intrinsèque parce que nous n'avons tenu compte que des atomes du matériau de base. Le semiconducteur dans cet état est qualifié d'*intrinsèque*, tout comme la conductivité qu'on observe si on applique un champ électrique [38].

#### *$\beta$ -semiconducteurs extrinsèques :*

L'excitation intrinsèque que nous venons de décrire caractérise tous les semiconducteurs. Elle est très faible aux températures ordinaires dans le silicium. Pour qu'elle puisse dominer à toutes les températures, il faudrait que l'échantillon soit idéalement pur. Mais il serait de peu d'intérêt pratique, sauf pour quelques cas spécifiques, tels les détecteurs de particules [38].

La plupart des propriétés utiles sont en effet imputables aux impuretés introduites dans l'échantillon. Pour les obtenir, on introduit dans le réseau de base quelques atomes étrangers sélectionnés et dosés avec précision ; le *dopage*. Si nous introduisons des atomes pentavalents comme le phosphore, des centres apparaissent dans le cristal, c'est un dopage n (fig.I.26 (b)). En effet, les centres donneurs cèdent aisément un de leurs cinq électrons de valence puisque seuls quatre sont nécessaires à la liaison covalente que forme l'impureté avec les atomes du réseau de base. Il est beaucoup plus facile de libérer l'électron excédentaire que dans le cas intrinsèque. En effet, cette fois l'énergie requise ne doit pas servir à rompre une liaison covalente, mais seulement à surmonter l'attraction coulombienne qui s'exerce entre l'électron excédentaire et l'ion d'impureté [38].



**Fig.I.26.** Schéma corpusculaire montrant le mécanisme de conduction intrinsèque (a) et extrinsèque (b) et (c) de conduction dans les semiconducteurs [38].

Si nous dopons le cristal avec des atomes trivalent comme l'aluminium (fig.I.26(c)), il n'est plus possible de réaliser une liaison complète avec les atomes voisins à cause de l'absence de l'un des électrons de valence. Nous créons ainsi un centre accepteur pouvant accueillir un électron de valence pris sur un atome voisin A, appartenant au réseau de base. L'emplacement se charge alors négativement et l'excès de charge positive en A résultant du déplacement de l'électron de son site initial peut attirer un autre électron du site B vers A créant un excès de charge positive en B et ainsi de suite. Le déplacement de l'électron de B vers A est équivalent au mouvement d'un trou de A vers B. La conduction dans ce cas se fait par trou, on a un semiconducteur de type *p*. Nous voyons donc que la conductivité extrinsèque est aussi fort sensible à la température et que l'excitation d'électrons ou de trous à partir de centres donneurs ou accepteurs nécessite des énergies

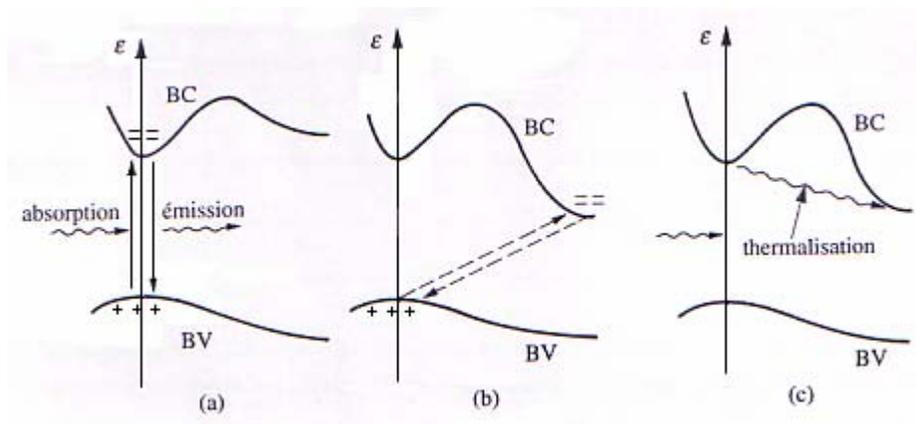
beaucoup moins élevées, donc des températures beaucoup plus basses, que pour l'excitation intrinsèque. [38].

#### I.4. 2.1.3. Propriétés optiques :

L'interaction du rayonnement électromagnétique avec le corps solide se traduit par des phénomènes de réflexion, de diffusion, et en particulier, d'absorption.

Dans le cas des semiconducteurs à bande interdite directe. Quand un électron de la bande de valence absorbe un photon de vecteur d'onde  $K_{ph}$  et d'énergie  $E_{ph}$ , son énergie augmente de  $E_{ph}$  et son vecteur d'onde  $K$  n'est pratiquement pas modifié car  $K_{ph} \ll K$ . La transition verticale est illustrée sur la figure (I.27), peut s'effectuer par absorption d'un photon, ou par émission de photons au cours de la transition bande conduction  $\rightarrow$  bande de valence. Il est donc possible de peupler la bande de conduction par irradiation avec la lumière de longueur d'onde convenable et d'obtenir une inversion de population. On peut ainsi réaliser des diodes lumineuses, qui émettent un rayonnement par transitions radiatives spontanées de la bande de conduction préalablement peuplée vers la bande de valence [38].

Par contre, et comme on a déjà vu, le silicium cristallin massif à une bande interdite indirecte (fig.I.21) et ce matériau n'est donc pas luminescent. Des transitions non radiatives d'électrons à travers la bande interdite sont cependant possibles, mais elles requièrent un échange de quantité de mouvement avec les phonons (fig.I.26 (b)).



**Fig.I.27.** Transition électronique entre bande de valence et bande de conduction : (a) transitions radiatives dans un semiconducteur à bande interdite directe ; (b) transitions non radiatives dans un semiconducteur à bande interdite indirecte ; (c) absorption de photons dans un semiconducteur à bande interdite indirecte, puis thermalisation des électrons excités dans la bande de conduction

(D'après H. Mathieu 1987 [39])

Il est cependant toujours possible d'absorber des photons dans des transitions verticales de la bande de valence vers la bande de conduction (fig.I.27 (c)). Les électrons ainsi injectés dans la bande de conduction ont une énergie supérieure au minimum d'énergie de cette bande. Ils peuvent perdre progressivement cette énergie par interaction avec les phonons (thermalisation). Ce processus d'absorption de lumière est mis à profit dans les systèmes de conversion de l'énergie solaire en énergie électrique, utilisant le silicium cristallin (conversion photovoltaïque) [38].

Il faut également souligner qu'un travail de recherche intense est consacré au **silicium poreux**, obtenu par attaque électrochimique de silicium *cristallin*, dans de l'acide fluorhydrique. Ce matériau se présente sous forme de filaments cristallins très fins, dont le diamètre est de l'ordre de 30 Å, et présente la particularité d'être photoluminescent : irradié avec de la lumière ultraviolette (qui provoque des transitions directes entre la bande de valence et la bande de conduction), le silicium poreux luminesce de la lumière rouge-orange (par transition directe bande de conduction → bande de valence). Ce matériau présente donc une bande interdite directe, qui est par ailleurs supérieure à la bande interdite du silicium cristallin massif. Cette propriété du silicium poreux permettra vraisemblablement de l'utiliser comme émetteur optique dans des circuits intégrés « tout silicium » alors qu'actuellement on est obligé de faire appel à d'autres semi-conducteurs, GaAs par exemple. L'explication de la photoluminescence du silicium poreux n'est pas encore tout à fait claire. Des calculs détaillés montrent que le confinement quantique des électrons dans des filaments cristallins de faible diamètre augmente la bande interdite et la rend directe. D'autres interprétations attribuent la photoluminescence du silicium poreux à la modification de la structure de surface du matériau (par exemple par formation de composés polymériques  $\text{Si}_6\text{O}_3\text{H}_6$  appelés siloxènes) [38].

#### **I.4.2.2. Contact métal/semiconducteur (M/S), le modèle de Schottky :**

Le contact métal/semiconducteur est le dispositif unipolaire le plus simple à la base d'un nombre considérable de composants électroniques, par exemple des circuits intégrés et des mémoires. Dans un **dispositif unipolaire**, un seul type de porteurs de charge, les électrons ou les trous, participe de façon prédominante aux phénomènes de conduction électrique et détermine le fonctionnement. Les dispositifs à contact métal/semiconducteur (M/S) sont particulièrement bien adaptés à la technologie moderne du silicium. La structure est réalisée, par exemple en ouvrant une fenêtre dans une couche d'oxyde isolant

sur le semiconducteur puis en déposant, sous vide, un film métallique qui couvre la fenêtre et entre en contact intime avec la surface du semiconducteur [37].

Généralement, l'application d'une différence de potentiel à une jonction métal/semiconducteur produit une caractéristique courant/tension qui n'est pas symétrique. Le contact se comporte comme un redresseur. Le modèle de Schottky suggère que ce comportement est provoqué par l'établissement d'une barrière de potentiel dont l'origine est une couche de charge d'espace dans le semiconducteur. Ainsi, une jonction métal/semiconducteur qui présente une caractéristique courant/tension asymétrique est appelée *diode Schottky* [37].

Certains contacts métal/semiconducteur peuvent également présenter une caractéristique courant/tension symétrique, c'est-à-dire un comportement non redresseur. Ces contacts sont alors dits ohmiques. La maîtrise des contacts ohmiques est capitale pour pouvoir réaliser l'inter-connection des différents dispositifs d'un circuit intégré d'un système électronique, en général.

Le modèle de Schottky associe la hauteur de barrière à la différence des travaux d'extraction respectifs du métal  $\phi_m$  et du semiconducteur  $\phi_s$  en contact. La définition du travail d'extraction en tant que différence d'énergie entre le niveau du vide (électron à l'infini) et le niveau de Fermi (électron dans le solide) s'applique bien à un métal. Pour un semiconducteur, le travail d'extraction dépend du niveau de Fermi qui, lui, dépend du dopage. L'affinité électronique est plus représentative : *c'est la différence d'énergie entre le niveau du vide et le fond de la bande de conduction d'où est extrait l'électron en général*. L'affinité électronique ne dépend pas du dopage tant que le semiconducteur reste non dégénéré. Après la mise en contact intime du métal et du semiconducteur, à l'équilibre, les niveaux de Fermi respectifs s'alignent comme cela est illustré à la figure (I.28) dans un diagramme de bande d'énergie. Pour le flux d'électrons qui va du semiconducteur dans le métal, la hauteur de barrière prévue par le modèle de Shottky vaut

$$eU_b = e(\phi_m - \phi_s) \quad (\text{I.35})$$

C'est la différence des travaux d'extraction. Pour le flux inverse des électrons du métal vers la bande de conduction du semiconducteur, la hauteur de barrière vaut :

$$e\phi_{bn} = e(\phi_m - \chi) \quad (\text{I.36})$$

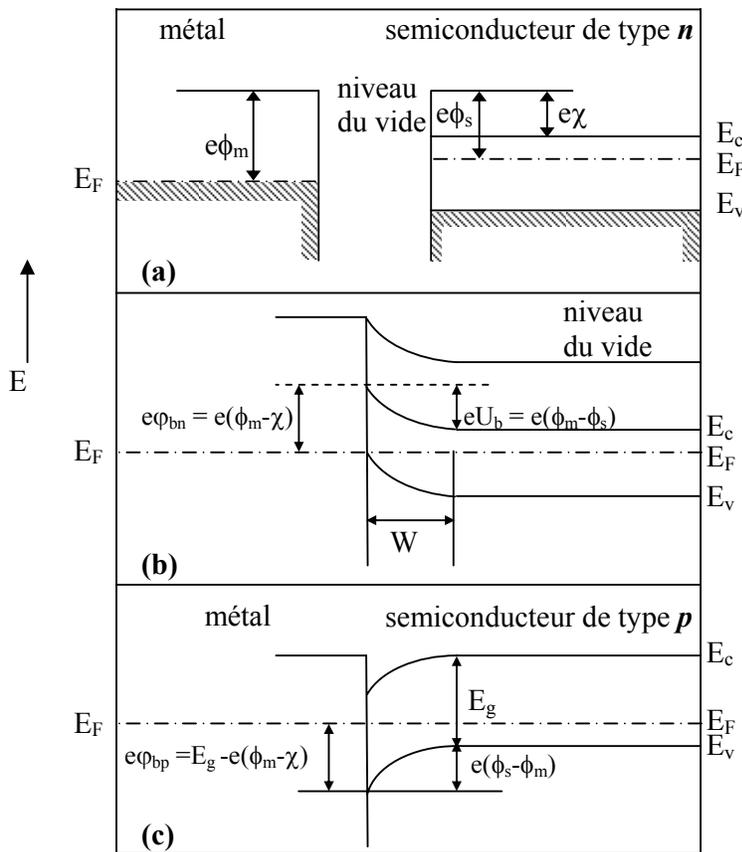
C'est la différence entre le travail d'extraction du métal et l'affinité électronique du semiconducteur.

Le modèle de Schottky traite le contact idéal entre un semiconducteur de type p et un métal de manière équivalente. Le niveau de Fermi est dans la partie inférieure de la bande interdite de sorte que le travail d'extraction du semiconducteur  $\phi_s$  est en général supérieur à celui de métal  $\phi_m$ . Le pilage des bandes se manifeste vers le bas. La hauteur de barrière pour les porteurs majoritaires dans le semiconducteur, les trous, vaut  $e(\phi_s - \phi_m)$ .

La hauteur de barrière pour les électrons du métal vaut [37] :

$$e\phi_{bp} = E_g - e(\phi_m - \chi) \quad (I.37)$$

où  $E_g$  est la largeur de bande d'énergie interdite.



**Fig.I.28.** Contact métal/semiconducteur : (a) avant le contact ; (b) contact avec semiconducteur dopé de type  $n$  ; (c) contact avec semiconducteur dopé de type  $p$  [37] .

Le modèle prédit donc que pour un semiconducteur précis et pour tout métal, la somme des hauteurs de barrière sur un substrat dopé de type respectivement  $n$  et  $p$  est égale à la largeur de bande interdite [37] :

$$e(\phi_{bn} + \phi_{bp}) = E_g \quad (I.38)$$

En pratique, l'existence d'états de surface qui agissent en tant que donneurs ou accepteurs modifie la valeur de la hauteur de barrière calculée à l'aide de l'expression (I.36). Le modèle de Schottky sous-estime la hauteur de barrière du semiconducteur dopé de type  $n$  et surestime celle du semiconducteur dopé de type  $p$ . Cependant, la somme des deux hauteurs de barrière reste environ égale à la largeur de bande interdite conformément à la relation (I.38).

Les prédictions du modèle de Schottky sont difficiles à évaluer à cause de la difficulté expérimentale de mesurer les travaux de sortie des métaux et des semiconducteurs. Par exemple, lorsqu'un électron est émis à la surface d'un corps solide, une force de rétention se manifeste. Cette force est équivalente à celle d'une force image qui dérive d'un potentiel image. La description de cette force est un sujet classique de l'électrodynamique et des conditions de continuité à l'interface [37].

En outre, une mesure du travail d'extraction nécessite l'application d'un champ électrique à l'extérieur de la surface du solide dont l'intensité décroît linéairement lorsqu'on s'éloigne de la surface. Qualitativement, la variation d'énergie électrostatique d'un électron en fonction de son éloignement de la surface du métal permet d'évaluer le travail d'extraction. Sous l'action conjuguée du potentiel image et du champ électrique, le travail d'extraction observé  $\phi_B$  est réduit. Cette situation se trouve dans une hétérojonction : la barrière de potentiel établie à l'interface est réduite sous l'effet du potentiel image et du champ électrique. Dans le cas de la jonction métal/semiconducteur de type  $n$ , l'abaissement de la hauteur de barrière pour un champ électrique de  $5 \cdot 10^6 \text{ Vm}^{-1}$  est de l'ordre de 25 meV (Au/ Si) [37].

Dans une jonction métal/semiconducteur sous tension, le courant électrique est essentiellement dû au transport de charge effectué par les porteurs majoritaires. Ce fonctionnement contraste notamment avec la jonction  $p-n$  dans laquelle le courant est principalement porté par les minoritaires. Dans une diode de Schottky standard (dopage du semiconducteur Si de type  $n$  :  $N_d \approx 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ), à température ambiante, le mécanisme de transport dominant est celui de l'émission thermoïonique des porteurs majoritaires du semiconducteur dans le métal. En situation d'équilibre, les courants partiels d'électrons du semiconducteur dans le métal et inversement du métal dans le semiconducteur s'équilibrent. Ces courants sont proportionnels au nombre volumique de porteurs à l'interface.

Le nombre de porteurs dans la partie homogène du semiconducteur est [37] :

$$n_n \approx N_d \quad (\text{I.39})$$

alors qu'à l'interface :

$$n_s \approx N_d \exp(-e U_b / kT) \quad (\text{I.40})$$

L'application d'une différence de potentiel  $U$  dans le sens direct se développe principalement dans la zone de charge d'espace à résistance plus élevée. Elle réduit la barrière de potentiel à travers la jonction. Le nombre volumique d'électrons à l'interface augmente :

$$n_s \approx N_d \exp[-e(U_b - U) / kT] \quad (\text{I.41})$$

Le courant d'électrons du semiconducteur dans le métal est augmenté d'autant, alors que le courant d'électrons du métal dans le semiconducteur reste le même puisque la hauteur de barrière  $-e\phi_{bn}$  n'est pas affectée par la tension appliquée. On retrouve pour la densité de courant à travers la jonction métal/semiconducteur une expression [37] :

$$J = J_s (\exp(eU/kT) - 1) \quad (\text{I.42})$$

où

$$J_s = A^* T^2 \exp(-e\phi_{bn} / kT) \quad (\text{I.43})$$

$J_s$  est la densité de courant à saturation et  $A^*$  la constante de Richardson effective. Les valeurs de  $A^*$  dépendent de la masse effective du semiconducteur. Pour le silicium de type n,  $A^*$  vaut environ  $10^6 \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-2}$ . La tension  $U$  est positive dans le sens passant (métal positif) et négative dans le sens inverse.

La zone de charge d'espace du côté semiconducteur à résistance élevée est à l'origine de la capacité de la jonction métal/semiconducteur. Il est possible d'assimiler le contact métal/semiconducteur à une jonction  $p^+n$  abrupte. La largeur de la zone de charge d'espace, dans le cas  $N_a \gg N_d$  [33]:

$$W = [2 \epsilon_s (U_b - U) / eN_d]^{1/2} \quad (\text{I.44})$$

$\epsilon_s$ : la permittivité du semiconducteur

Compte tenu de la tension inverse ( $U < 0$ ) appliquée qui tend à allonger la zone de déplétion. La capacité sous tension inverse vaut ainsi [35]:

$$C = (\epsilon_s / W) \cdot [e \epsilon_s N_d / 2 (U_b - U)]^{1/2} \quad (\text{I.45})$$

Par unité d'aire de la jonction. On retrouve également la relation :

$$C^{-2} = 2 (U_b - U) / 2 \epsilon_s N_d \quad (\text{I.46})$$

Ainsi, une mesure de la capacité en fonction de la tension inverse appliquée permet de déterminer expérimentalement la densité de dopage  $N_d$  et les hauteurs de barrière de potentiel  $U_b$  et  $\phi_{bn}$ , car la situation du niveau de Fermi sous le fond de la bande de conduction se déduit de la densité de dopage :

$$e\phi_{bn} = eU_b + (E_c - E_F) \quad (\text{I.47})$$

### **I.4.3. La technologie du silicium :**

La technologie des semiconducteurs et plus spécialement celle du silicium est l'une des plus poussées dans l'univers des matériaux. Les perfectionnements chimique et structurale du silicium sont vraisemblablement uniques. Leurs influences sur les propriétés électriques et optiques sont manifestes. Les procédés de fabrication sont multiples et variés ; ils répondent à des exigences extrêmes (propreté, précision, contrôles, etc.) [37]

#### **I.4.3.1. Importance technologique du silicium :**

Les cristaux massifs de silicium sont les matériaux de base pour la fabrication de structures et de dispositifs à semiconducteurs comme les circuits intégrés, les mémoires, ...etc. De façon générale et au-delà de ses propriétés électroniques, le silicium est important car il est non toxique et abondant. Il est extrait de la silice  $\text{SiO}_2$  qui entre à plus de 50% de la croûte terrestre. L'oxyde de silicium est stable, par opposition par exemple à l'oxyde de germanium  $\text{GeO}_2$  qui est soluble dans l'eau et se dissocie au voisinage de  $800^\circ\text{C}$ . Le couple semiconducteur (Si)/isolant ( $\text{SiO}_2$ ) est donc bien adapté aux structures des dispositifs de l'électronique [37].

Les procédés de fabrication des circuits intégrés utilisent des plaquettes (*wafers* en anglais) de silicium monocristallin. Elles sont formées d'un seul grain, sans défaut de structure et avec des distributions d'impuretés contrôlées, homogènes et susceptibles d'être abaissées pour atteindre des puretés remarquables qualifiées de « onze neufs » 99,999999999%. Les plaquettes cylindriques ont quelques dixièmes de millimètres d'épaisseur. La tendance à l'augmentation du nombre de circuits fabriqués sur une plaquette a stimulé la recherche de la miniaturisation des structures et l'utilisation des plaquettes de grand diamètre. Cela implique d'élaborer des monocristaux de grand diamètre, dans lesquels elles sont découpées. Des diamètres de l'ordre de 150-200 mm sont courants depuis plusieurs années. Extrait de la silice, le silicium passe par une succession de procédés variés qui conduisent aux plaquettes puis à la fabrication des dispositifs, en particulier des circuits intégrés [37]. L'exigence d'une haute pureté ou de

distributions homogènes d'impuretés et d'un degré élevé de perfection structurale constitue un levier puissant d'amélioration de chaque pas de procédé. Les différentes étapes sont résumées au tableau I.3 [37].

Procédés de la microélectronique	
quartz / silicate $\text{SiO}_2$	
↓	<i>réduction carbothermique</i>
silicium métallurgique (MG-Si)	
↓	<i>hydrochlorisation</i>
trichlorosilane ( $\text{Si HCl}_3$ )	
↓	<i>réaction pyrolytique réductive</i>
polysilicium de qualité semiconducteur (SG-Si)	
↓	<i>méthode Czochralski (CZ) méthode zone flottante (FZ)</i>
silicium monocristallin	
↓	<i>mise en forme, usinage des plaquettes (wafers)</i>
plaquette de silicium poli	
↓	<i>traitement « getter »</i>
↓	<i>croissance épitaxiale</i>
↓	<i>fabrication de microcircuit</i>
↓	<i>usinage, montage</i>
circuit intégré	

**Tableau I.3**

### **I.4.3.2. Préparation du silicium de qualité semiconducteur :**

Le minerai dont le silicium est extrait est la silice ou quartzite  $\text{SiO}_2$ . La première opération consiste à réduire la silice fondue. On utilise des fours à arc à électrodes immergées pour fondre un mélange de silice et de carbone sous la forme charbon, à une température de 1500 à 2000° C. Après refroidissement, les morceaux de silicium ainsi obtenus sont d'un degré de pureté métallurgique (MG-Si), correspondant à une pureté de l'ordre de 98–99 %. Les impuretés encore présentes, les plus critiques par leur quantité et par leur influence sur les propriétés électriques sont Al, Ca, Fe, Ti, V. en outre, la présence d'agents de dopage évident comme B et P fréquente. Un four produit 10<sup>4</sup> tonnes par an avec une consommation d'énergie de 12 à 14 kWh / kg. Moins de 1% de la production mondiale de MG-Si est réservé en vue de sa purification et de son utilisation dans

l'industrie électronique [37]. Afin d'en faire un élément de qualité « semiconducteur » (SG- Si), plusieurs méthodes sont utilisées. Parmi ces méthodes, il y a celle qui est appelée procédé Siemens, mais elle présente plusieurs désavantages. Son efficacité est faible, elle consomme beaucoup d'énergie à cause des températures élevées nécessaires et la pureté du polysilicium obtenu n'est pas assez acceptable.

D'autres procédés ont été développés afin d'obtenir du silicium avec des propriétés spécifiques et compte tenu de facteurs d'efficacité. Par exemple, du silicium de haute pureté peut être fabriqué à partir du monosilane par l'intermédiaire du siliciure de magnésium [37].

### **I.4.3.3. Application de l'EBIC sur des échantillons de Si :**

Les effets d'irradiations par faisceau d'électrons sur le Si se classent généralement, suivant que l'énergie du faisceau incident est dans la gamme des MeV ou des KeV, en deux catégories : Le premier type d'irradiation ne nous concerne pas. Signalons simplement que celui-ci peut causer des dommages structuraux au matériau sachant que l'énergie transférée d'un électron vers l'atome de silicium peut le déplacer de son site. Les énergies utilisées en EBIC appartiennent plutôt à la deuxième catégorie. L'exposition d'une diode Schottky à une dose de  $4,4 \cdot 10^{15}$  e/cm<sup>2</sup> ayant une énergie de 10keV conduit à une réduction considérable des propriétés photovoltaïques de la diode. Ces propriétés sont restaurées après un recuit de l'échantillon de 15mn à une température de 200°C [40]. Quant à la nature même des défauts créés, on suggère que le bombardement par des électrons de quelques keV peut casser directement des liaisons Si-Si et conduire donc à la formation, d'un défaut de liaison pendante qui agit comme centre recombinant. Un argument expérimental qui vient consolider cette remarque, est la diminution du signal de photoluminescence mesuré sur les zones fortement irradiées. Par ailleurs, il faut noter qu'un recuit des dispositifs à la température de dépôt permet de supprimer le contraste et redonne au courant EBIC une valeur voisine de celle qu'il avait avant l'irradiation [1].

Donc, pour assurer une étude EBIC non destructive, il faut prendre les précautions qui minimisent les effets indésirables.

## I.5. La méthode Monté Carlo

### I.5.1. Introduction :

Bien souvent, les problèmes scientifiques conduisent à l'évaluation d'intégrales ou de sommes ainsi qu'à la résolution d'équations différentielles ou intégrales.

En général, les calculs analytiques exacts des intégrales ne sont pas réalisables directement. De même les sommes doivent parfois être effectuées sur un nombre de termes trop important pour espérer les comptabiliser. On fait alors appel à des méthodes d'approximation. Parmi les plus couramment utilisées, on retrouve les méthodes classiques d'analyse numérique. Efficaces en une dimension, ces techniques s'avèrent rapidement sans intérêt dès que la dimension augmente. Or le nombre de variables pour certains problèmes est très grand et peut même s'avérer si important que les progrès envisageables du calcul informatique ne seront probablement jamais suffisants pour rendre ces techniques intéressantes.

Dans cette optique, une méthode de simulation statistique, méthode dite de « **Monte Carlo** », est très prometteuse puisque sa vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème posé. En revanche elle fournit non pas la solution numérique du problème, mais un intervalle de confiance la contenant avec une probabilité donnée.

### I.5.2. Historique :

Les techniques de Monte Carlo ont été utilisées depuis plusieurs siècles, même si ce n'est qu'après la seconde guerre mondiale qu'elles ont acquis un véritable statut de méthode. Des chercheurs isolés ont cependant utilisés bien avant des méthodes statistiques du même genre : par exemple, Halle pour la détermination expérimentale de  $c$  (1873), ou Kelvin dans une discussion de l'équation de Boltzmann (1901). L'utilisation systématique, par Ulam, Metropolis et Von Neumann notamment, est intervenue à Los Alamos, pendant la préparation de la bombe atomique, où ont collaboré de nombreux mathématiciens et physiciens de renom. L'appellation " Monte Carlo" date des alentours de 1944. Cette dénomination est due à Metropolis, inspiré de l'intérêt de Ulam pour le poker, car Monte Carlo est un grand centre de jeux, et a pour origine les similarités avec les roulettes de hasard.

Le travail à Los Alamos consistait à simuler directement les problèmes de dispersion et d'absorption de neutrons pour les matériaux fissibles. Les recherches étant bien évidemment secrètes à Los Alamos, mais au cours de l'immédiat après-guerre, Von Neumann, Fermi et Ulam avertirent le public scientifique des possibilités d'application de la méthode Monte Carlo (par exemple, pour l'approximation des valeurs propres de l'équation de Schrödinger). Une autre étude systématique en fut faite par Harris et Hermann Khan 1948.

Après une éclipse due à une utilisation trop intensive pendant les années 1950, la méthode de Monté Carlo est revenue en faveur pour qu'elle sera utilisée fréquemment et dans de nombreux domaines, et même pour des problèmes où elle n'étaient pas la plus adaptée (sciences économiques, prévisions électorales, etc....) partout où il est fructueux d'employer des procédés de simulation.

### I.5.3. Efficacité de la méthode Monte Carlo :

Tout système régi en tout ou en partie par le hasard nécessite que sa modélisation soit réalisée en utilisant des nombres aléatoires. Ces nombres sont utilisés pour trouver une solution qui dans certains cas n'est pas aléatoire.

En répétant l'expérience  $n$  fois on peut évaluer la dispersion (ou variance) des estimations de Monte Carlo par la relation [41] :

$$\sigma^2 = \left[ \sum_{k=1}^n (P_k - P)^2 \right] / [n(n-1)] \quad (\text{I.48})$$

Avec :

$$P = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n P_k \quad (\text{I.49})$$

$\sigma^2$  : La dispersion des estimations.

$P$  : facteur moyen des estimations.

$n$  : nombre d'expériences.

La méthode de Monte Carlo est d'autant plus efficace que la dispersion est plus petite. Mais il est bien évident que la dispersion diminue si le nombre d'épreuves dans

chaque expérience croit, c'est-à-dire si le temps de calcul  $T$  croit. Donc la méthode est d'autant plus efficace, que  $T$  est petit pour  $\sigma^2$  donnée.

Finalement l'efficacité de la méthode peut se mesurer par [41] :

$$\text{Efficacité} = \frac{1}{T\sigma^2} \quad (\text{I.50})$$

#### **I.5.4. Nombres aléatoires :**

##### **I.5.4.1. Nombres aléatoires et pseudo-aléatoires :**

Nous avons vu que la méthode Monte Carlo est basée sur l'utilisation des nombres aléatoires, c'est-à-dire tirés au sort. Cette expression nous éloigne un peu du sens du terme aléatoire, dans la mesure où tout nombre n'est pas en soi un résultat d'un événement lié au hasard. Il existe toutefois des méthodes pour énoncer des séquences de nombres de telle manière que ces nombres n'apparaissent pas liés entre eux par la raison humaine. Lorsqu'on utilise un ordinateur, on construit des nombres pseudo-aléatoires ; ils diffèrent des nombres aléatoires en ce que, lorsque le ou les premiers sont arbitrairement choisis, toute la suite est complètement déterminée, la séquence est alors reproductible, ce qui permet de vérifier les programmes dans lesquels ils sont utilisés. Le point important est que leurs propriétés sont identiques à celles des nombres aléatoires. Ceci en fait ne peut être prouvé, mais on peut soumettre les nombres pseudo-aléatoires aux mêmes tests que les nombres aléatoires, et les utiliser si les tests sont satisfaits [41]. (Pour ce la, on va considéré les nombres pseudo-aléatoires comme des nombres aléatoires).

##### **I.5.4.2. Génération de nombres aléatoires :**

L'outil de base de la génération de nombres aléatoires en général consiste en une séquence de nombres aléatoires indépendants et identiquement distribués selon la loi uniforme sur l'intervalle  $[0,1]$  :  $g_i \rightarrow U(0,1)$ .

Les premières méthodes de génération de nombres aléatoires découlaient de processus physiques. Un des premiers schèmes proposés impliquait de lire le bottin téléphonique pour extraire les suffixes de quatre chiffres de toutes les entrées du bottin, en ordre alphabétique. On accole une virgule décimale à gauche d'une séquence de quatre ou huit chiffres (deux numéros), et voilà un nombre aléatoire. D'autres procédés de hasard, tels le lancement de déséquilibrés, l'utilisation de roulettes, l'observation de phénomènes électroniques ont aussi été utilisés.

L'effort de génération des nombres aléatoires à l'aide de ces appareils physiques, en plus du besoin de reproductibilité des séquences de nombres générées, a amené au développement de tables de nombres aléatoires. Plusieurs tables ont été publiées comme la table de Tippett, qui comportait 41600 chiffres, soit de quoi produire 5200 nombres précis à huit décimales. On peut citer aussi, celle de Kendall et Babbington-Smith de 100000 chiffres, donnant ainsi 12500 nombres de huit décimales. Les efforts de tabulation ont été portés à leur comble par la compagnie Rand, qui a produit une table d'un million de chiffres, soit 125000 nombre aléatoires, à trente lignes par page et 50 chiffres par ligne, cette page entre dans un volume de plus de 666 pages.

On voit ici le principal problème de la tabulation des valeurs aléatoires : ces tables occupent un espace désagréablement grand, surtout considérant la quantité relativement petite de nombres aléatoires que la table contient. En effet, le temps nécessaire à l'obtention d'un nombre aléatoire deviendrait très grand, et cela tuerait horriblement la performance d'un programme de simulation.

Pour tous ces désavantages, des méthodes numériques on été utilisées pour générer des nombres aléatoires, qu'on va essayer de détailler quelques uns.

#### I.5.4.2.1. Méthodes indirectes :

##### a- méthode de congruence (génération à récurrence linéaire modulo) :

La méthode la plus simple et la plus couramment utilisée est la méthode des congruences linéaires. Cette méthode consiste à générer une suite  $(x_n)_{n \geq 0}$  de nombres entiers compris entre 0 et  $m - 1$  de la façon suivante :

$$\begin{cases} x_0 = \text{la valeur initiale} \in \{0, 1, \dots, m-1\} \\ x_{n+1} = (a x_n + b) \bmod m \end{cases} \quad \text{(I.51)}$$

On appelle  $m$  (le module),  $a$  (le multiplicateur),  $b$  (l'incrément) et  $x_0$  (la racine ou graine).

Où  $a, b$  et  $m$  sont des nombres entiers qu'il faut choisir soigneusement si l'on veut que les caractéristiques statistiques de la suite soient satisfaisantes.

Sedgewick préconise le choix suivant :

$$\begin{cases} a = 31415821 \\ b = 1 \\ m = 10^8 \end{cases}$$

Cette méthode permet de simuler des entiers pseudo aléatoires entre 0 et  $m-1$  ; pour obtenir un nombre réel aléatoire entre 0 et 1 on divise l'entier aléatoire ainsi généré par  $m$ .

Le générateur précédent fournit des résultats acceptables dans les cas courants.

Cependant sa période (ici  $m = 10^8$ ) peut se révéler parfois insuffisante. On peut, alors, obtenir des générateurs de nombres aléatoires de période arbitrairement longue en augmentant  $m$  [42].

### **b- méthodes de congruence mélangées :**

Des générateurs de congruence peuvent être mélangés de plusieurs manières pour 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 produit une table des nombres aléatoires et le deuxième générateur tire aléatoirement de cette table. Pour des meilleurs résultats les deux générateurs devraient avoir différentes graines et différents multiplicateurs. Une variation de cette approche pour les algorithmes qui ont besoin des nombres aléatoires multiples pour différentes parties des calculs doit utiliser les générateurs indépendants pour différentes parties du problème [43].

### **c- Algorithmes de registre à décalage :**

Une méthode rapide qui a été présentée pour éliminer certains des problèmes qui ont des corrélations avec la méthode de congruence est le registre à décalage ou l'algorithme de Tausworthe (Kirkpatrick et Stoll, 1981).

Une table des nombres aléatoires est d'abord produite et un nouveau nombre aléatoire est produit en peignant deux nombres existants différents à partir de la table [43] :

$$x_n = x_{n-p} \text{ XOR } x_{n-q} \quad (\text{I.52})$$

Là où  $p$  et  $q$  doivent être correctement choisis si l'ordre doit avoir de bonnes propriétés. L'opérateur de XOR est au niveau du bit de l'opérateur exclusivité OR.

Les meilleurs choix des paires  $(p, q)$  sont déterminés par les trinômes primitifs donnés par [43]:

$$x^p + x^q + 1 = \text{primitif} \quad (\text{I.53})$$

Exemple des paires qui satisfont cette condition est :

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

$R250$  dont  $(p,q)=(250,103)$  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  $X_{n-p-q}$  est employé à la place. En fait, ces deux choix donneront le même jet des nombres mais à l'ordre envers; la qualité de chaque ordre est ainsi identique. En général, plus de 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 de nombres aléatoire soit le plus élevée possible, il sera important que la table soit correctement initialisée. Une méthode simple est d'utiliser un bon générateur de congruence 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 [43].

#### d- Générateurs traînés de Fibonacci :

L'algorithme de registre à décalage 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 de l'opérateur  $XOR$  dans l'équation (I.52) par un autre opérateur. Un générateur qui s'est avéré pour avoir de bonnes propriétés emploie l'opérateur de multiplication [43] :

$$X_n = X_{n-p} * X_{n-q} \quad (\text{I.54})$$

avec des valeurs plutôt petites, par exemple  $p=17$  et  $q=5$ .

Des générateurs du même genre plus complexes ont été également utilisés, on cite ici les deux générateurs de Marsaglia et al. (1990)

$$1- \quad X_n = X_{n-22} - X_{n-43} - C \quad (\text{I.55})$$

$$\begin{cases} \text{Si } : X_n \geq 0, & C=0 \\ \text{Si } : X_n < 0, & X_n = X_n + (2^{32} - 5), \quad C=1 \end{cases}$$

2- le deuxième est un générateur composé du premier et du générateur de congruence [43] :

$$Z_n = Z_{n-22} - Z_{n-43} - C \quad (\text{I.56})$$

$$\begin{cases} \text{Si : } Z_n \geq 0, & C=0 \\ \text{Si : } Z_n < 0, & Z_n = Z_n + (2^{32}-5), \quad C=1 \end{cases}$$

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

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

### e- Génération gaussienne :

Une méthode classique pour simuler les nombres aléatoires repose sur la constatation que si  $(U_1, U_2)$  sont deux nombres aléatoires uniformes sur  $[0,1]$  indépendantes :

$$([-2 \log (U_1)]^{1/2} \cos (2\pi U_2), [-2 \log (U_1)]^{1/2} \sin (2\pi U_2)) \quad (\text{I.57})$$

est un couple de nombres aléatoires indépendantes suivant des lois gaussiennes centrées et réduites (de moyenne nulle et de variance 1) [42] .

### 1.5.4.2.2. Les différents essais de qualité de ces générateurs :

Comme cité précédemment, l'exécution d'un générateur de nombre aléatoire peut être compromise par initialisation inexacte de sa table de consultation, et nous recommandons le même procédé d'initialisation pour tous les générateurs que cela décrit pour *R250*.

Ceux qui précèdent sont seulement des exemples de quelques générateurs différents de nombre aléatoire. Des propriétés de générateurs de nombres aléatoires ont été soigneusement examinées en utilisant les essais mathématiques (Marsaglia 1968, 1985); quelques exemples simples de tels essais sont [43] :

**a- Essai d'uniformité** : Diviser l'intervalle entre zéro et un en un grand nombre de petits casiers, et après il faut faire produire un grand nombre de contrôles des nombres aléatoires pour tester l'uniformité du nombre d'entrées dans chaque casier.

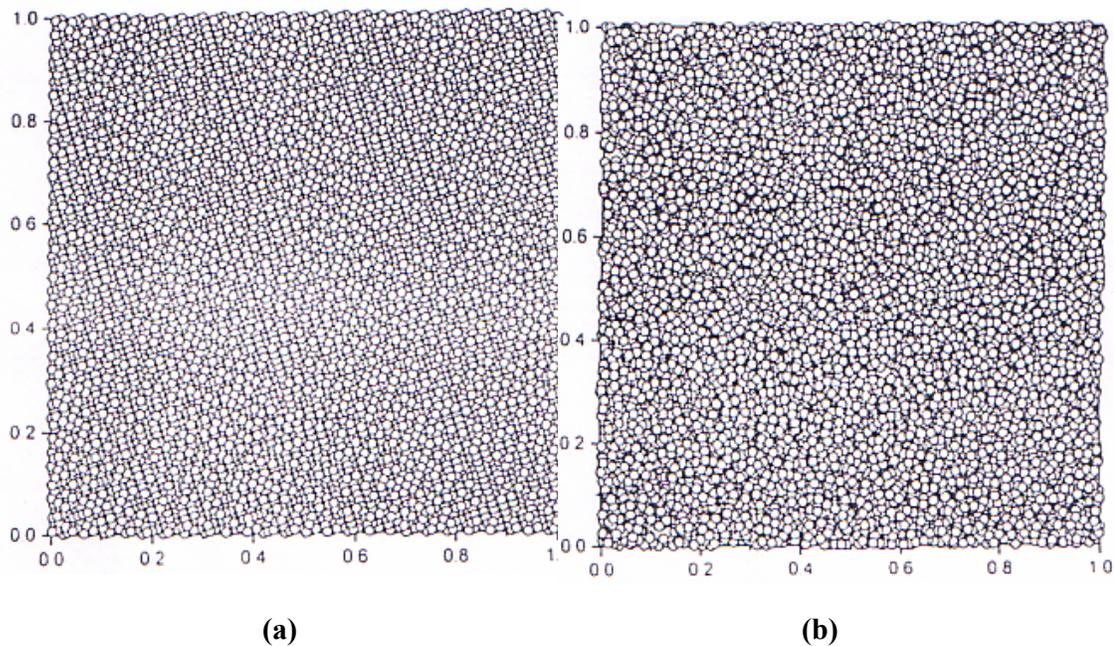
**b- Essai de recouvrement** : Vérifiez les propriétés statistiques du nombre de fois des chiffres apparaissant dans l'ordre dans les nombres aléatoires.

**d- Essai de stationnement** : Tracez les points dans un espace  $m$  - dimensionnel où les  $m$  - coordonnées de chaque point sont déterminés par  $m$  - appels successifs au générateur de nombre aléatoire. Rechercher alors les structures régulières.

Bien qu'il soit notoirement difficile d'évaluer la qualité des nombres aléatoires, les indications de ces essais standards aident à éviter les erreurs résiduelles de génération de nombre aléatoire. Cependant, ces essais mathématiques ne sont pas nécessairement suffisants. Pour cela des méthodes de prélèvement locales ont été montrées pour démontrer différents niveaux d'erreur systématique avec différents " bons " générateurs [43].

Des générateurs de qualité plus sophistiquée, tels que RANLUX (James, 1994; Luscher, 1994) qui est basé sur un algorithme de Marsaglia et Zaman (1991), trouvent leur place dans l'utilisation, mais il faut noter qu'ils sont lents et doivent toujours être soigneusement examinés avec de nouveaux algorithmes pendant qu'ils sont conçus.

La figure (I.29) représente l'essai de " de stationnement " qui a été effectué sur deux générateurs de nombres aléatoires. 10000 points sont tracés en utilisant des paires consécutives de nombres aléatoires sur les axes x et y [43].



**Fig. (I.29)** : (a) les résultats d'un mauvais générateur. (b) selles d'un bon générateur de nombres aléatoires. [43]

### I.5.4.2.3. Méthodes directes :

#### a- Distribution non rectangulaire :

On a souvent besoin d'engendrer des fonctions de distribution, c'est à dire d'engendrer des nombres aléatoires  $\xi$  dont la distribution n'est pas uniforme entre  $a$  et  $b$  ( $a$  et / ou  $b$  pouvant être infinis), mais vaut  $f(x)$ . Ceci signifie que, si on engendre un tel ensemble de nombre  $\xi$ , la proportion de ces nombres tels que  $x \leq \xi \leq x+dx$  vaut  $f(x)dx$  [41].

Une manière équivalente d'exprimer cela est de dire que la probabilité que  $\xi$  tombe dans l'intervalle  $[x, x+dx]$  vaut  $f(x)dx$ . Soit  $F(x)$  la fonction de répartition de  $f(x)$ , définie par [41]:

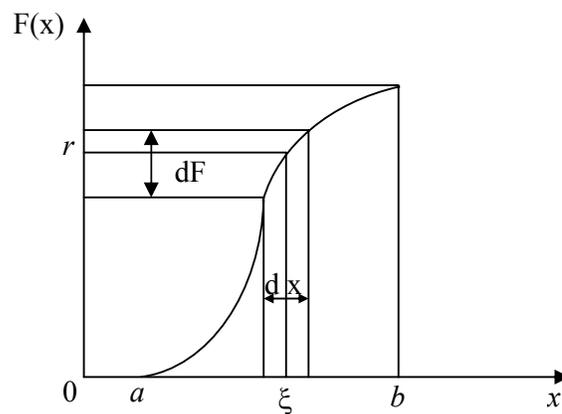
$$F(x) = \int_a^x f(u) du \quad (\text{I.58})$$

Pour  $a \leq x \leq b$ , on a  $0 \leq F(x) \leq 1$ . Etant donné un nombre aléatoire  $r$  à distribution uniforme sur  $[0,1]$ , on lui associe  $\xi$  défini par :

$$r = F(\xi) = \int_a^{\xi} f(u) du \quad (\text{I.59})$$

La fonction de distribution de  $\xi$ , soit  $g(x)$ , est telle que [41] :

$$dp = \text{prob} \{x \leq \xi \leq x+dx\} = g(x) dx \quad (\text{I.60})$$



**Fig. (I.30) [41]**

La figure (I.30) montre clairement que la probabilité  $dp$  que  $\xi$  tombe dans l'intervalle  $dx$  est égale à celle pour que  $r$  tombe dans l'intervalle  $dF$ , qui vaut  $dF$ .

$$dp = dF = (dF / dx) dx = f(x) dx \quad (\text{I.61})$$

Comparant les équations (I.60) et (I.61), on voit que  $f(x) = g(x)$ . Par conséquent la variable aléatoire  $\xi$  suit la distribution  $f(x)$ .

Cette technique est la manière la plus directe de générer des variables aléatoires suivant une certaine distribution. Elle peut être appliquée chaque fois que l'équation (I.59) a une solution analytique ou peut être résolue par rapport à  $\xi$ .

A fin d'obtenir la distribution  $f(x)$ , il faut tout d'abord engendrer un grand nombre  $N$  de nombre aléatoires  $r$  et en déduire les nombres aléatoires associés  $\xi$ . Puis on compte combien de valeurs  $\Delta n(x)$  de  $\xi$  sont situées dans l'intervalle  $[x - \Delta x/2, x + \Delta x/2]$  : on a alors :  $\Delta n(x) / N = f(x) dx$ . Ainsi on peut construire l'histogramme de la distribution. Bien sur, la précision obtenue est d'autant meilleure que  $N$  est plus grand et  $\Delta x$  plus petit [41].

### **b- Méthode du rejet de Von Neumann :**

Supposons que  $f(x)$ , définie sur l'intervalle  $[a, b]$ , soit bornée :

$$f(x) \leq M ; \text{ on a donc } f(x) / M \leq 1, \text{ et bien sur } f(a) = 0.$$

On engendre alors des paires de nombres aléatoires  $\{r_1, r_2\}$  à distribution rectangulaire dans  $[0, 1]$ . On compare alors  $r_1$  à la quantité  $(1/M) \cdot f(a + (b - a)r_2)$ .

- Si :  $(1/M) \cdot f(a + (b - a)r_2) \geq r_1$ , on pose  $\xi = a + (b - a) r_2$
- Si :  $(1/M) \cdot f(a + (b - a)r_2) < r_1$ , la paire  $\{r_1, r_2\}$  est rejetée et on tire au sort une autre paire. Les nombres aléatoires  $\xi$  ainsi sélectionnés suivent la distribution  $f(x)$  [41].

## **I.5.5. Application de la méthode Monte Carlo :**

### **I.5.5.1. Simulation de trajectoires avec collisions :**

Tous les problèmes de diffusion sont liés à des trajectoires de particules subissant des collisions entre elles ou avec d'autres particules. Une particule (neutron d'un réacteur nucléaire, ion dans une solution, électron dans un métal ou un semiconducteur, molécule d'un gaz ou d'un fluide au repos ou en écoulement, etc....) suit pendant un court intervalle de temps une trajectoire déterministe, éventuellement dans un champ de forces, puis, à un instant aléatoire, subit une collision qui fait passer sa vitesse  $\vec{v}$  à une valeur  $\vec{v}'$  (avec création éventuelle d'autres particules). Ainsi la trajectoire d'une

particule revêt un caractère fortement aléatoire ; les techniques de Monte Carlo sont alors des techniques de prédilection (parfois les seules possibles) pour traiter ce type de problème, c'est sans doute dans cette voie que les méthodes de Monte Carlo connaissent actuellement leurs plus importantes applications et leur meilleure justification [41].

La technique généralement utilisée pour traiter ce type de problème consiste à décomposer la trajectoire d'une particule en un grand nombre de séquences (quelques milliers à quelques dizaines de milliers suivant les cas), chaque séquence comprenant un vol libre, et une collision.

Pour cela, on définit l'état initial (position de vitesse) de la particule, en général de façon arbitraire. Puis [41] :

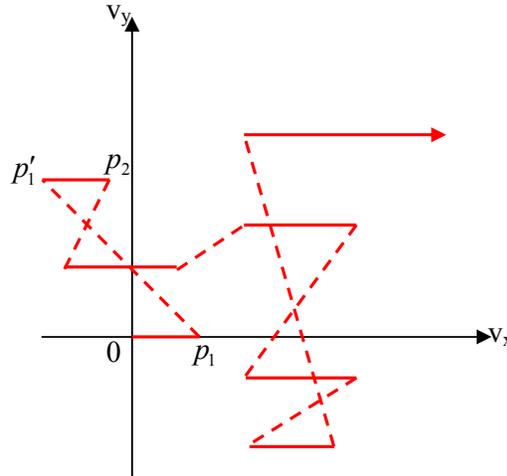
- a) On tire au sort un premier nombre aléatoire  $r_1$  qui détermine la durée  $t_1$  du vol libre (ou encore l'instant  $t_1$  auquel survient la collision)
- b) Entre les instants 0 et  $t_1$ , la particule suit une trajectoire déterministe correspondant aux lois de la mécanique classique, ce qui donne sa position et sa vitesse  $\vec{v}_1$  à  $t_1$ .
- c) Si plusieurs types de collisions sont possibles, un nouveau nombre aléatoire  $r_2$  sélectionne la collision que subit la particule.
- d) Une fois la collision sélectionnée, un ensemble de nombres aléatoires (de 1 à 3, soient  $r_3$ ,  $r_4$  et  $r_5$ ) détermine la vitesse  $\vec{v}'_1$  après la collision, supposée instantanée, la séquence est alors terminée, on connaît donc la position et la vitesse de la particule à la fin de la 1<sup>ère</sup> séquence, c'est-à-dire au début de la seconde séquence.
- e) Si la collision est susceptible de créer d'autres particules, d'autres nombres aléatoires sont utilisés pour simuler leurs vitesses.
- f) On répète cette séquence, comme il a été déjà dit, un grand nombre de fois.

La figure (I.31) illustre la trajectoire d'une telle particule, dans l'espace des vitesses en projection sur le plan  $\{x, y\}$  (le champ de force entraîne cette particule, en vol libre, dans le sens des  $x \geq 0$ ) en trait plein figurent les vols libres :

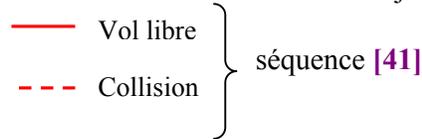
$d\vec{v}/dt = \vec{F}/m$  d'où  $\vec{v} = \vec{v}_0 + t\vec{F}/m$ . En tirets figurent les variations (instantanées) de vitesse dues aux collisions, dont les positions sont repérées par des

points. La particule part du point 0, sa vitesse augmente jusqu'à  $p_1$ . Elle subit alors une collision qui fait passer l'extrémité de son vecteur vitesse de  $p_1$  en  $p_1'$ .

Elle est alors en vol libre jusqu'en  $p_2$ , etc....



**Figure (I.31)** : Simulation Monte Carlo d'une trajectoire dans l'espace des vitesses



On peut, soit étudier une seule particule, dont le mouvement moyen tend vers le mouvement d'ensemble au bout d'un temps suffisamment long, soit simuler les trajectoires d'un ensemble de particules [41].

### I.5.5.2. Calculs d'intégrales :

On peut appliquer les techniques de Monte Carlo au calcul d'intégrales, en particulier d'intégrales multiples. Nous indiquerons quelques unes des techniques employées, appliquées au cas d'intégrales simples, la généralisation au cas d'intégrales multiples étant n'est pas étudiée, parce que les principes sont identiques.

Soit à calculer l'intégrale

$$A = \int_a^b f(x) dx \quad (\text{I.62})$$

On sait que la valeur moyenne  $\bar{f}$  de  $f$  sur  $[a,b]$  vaut :

$$\bar{f} = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx \quad \text{d'où} \quad A = (b-a)\bar{f} \quad (\text{I.63})$$

Ainsi, le calcul de toute intégrale se ramène à celui d'une valeur moyenne, ce qui peut se faire par une suite de tirages au sort, donc par une méthode de Monte Carlo. Le premier tirage au sort (appelé "épreuve") donnera un résultat  $A_1$ , la seconde épreuve un résultat  $A_2$ , la  $i^{\text{ème}}$  un résultat  $A_i$ , etc..... Après  $n$  épreuves, on obtiendra une estimation de  $A$ .

Soit  $\bar{A}$ , qui sera la moyenne des estimations  $A_i$  :

$$A = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_i \quad (\text{I.64})$$

On définira l'intervalle de confiance de  $A$ , soit  $t\sigma(A)$ .  $\sigma(A)$  est l'écart type de  $A$

$$\sigma^2(A) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (A_i - \bar{A})^2 = \frac{1}{n(n-1)} \left( \sum_{i=1}^n A_i^2 - n\bar{A}^2 \right) \quad (\text{I.65})$$

$t$  est une constante qui dépend du risque choisi [41]. En général on utilise le risque 5 ; alors  $t = 1,96$  pour  $n \geq 30$ , et on écrira :

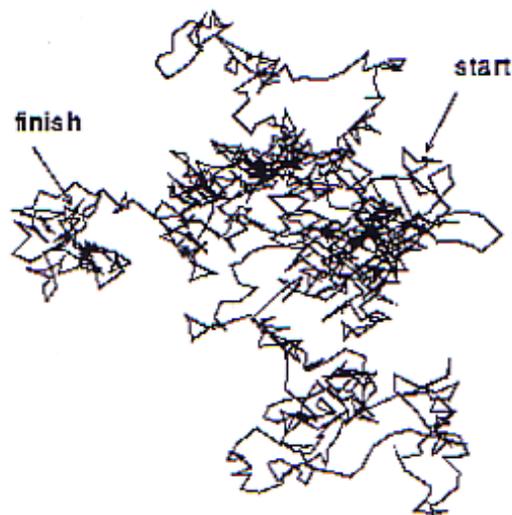
$$\bar{A} - 1,96 \sigma(A) \approx A \approx \bar{A} + 1,96 \sigma(A) \quad (\text{I.66})$$

Ceci signifie que la valeur exacte de  $A$  est dans l'intervalle :

$$[\bar{A} - 1,96 \sigma(A), \bar{A} + 1,96 \sigma(A)]$$

On a 5% de risque de se tromper.

### I.5.5.3. La marche aléatoire (Random Walks) :



**Fig.I.30.** Marche aléatoire de 1000 étapes allant nulle part.

Beaucoup de processus physiques tels que le mouvement brownien, le transport des électrons par les métaux, quant ils seront traités par des ordinateurs, ils seront modélisés comme marches aléatoires. Dans ces modèles, beaucoup de mesures sont prises avec la direction de chaque étape indépendante de la direction de la précédente. Donc, nous devons commencer à l'origine et prendre des étapes de longueurs (pas de coordonnées) dans les directions de x et de y [44]:

$$(\Delta x_1, \Delta y_1), (\Delta x_2, \Delta y_2), (\Delta x_3, \Delta y_3), \dots, (\Delta x_N, \Delta y_N)$$

Là où il y a un total de N pas.

La distance du point de départ R est liée à ces étapes par [44]:

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \dots + \Delta x_N)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \Delta y_3 + \dots + \Delta y_N)^2 \quad (\text{I.67})$$

$$= \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta x_N^2 + 2 \Delta x_1 \Delta x_2 + 2 \Delta x_1 \Delta x_3 + 2 \Delta x_2 \Delta x_1 + 2 \Delta x_2 \Delta x_3 \dots \quad (\text{I.68})$$

Maintenant tandis que (I.68) est tout à fait général pour n'importe quel chemin qui peut être fait, si c'est une marche aléatoire, et également, il y a la possibilité de se déplacer vers l'arrière dans chaque étape - aussi bien que vers la droite ou la gauche.

Ainsi sur la moyenne, pour un grand nombre d'étapes nous auront :

$$R^2 \approx \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2 + \dots + \Delta x_N^2 + \Delta y_1^2 + \Delta y_2^2 + \Delta y_3^2 + \dots + \Delta y_N^2$$

$$R = (N)^{1/2} r_{\text{rms}} \quad (\text{I.69})$$

Tant que  $r_{\text{rms}}$  est la racine carrée de la longueur moyenne de l'étape.

Il faut noter que le même résultat est obtenu pour une marche à trois dimensions [44].

Selon la relation (I.69), la distance à partir du point de départ est toujours :  $(N)^{1/2} r_{\text{rms}}$ .

### I.5.6. Autres méthodes de simulation (dynamique moléculaire):

Bien que la méthode Monte Carlo soit excessivement utile 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 MC. Le but de ce paragraphe est ainsi de fournir une vue d'ensemble très brève de certaines autres méthodes importantes pour la simulation dans la physique statistique. Notre but n'est pas de présenter une liste complète d'autres méthodes ou même une discussion complète de ces méthodes qui sont incluses mais d'offrir plutôt le suffisamment de

fond pour facilité de comparer certaines des différentes approches et de comprendre mieux les forces et les limitations des simulations de Monte Carlo.

### **I.5.6.1. Les méthodes d'intégration :**

La dynamique moléculaire est une description microscopique fine d'un système physique où les degrés de liberté 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 de méthodes numériques [43].

Etant donné le mouvement des particules, les forces agissantes sur elles, changent et ont besoin d'être recalculées continûment. Une manière d'accélérer avec le calcul seulement d'une réduction modeste d'exactitude est de 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 [43].

### **I.5.6.2. D'autres ensembles (la température constante, pression constante) :**

L'approche la plus brute est 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 [43].

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. La pression

constante peut également être maintenue en changeant la taille de la boîte. Cette dernière possibilité peut être importante 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) [43].

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 [43].

En terme d'efficacité de calcul, les calculs effectués par MC sont considérablement plus simples parce 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 [43].

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 MC [43].

### **I.5.6.3. Méthodes Hybrides (DM+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, la méthode de la DM peut réellement améliorer une recherche de MC sur le système. Un mouvement d'essai est produit en permettant aux équations du mouvement de la DM de progresser le système par une étape de temps plutôt grande [43].

Bien qu'un tel développement puisse être plus précis pendant que la DM fait un pas, elle produira un mouvement d'essai de MC 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].

#### **I.5.6. 4. 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) 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 [43].

#### **I.5.6. 5. 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 de 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 statistiques 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 la méthode de Monte Carlo, et pour employer cette dernière en tant que point de départ pour l'intégration des équations couplées du mouvement [43].

Plusieurs méthodes numériques standard peuvent être également appliquées.

## **I.6. Conclusion :**

On conclue de ce chapitre ce qui suit :

- La technique EBIC est une technique très importante et très utile sur le plan pratique. Elle a un large domaine d'application quantitative et qualitative.
- L'exploitation des informations contenues dans la technique EBIC nécessite une modélisation réaliste que possible de cette dernière pour une meilleur fiabilité des paramètres mesurés
- Un compréhension des phénomènes de l'interaction électron-matière mise en jeux lors d'une investigation par cette technique est indispensable pour cette modélisation, tel que le phénomène de génération.

A partir de cette étude théorique qu'on a déjà exposé dans ce chapitre, on va essayer de constituer un modèle approprié de cette technique, ce qui fera l'objet du 2<sup>ème</sup> chapitre.

## Chapitre II :

# Modélisation

## II.1. Introduction :

Dans beaucoup de cas les traitements théoriques sont disponibles pour les modèles dont lesquels il n'y a aucune réalisation physique parfaite (au moins à l'heure actuelle). Un exemple que nous souhaitons mentionner est la fusion dans un réacteur ou de la guerre nucléaire; bien que nous voulions savoir ce que les résultats de tels événements seraient, nous ne voulions pas effectuer des expériences ! Il y a également de vrais systèmes physiques qui sont suffisamment complexes qu'ils ne soient pas actuellement favorables au traitement théorique. Un avantage important des simulations est celui que les différents effets physiques qui sont simultanément présents dans certains systèmes peuvent être isolés, et par conséquent cette séparation fournit bien une meilleure compréhension [43].

Nous souhaitons souligner que le but des simulations n'est pas de fournir un ajustement de courbes aux données expérimentales plus mieux que celui de la théorie analytique, le but est de créer une compréhension des propriétés et des processus physiques qui sont aussi complètes que possible, en se servant de la commande parfaite des conditions expérimentales dans l'ordinateur et de la possibilité d'examiner chaque aspect des configurations de système en détail. Le résultat désiré est alors l'élucidation des mécanismes physiques qui sont responsables des phénomènes observés [43]. En regardons donc le rapport entre la théorie, l'expérience, et la simulation on trouve qu'ils sont semblables aux cotés d'un triangle (fig.II.1); chacun est distinct, mais chacun est fortement relié aux deux autres.

En observant la croissance rapide de la puissance d'ordinateur, étant couplé à la baisse régulière dans son prix, il est clair que les simulations sur ordinateur pourront faire augmenter rapidement la sophistication pour permettre à des résultats plus subtiles d'être trouvés.

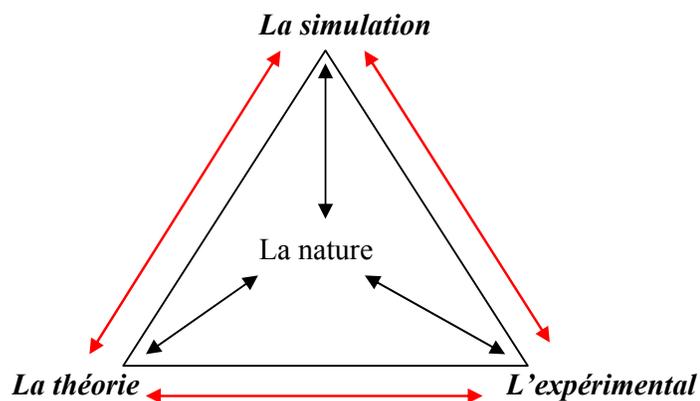


Fig.II.1. La relation entre la théorie, l'expérience et la simulation [43].

Pour cette grande importance de la simulation dans le domaine scientifique, on a voulu créer notre propre modèle qui sera inspiré de la technique EBIC.

L'EBIC est une technique très utilisée pour étudier les matériaux semiconducteurs. Pour réaliser cette technique il faut avoir une interaction électron-matière. Beaucoup de modèles analytiques ont été utilisés pour essayer d'étudier cette interaction. De notre côté, et en tenant compte des avantages fournis par la méthode Monte Carlo, on a préféré de proposer un modèle numérique dans toutes ses étapes en se basant sur les propriétés de cette méthode.

On va utiliser un certain générateur de nombres aléatoires, qui sera la base d'utilisation de la méthode de Monte Carlo dans notre modèle.

## II.2. Générateur de nombres aléatoires :

### II.2.1. La fonction Ran :

La simulation Monte Carlo repose sur l'existence d'un générateur de nombres aléatoires dont le prototype doit fournir des nombres issus d'une distribution uniforme.

Tous les langages (ou presque) disposent d'un générateur de nombres aléatoires. Les syntaxes varient : Random ( ) en PASCAL, ALEA ( ) dans EXCEL,...etc.

Dans notre modèle numérique, on a choisi d'utiliser la fonction Ran ( ) qui est la fonction responsable de la génération des nombres aléatoires dans le langage FORTRAN 90.

#### II.2.1.1. La définition de la fonction Ran :

La fonction Ran est définie comme étant la fonction d'exécution qui renvoie un nombre aléatoire supérieur ou égal à zéro et moins d'un de la distribution uniforme. Cette fonction utilise le générateur congruentiel linéaire suivant :

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

Où :  $m = 2^{31}$ ,  $a = 843314861$ ,  $c = 453816693$  [45]

Sa période est bien sûr égale à  $m$ .

Notons que tous les nombres aléatoires générés par 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  $[0,1]$ , il faut diviser les entiers obtenus par  $m$ , et

on obtient un générateur de nombres réels qui semblent suivre une loi uniforme sur  $[0,1]$ .

### II.2.1.2. La syntaxe de la fonction Ran :

La syntaxe de la fonction Ran est la suivante [42] :

$$\text{Le résultat} = \text{Ran}(\textit{iseed}) \quad (\text{II.2})$$

Le terme *iseed* (germe en français), est la valeur initiale donnée pour faire tourner le programme. Par défaut le germe est  $X_0 = 0$  [45].

Random\_Seed est la série de nombres entiers qui est utilisée pour réinitialiser le germe pour la génération des nombres aléatoires. Il peut être fourni par l'utilisateur avec une formulation Lire (READ) directement, ou il peut être généré automatiquement par l'horloge du système. Aussi long que la capacité de l'horloge du système en faisant tic-tac, on obtient des résultats différents à chaque fois que nous tournons le même code.

A la fin de chaque simulation, un autre argument facultatif GET (obtient) est utilisé pour mettre le germe à la valeur courante des germes (chaque fois qu'un nombre aléatoire est produit le germe est réinitialisée intérieurement). Cela veut dire qu'une séquence successive des germes aléatoires est utilisée pour l'ensemble entier de la simulation.

L'argument *iseed* devrait au commencement être placé à une grande valeur (de préférence, cette valeur doit être une valeur impaire de nombre entier). La fonction Ran enregistre la valeur dans l'argument *iseed* pour qu'elle fera des utilisations postérieures pour calculer le prochain nombre aléatoire.

Toutes les procédures aléatoires (Random, Ran et Random-number et les fonctions de PortLib Drand, Drandm, Rand et Irand) emploient les mêmes algorithmes et renvoient ainsi les mêmes réponses. Elles sont toutes compatibles et peuvent être employées l'un pour l'autre. L'algorithme utilisé est un générateur linéaire multiplicatif principal du module  $M$  (méthode de Congruence).

### II.2.2. Tests pour la fonction Ran :

Pour classer la fonction Ran dans la catégorie des bons, ou dans celle des mauvais générateurs de nombres aléatoires, on a préféré de faire vérifier l'efficacité de cette fonction par deux tests.

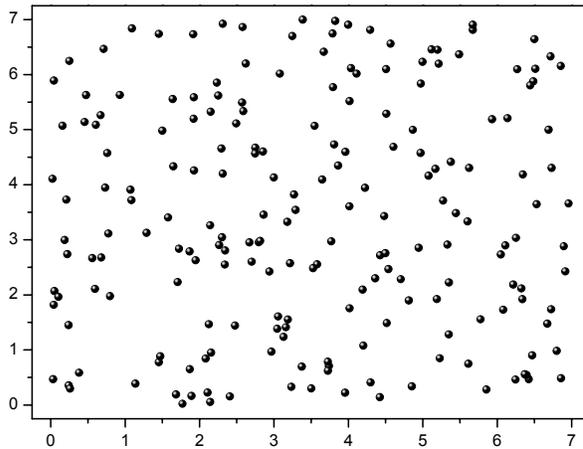
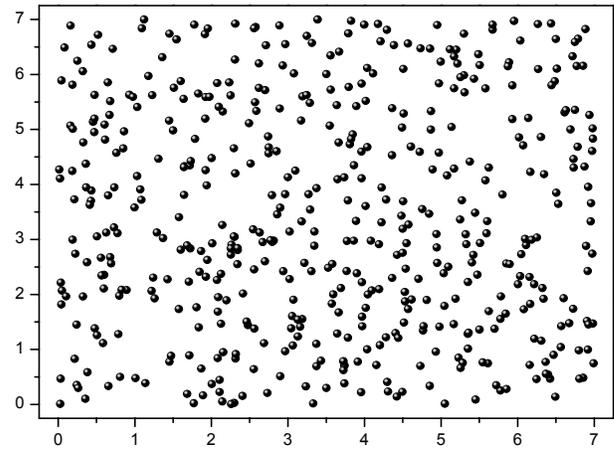
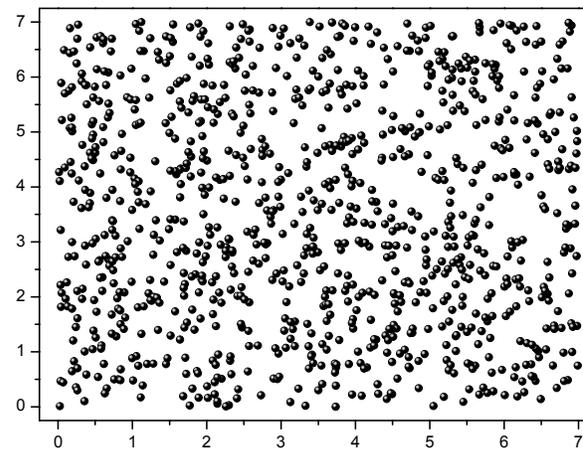
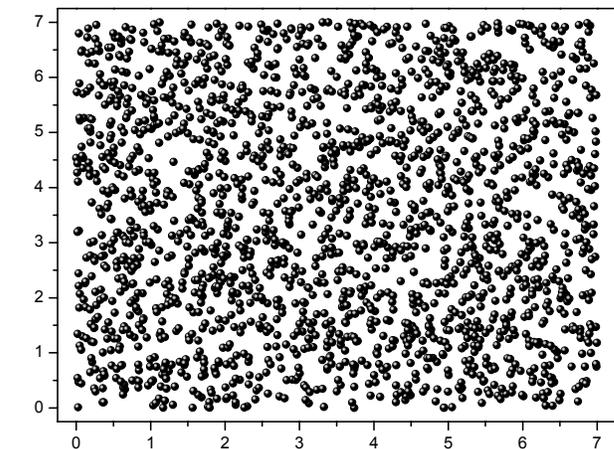
### **II.2.2.1. Le premier test – test de stationnement - :**

Notre premier test consiste à faire une distribution d'un certain nombre de points dans une surface bien déterminée.

Nos résultats de ce test sont illustrés sur la figure (II.2).

Comme on peut remarquer, la distribution est faite d'une façon très aléatoire. Et on remarque aussi, que si le nombre de points a distribués est plus grand, la distribution sera faite d'une façon plus aléatoire.

*➤Donc la fonction Ran à démontrer son efficacité dans ce premier test.*

**(a)****(b)****(c)****(d)**

**Fig.II.2.** La distribution aléatoire d'un nombre de points en utilisant la génération de la fonction Ran.

**(a)** : la distribution de 200 points. **(b)** : la distribution de 500 points.  
**(c)** : la distribution de 1000 points. **(d)** : la distribution de 2000 points

### II.2.2.2. Le deuxième test – calcul de $\pi$ - :

On a déjà vu au premier chapitre que parmi les applications de la méthode Monte Carlo il y a le calcul d'intégrales, la simulation de trajectoires avec collisions et la marche aléatoire.

Une autre application de la méthode Monte Carlo est très connue, c'est bien le calcul des surfaces.

Dans ce contexte on va seulement limiter notre test de la fonction Ran à l'essai de trouver une approximation de  $\pi$ .

Le nombre  $\pi$  est sans aucun doute le nombre le plus important des mathématiques...à l'exception du nombre 1. On le trouve dans tout ce qui concerne le cercle, la sphère, les ellipses, dans tout ce qui concerne les mouvements périodiques associés à des fonctions trigonométriques.

Un carré dont la longueur du côté  $a$  est tracé, à l'intérieur on a un disque.

La méthode consiste alors à tirer au hasard des nombres  $x$  et  $y$  dans l'intervalle  $[0, a]$  ;

Si :  $x^2 + y^2 \leq (a^2 / 4)$  le point  $M(x,y)$  appartient au disque de rayon  $(a/2)$ .

Si  $\left\{ \begin{array}{l} n_p \text{ est le nombre total de points qui sont tirés au carré.} \\ n_s \text{ est le nombre de points qui sont tirés au disque.} \end{array} \right.$

La probabilité d'obtenir un point qui appartient au disque est égale au rapport des aires du disque de rayon  $(a/2)$  et du carré de côté  $a$ . D'autre part cette probabilité égale au rapport de  $n_s$  et de  $n_p$ .

On aura :

$$(\pi a^2 / 4a^2) = (n_s / n_p) \quad (\text{II.3})$$

Donc :

$$\pi = 4. (n_s / n_p) \quad (\text{II.4})$$

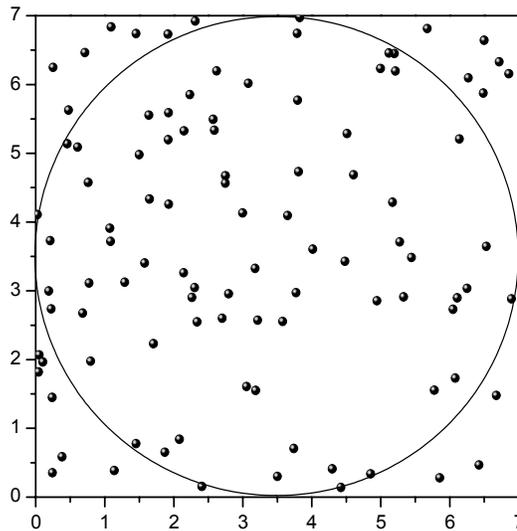
Pour réaliser ce test, on a écrit un programme en langage FORTRAN.

**program test de la fonction ran**

```

open(1,file='testran.dat')
write(*,*)'donne moi le germe n'
read(*,*) n
write(*,*)'donne moi la valeur de a'
read(*,*)a
rayon=a/2
write(*,*)'donne moi le nombre de points np'
read(*,*)np
dns=0
do 10 j=1,np
x=a*ran(n)
y=a*ran(n)
rr=sqrt(x*x+y*y)
if(rr.lt.a) dns=dns+1
dnp=float(np)
write(*,*)x,y
write(1,*)x,y
10 continue
rap=dns/dnp
pi=4*rap
write(*,*)pi
stop
end

```



**Fig.II.3.** Le test de calcul de  $\pi$ .  
Pour  $a = 7\text{cm}$  et  $np = 100$ .

Le tableau (II.1) est obtenu pour différentes valeurs de  $np$ .

Nombre total de points tirés	La valeur obtenue de $\pi$
50	3,36
100	3,32
500	3,208
1000	3,196
10000	3,1552
20000	3,1494

**Tableau (II.1)**

A partir du tableau (II.1) on peut conclure que la fonction Ran donne des valeurs acceptables de  $\pi$ , surtout quand on aura utilisé un grand nombre de points tirés.

*➤La fonction Ran, a démontré son efficacité dans le deuxième test aussi.*

La fonction Ran peut être considéré parmi les bons générateurs de nombres aléatoires.

### II.3. Détails du modèle :

Beaucoup de modèles analytiques on étés consacrés pour étudier l'interaction de l'électron avec la matière. Ils ont trouvé des relations qui donnent des résultats acceptables avec ceux des expériences.

Le problème dans ces modèles réside dans l'inconnnaissance des bases physiques qui ont permis l'obtention de ces relations.

Notre modèle consiste à réaliser un modèle numérique dans toutes ces étapes en se basant sur des théories physiques connues.

#### II.3.1. les bases physiques :

L'interaction du faisceau d'électrons avec la matière solide, la dissipation d'énergie d'électrons et la génération de porteurs dans le solide sont de grande importance pour l'analyse de la technique EBIC. La bibliographie donne plusieurs revues détaillées à ce sujet. Dans ce paragraphe nous présentons une brève vue globale des bases physiques que nous avons utilisées dans notre modèle.

Le mécanisme des dispersions peut être divisée en dispersion élastique et inélastique. Comme résultat de ces derniers, la trajectoire des électrons est aléatoire.

Notre modèle de simulation est basé sur deux points :

- 1- le tirage de nombres aléatoires (utilisation de la méthode MC) pour la détermination de la distribution et la position du choc.
- 2- L'effet de l'interaction inélastique qui se traduit par la perte d'énergie après chaque choc de ce type.

L'interaction de l'électron avec la matière (SC) peut être analysée en employant le modèle de Rutherford qu'on va le présenter si dessous.

L'électron pénétrant aura une certaine énergie après sa traversé de la surface de l'échantillon. Cette énergie est [25] :

$$E = E_0 (1-\gamma) \quad \text{(II.5)}$$

$E_0$  : l'énergie de l'électron avant la pénétration.

$\gamma$  : le coefficient de la rétrodiffusion du matériau considéré.

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

La distance ente deux collisions successives est [25] :

$$S = -\lambda \ln (R) \quad \text{(II.6)}$$

$R$  : un nombre aléatoire entre 0 et 1.

Le libre parcours moyen  $\lambda$  est donné par la relation suivante [25] :

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad \text{(II.7)}$$

$A$  : La masse atomique du matériau

$N_A$  : le nombre d'Avogadro

$\rho$  : la densité du matériau

$\sigma$  : la section efficace total de diffusion

La section efficace totale est donnée par la relation [25] :

$$\sigma = (5.21.10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E + m_0 c^2}{E + 2m_0 c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta + 1)} \quad \text{(II.8)}$$

Où :

$Z$  : le nombre atomique de l'atome étudié.

$E$  : l'énergie de l'électron incident (KeV)

$\delta$  : Le paramètre d'écrantage.

Avec [23] :

$$\delta = (3.4.10^{-3}). \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (\text{II.9})$$

L'angle  $\theta$  qui caractérise un événement particulier de dispersion peut être obtenu à partir de la probabilité de la dispersion élastique dans un intervalle particulier d'angles (0 à  $\theta$ ), qui peut être dérivé de l'équation (II.8) [25].

Ainsi, un rapport obtenu à partir de la probabilité de distributions est [25] :

$$\cos \theta = 1 - \frac{2\delta R}{1 + \delta - R} \quad (\text{II.10})$$

La correction relativiste dans l'équation (II.8) 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.

D'autre part, et en mode EBIC du (MEB), l'énergie d'un électron incident  $E_0$  est essentiellement plus grande que l'énergie moyenne de la création d'une paire électron-trou  $E_{e-h}$ , ainsi un électron (son énergie  $E_0$  est entre 10 et 20 KeV) peut produire plusieurs milliers de paires le long de sa trajectoire dans le volume d'excitation.

Le nombre total des paires é-h est un facteur de génération donné par :

$$G = E / E_{e-h} \quad (\text{II.11})$$

### II.3.2. les étapes de calcul :

Un électron d'énergie  $E_0$  frappe l'échantillon à l'origine et à  $90^\circ$  de sa surface. Le premier événement d'interaction est supposé de se produire à l'origine.

Si l'électron continu pénètre dans l'échantillon (ignorance des électrons rétrodiffusés), la direction et l'énergie sont enregistrés ou bien sauvegardés dans le programme.

Comme le volume de génération est assimilé à une poire (dans le cas du Si), on a préféré répartie ce volume en demi-cercles, dont le rayon de chacun est  $r_1$  (Fig.II.4).

Dans chaque zone, une quantité ( $\Delta n$ ) de paires (é-h) est générée. Ces porteurs de charge peuvent être transformés en un phot -courant par l'application d'un champ électrique extérieur (le principe de la technique EBIC).

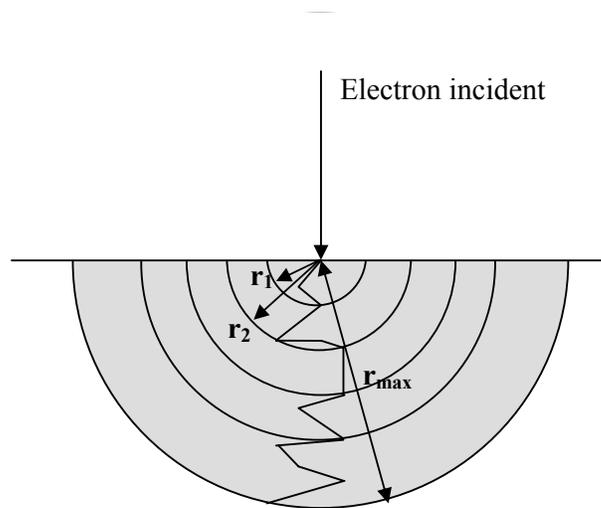


Fig.II.4. La répartition du volume de génération

### II.3.2.1. Trajectoire des électrons :

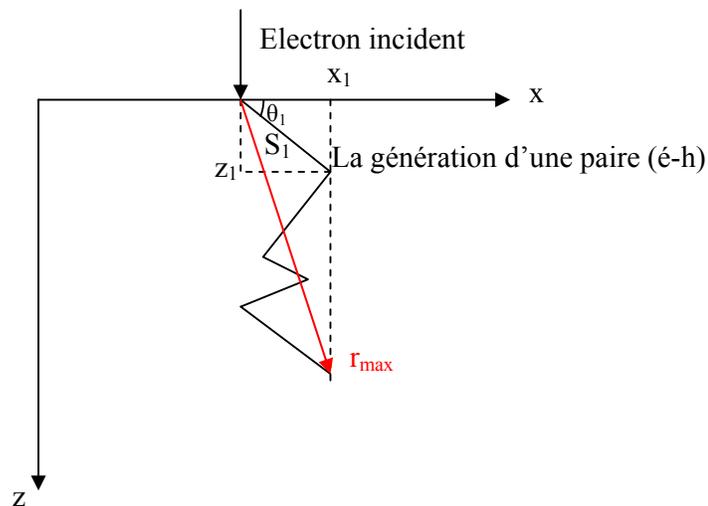


Fig.II.5.

Les coordonnées cartésiennes du point du choc, sont calculées à partir de la relation suivante (II.11) :

$$\begin{cases} x_i = S_i \sin \theta_i \\ z_i = S_i \cos \theta_i \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

Avec S est la distance ente deux collisions successives calculée à partir de l'équation (II.6).

### II.3.2.2. profondeur de pénétration :

$r_{\max}$  qui est la distance la plus grande qui peut être traversé par un électron incident est illustrée dans les figures (II.4) et (II.5).

Donc :

$$(r_{\max})_i = [(x_n)^2 + (z_n)^2]^{1/2} \quad (\text{II.13})$$

Avec  $(x_n, z_n)$  sont les coordonnées cartésiennes du point n qui est le point qui correspond à la dernière paire (é-h) générée par l'électron i.

Donc, et pour un faisceau électronique qui contient  $n_{el}$  électrons pénétrant dans l'échantillon, la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{\max})_i$

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{\max i}}{n_{el}} \quad (\text{II.14})$$

Après avoir calculer cette profondeur, on a fait entrer les relations (I.18), (I.20) et (I.21) (les relations des parcours électroniques calculés d'après : Kyser, Everhart – Hoff et Kanaya – Okayama) dans notre programme pour qu'on puissent faire une comparaison entre le parcours trouvé par notre modèle et ceux trouvés par ces chercheurs.

### II.3.2.3. Profil de distribution :

Pour calculer le profil de distribution (fonction de génération) on a poursuivi les étapes suivantes :

- calculer le nombre de paires  $(\Delta n_i)$  généré dans chaque zone.

- Calculer la surface demi -sphérique  $S_i$  pour chaque zone.

La concentration dans la zone  $i$  sera :

$$C_i = \Delta n_i / S_i \quad (\text{II.15})$$

### II.3.2.4.Signal EBIC :

Plusieurs auteurs ont publié leurs travaux théoriques sur des problèmes analogues dans lesquels le faisceau d'électrons est incident dans la direction parallèle au plan de la jonction. Van Roosbroeck (1955) analyse ce problème pour des valeurs quelconques de la vitesse de recombinaison de surface. Bresse et Lafeuille (1971) reprennent le même modèle en changeant la géométrie de la génération. Enfin, Brez et Kuiken (1976) analyses le problème en détail, pour toutes les valeurs de la vitesse de recombinaison de surface. Enfin, notons que des applications de cette technique ont été faites par D.E.Ioannou et al. (1977, 1979,1980) [2].

Donolato de sa part donne une expression analytique du courant collecté dans un cristal parfait, pour un taux de génération constant à l'intérieur de la sphère de création [2] :

$$I_{cc} = 3q G (2L_n / R)^3 \exp - (R / 2L_n) [(R / 2L_n) \cosh (R / 2 L_n) - \sinh(R / 2 L_n)] \quad (\text{II.19})$$

G : le nombre de paires créées par seconde.

R : le diamètre de la sphère de génération.

Une relation qui globe l'analyse du courant EBIC a été donnée [2] :

$$I_{cc} (z) = (A / z^n) . \exp (-z / L_n) \quad (\text{II.16})$$

Où

$n$  :est un paramètre qui caractérise la vitesse de recombinaison de surface.

A : est une constante dont la valeur dépend de la tension d'accélération du faisceau d'électrons  $E_0$ , du courant du faisceau  $I_b$ , du numéro atomique de la cible et de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L_n$  dans l'échantillon[2] .

$L_n$  : la longueur de diffusion de la cible qui est reliée à  $\tau$  (la durée de vie) par la relation.

$$L_n = (D.\tau)^{1/2} \quad (\text{II.17})$$

D : la constante de diffusion.

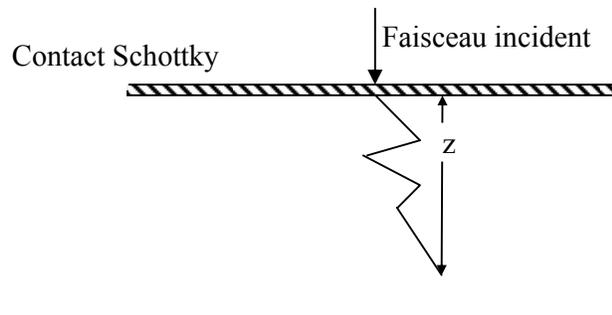


Fig.II.6.

Mais pour utiliser cette relation, il faut que la géométrie de la diode Schottky doive satisfaire aux hypothèses suivantes :

- L'échantillon est semi-infini, c'est-à-dire limité uniquement par la surface supérieure.
- La longueur de diffusion des porteurs minoritaires reste constante dans tout l'échantillon.
- Le taux d'injection est faible par rapport au taux de dopage.

Beaucoup de modèles analytiques, ont utilisé la relation générale [2] :

$$I_{cc} \propto \int \Delta n(z) e^{-z/L_n} dz \quad (\text{II.18})$$

Où le terme  $\exp(-z / L_n)$ , peut être interprété comme étant la probabilité qu'un porteur créé à la profondeur  $z$ , peut être collecté par la jonction de surface.

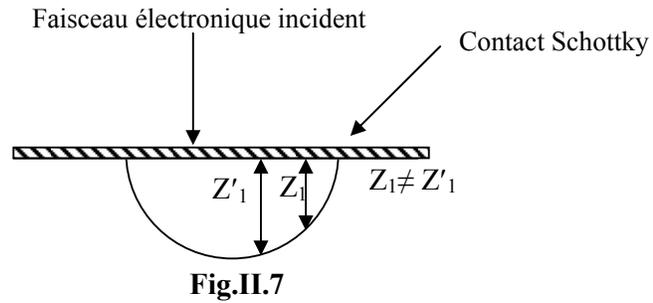
Malgré que cette relation, est devenue la relation la plus adaptée pour calculer le courant EBIC, son application, avait un grand inconvénient, qui est la difficulté de l'obtention de la relation exacte de  $\Delta n(z)$ .

Dans notre modèle numérique, et à cause de la répartition qu'on a faite, on a remplacé l'intégrale dans la relation (II.18) par une sommation pour pouvoir analyser la collecte des porteurs de minoritaires dans toutes les zones, et pour éviter de trouver l'expression analytique de  $\Delta n(z)$ .

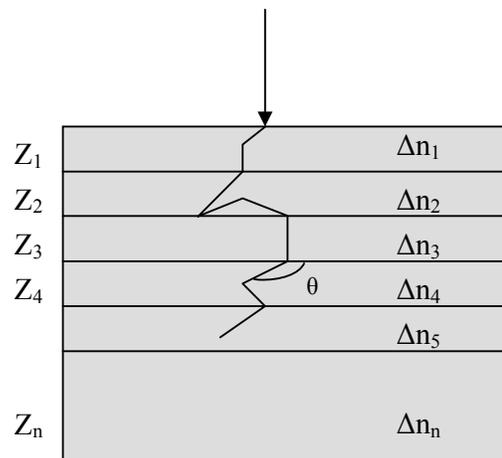
Donc la relation que nous allons considéré sera :

$$I_{cc} = \sum_{i=1}^n \Delta n_i e^{\frac{-z_i}{L_n}} = \Delta n_1 e^{\frac{-z_1}{L_n}} + \dots + \Delta n_n e^{\frac{-z_n}{L_n}} \quad (\text{II.20})$$

La répartition précédente du volume n'est pas valable dans ce cas, parce que la distance entre deux paires (é-h) qui appartient au même cercle et le contact Schottky n'est pas la même.



C'est pour ça, qu'on été obligé de faire une autre répartition (fig.II.8) qui est basée sur la division théorique de l'échantillon en un nombre de zones horizontales.

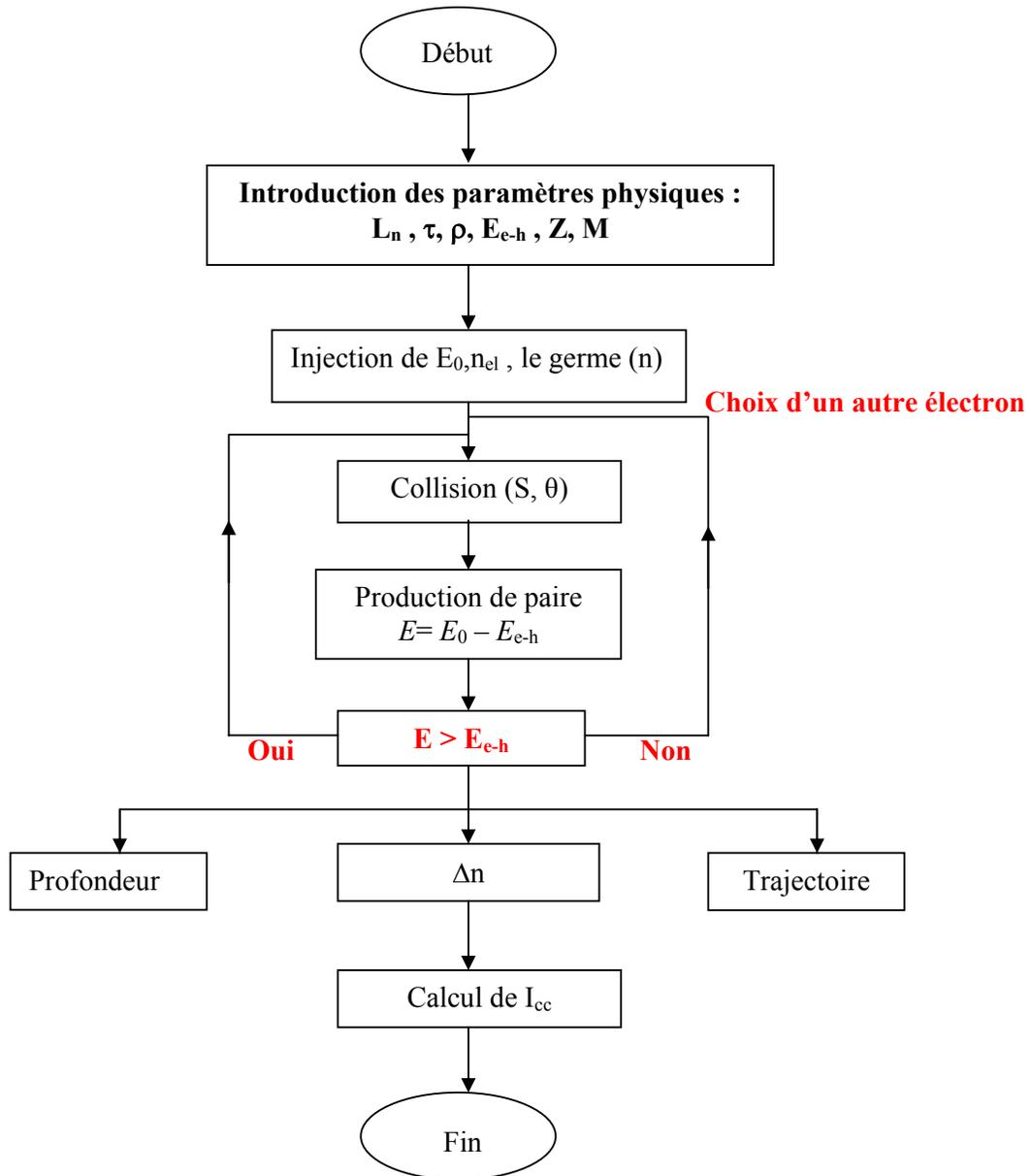


$\theta$  : Angle de valeur aléatoire.

## II.4. Organigramme :

Le programme a été écrit en langage FORTRAN.

L'organigramme du programme est représenté si dessous :



Le tableau (II.2) englobe un certain nombre de paramètre du (Si) qui étaient utilisés dans nos calculs :

Paramètre	Valeur
$\gamma$ %	10
M (g)	28.086
$\rho$ (g.cm <sup>-3</sup> )	2.33
Z	14
$E_{e-h}$ (eV)	3.68

Tableau (II.2)

### II.5. Conclusion :

Un modèle numérique pour étudier l'interaction électron-matière inspiré de la technique EBIC en l'appliquant sur un composant en Si a été élaboré. La procédure de ce calcul est la suivante :

- On injecte le paramètre du faisceau :  $E_0$ , et celles du composant :  $L_n$ ,  $\tau$ ,  $\rho$ ,  $E_{e-h}$ , Z, M.
- La section efficace de diffusion est celle de Rutherford.
- L'angle de direction diffusé prend des valeurs aléatoires.
- La trajectoire de l'électron, la profondeur de pénétration, le profil de distribution sont calculés à partir de ce modèle qui est numérique dans toutes ses étapes.
- Nous résolvons l'équation du courant collecté en remplaçant l'intégral par une sommation.

Pour montrer la consistance du modèle, le 3<sup>ème</sup> chapitre sera consacré aux résultats obtenus.

## Chapitre III

### Résultats et discussion

### III.1. Introduction :

La détermination qualitative des paramètres du matériau a besoin d'un calcul précis du signal EBIC en fonction des paramètres électronique ( $I_p, E_0$ ).

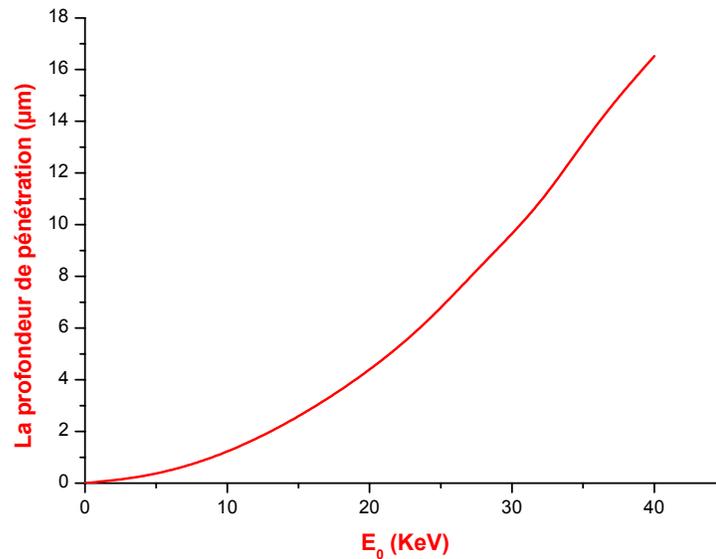
Grâce à notre modèle adopté, on a pu regrouper un ensemble de résultats qui sont très acceptables physiquement.

Dans ce chapitre, on présentera les résultats de calcul concernant : la profondeur de pénétration, les trajectoires des électrons, le volume de génération, la concentration des paires (é-h) créées (le profil de distribution), le courant collecté  $I_{cc}$  et l'influence de la longueur de diffusion et l'énergie de formation d'une paire (é-h) sur l'allure de la courbe  $I_{cc}(E_0)$ .

Mais il faut signaler que l'EBIC nécessite l'utilisation de modèles théoriques ou de résultats expérimentaux qui permettent d'ajuster les courbes obtenues en faisant varier des paramètres judicieusement choisis. Donc, on a préféré d'ajouter au contenu de ce chapitre une comparaison entre la courbe  $I_{cc}(E_0)$  obtenue par notre modèle et les résultats expérimentaux trouvés par d'autres chercheurs.

### III.2. La profondeur de pénétration :

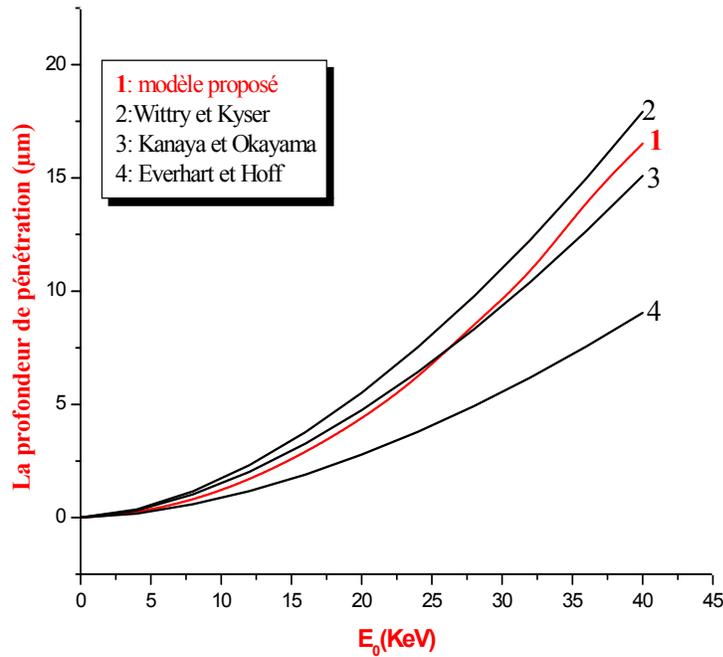
La figure (III.1) représente le parcours électronique trouvé par notre modèle proposé. On remarque bien que la profondeur de pénétration de l'électron incident dans l'échantillon croît en fonction de l'énergie du faisceau incident.



**Figure.III.1.** La profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$

En prenant cette remarque en considération, et en jetant un coup d'œil sur les relations (I.17) jusqu'à (I.21), on peut conclure que notre résultat est bien situé au milieu des limites physiques déjà trouvées.

La figure (III.2) représente la comparaison entre les profondeurs de pénétration trouvés par : notre modèle, le modèle de Wittry et Kyser (I.19), le modèle de Everhart et Hoff (I.20), et celui de Kanaya et Okayama (I.21).



**Figure.III.2.** La profondeur de pénétration de différents modèles en fonction de  $E_0$

Donc on peut conclure que la profondeur de pénétration calculée par notre modèle numérique coïncide parfaitement avec celles obtenues par Wittry – Kyser et Kanaya – Okayama, bien qu'elle est un peu écartée de celle de Everhart - Hoff.

Des résultats similaires, ont été obtenus pour un échantillon en GaAs [44], [46].

### III.3. Les trajectoires des électrons :

La figure (III.3) représente les trajectoires des électrons pénétrants dans l'échantillon pour différents nombres d'électrons pénétrants. Alors, que la figure (III.4) représente ces trajectoires pour différentes valeurs de  $E_0$ .

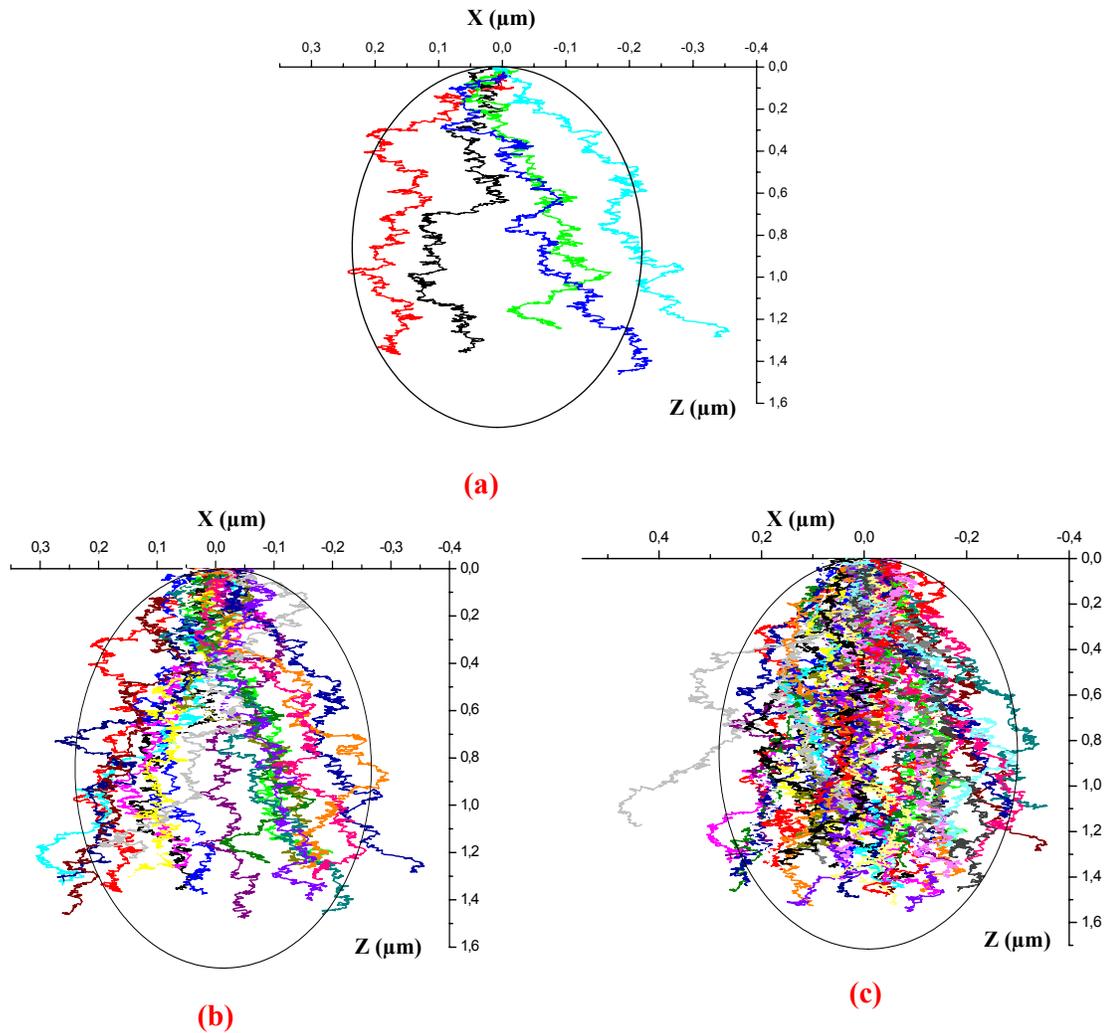
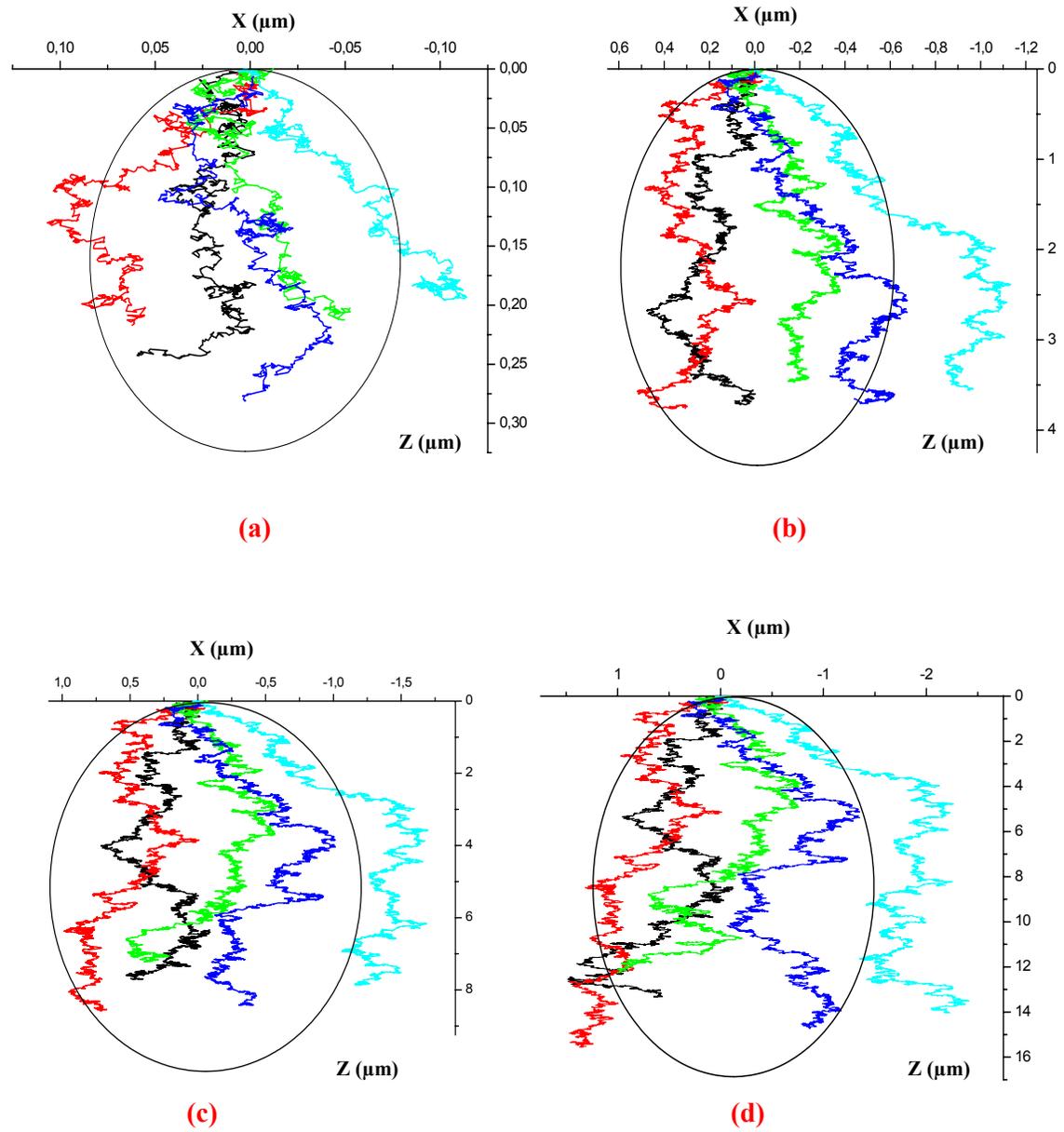


Figure.III.3. Les trajectoires des électrons pénétrants dans l'échantillon pour  $E_0=10\text{KeV}$

- (a) : le cas de 5 électrons
- (b) : le cas de 20 électrons
- (c) : le cas de 50 électrons



**Figure.III.4.** Les trajectoires de 5 électrons pénétrants dans l'échantillon pour :

- (a) :  $E_0 = 5$  KeV
- (b) :  $E_0 = 20$  KeV
- (c) :  $E_0 = 30$  KeV
- (d) :  $E_0 = 40$  KeV

On peut remarqué facilement que :

- la trajectoire de l'électron est presque aléatoire.
- le volume de génération prend une forme de poire, qui est la forme considérée par tous les chercheurs dans le cas du silicium.

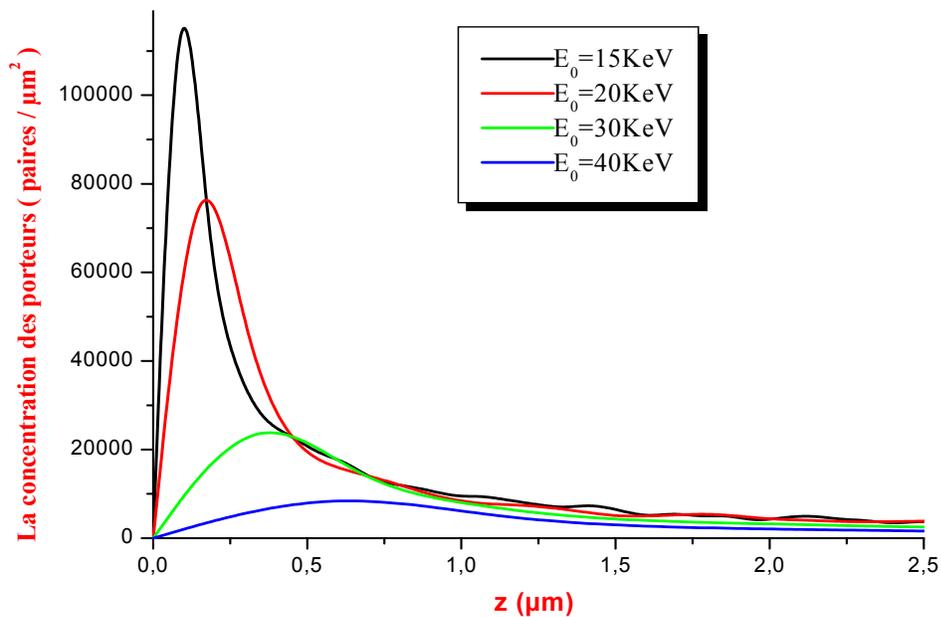
Donc, on a trouvé un point qui confirme la validité de notre modèle.

### III.4. La concentration des paires (é -h) créés :

La figure (III.5) illustre l'excès des porteurs de charge en fonction de  $z$  (la distance à partir de la surface du dispositif) pour différentes valeurs de  $E_0$ .

On remarque dans cette figure que ( $\Delta n(z)$  ou  $\Delta p(z)$ ) prend la forme d'une Gaussienne (ce résultat est similaire à celui trouvé dans la littérature figure I.15)

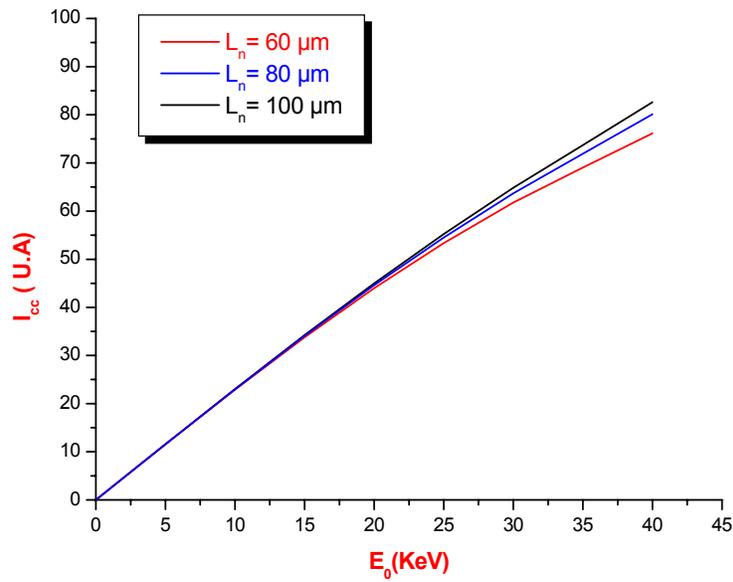
Il est clair que la forme générale de ces concentrations ( $\Delta n(z)$  ou  $\Delta p(z)$ ) présente un maximum dans le domaine des faibles énergies, puis décroît rapidement dans celui des fortes énergies. Le point, le plus essentiel à remarquer, est que le profil de distribution présente un maximum qui s'éloigne de la surface du dispositif lorsque l'énergie croît .



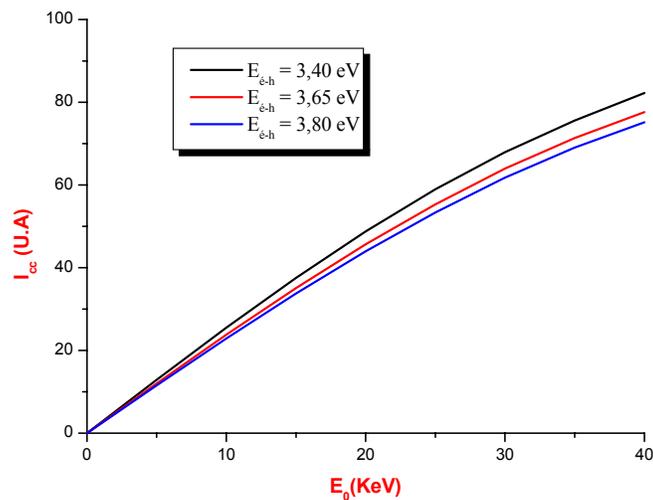
**Figure III.5.** Profil de distribution pour 100 électrons pénétrants

### III.5. Le courant collecté $I_{cc}$ :

Les figures (III.6) et (III.7) représentent le courant EBIC trouvé respectivement pour différentes valeurs de la longueur de diffusion et ceux de l'énergie de formation d'une paire (é-h).



**Fig.III.6** Le courant  $I_{cc}$  en fonction de  $E_0$  sous l'influence de  $L_n$  ou  $L_p$



**Fig.III.7** Le courant  $I_{cc}$  en fonction de  $E_0$  sous l'influence de  $E_{e-h}$

A partir des deux figures (III.6) (III.7) on peut remarquer que le signal EBIC en fonction de l'énergie d'accélération augmente d'une façon presque linéaire [le nombre de porteurs de charge générés (collectés  $I_{cc}$ ) augmente quand l'électron pénétrant aura plus d'énergie].

La figure (III.6), nous montre que, le courant EBIC augmente, lorsque la longueur de diffusion augmente.

L'explication physique de cette remarque est la suivante : Quand la longueur de diffusion augmente, les porteurs minoritaires auront plus de chance d'être collectés que d'être recombinés (augmentation de la durée de vie  $L_n = (D_n \tau)^{1/2}$ ).

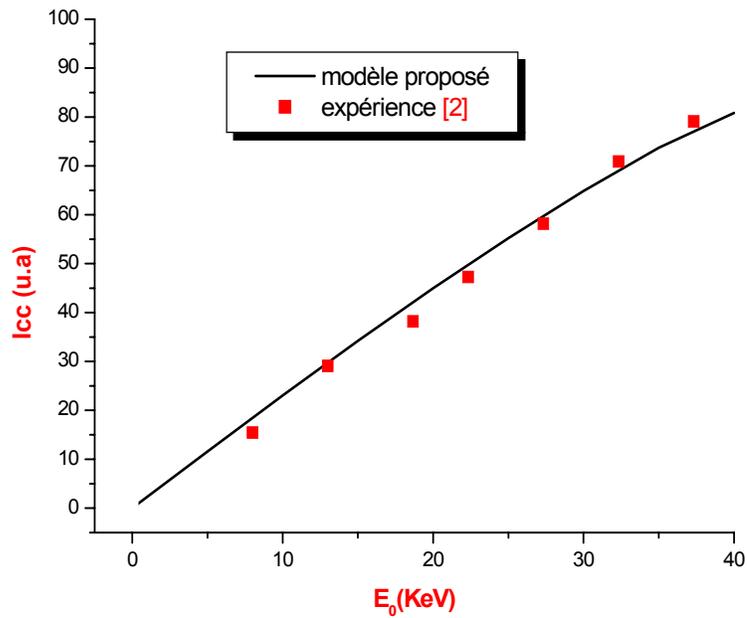
Par contre et dans la figure (III.7) on remarque que le courant collecté diminue lorsque l'énergie de formation d'une paire (é-h) augmente. Ce résultat est la conséquence logique de la cause suivante : Si l'énergie  $E_{é-h}$  augmente, l'énergie de l'électron après la collision (formation d'une paire) sera plus petite. Donc, on aura une diminution du nombre de paires créés par chaque électron incident (diminution du  $I_{cc}$ ).

Ces observations, sont faites, pour les fortes tensions. Par contre, et dans le domaine des faibles tensions, on remarque que le courant n'est pas influencé par la longueur de diffusion (figure III.6) parce que, dans le domaine de ces tensions le volume de génération sera très petit et tous les porteurs seront collectés.

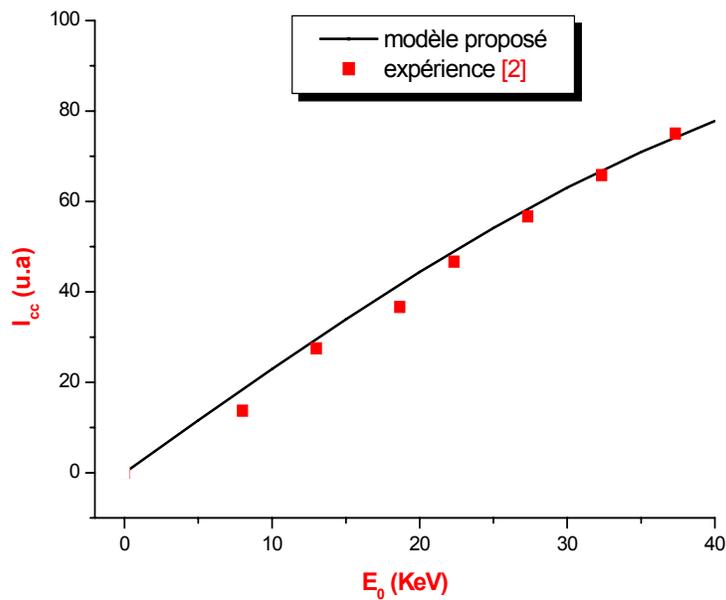
D'autre part, et dans la figure (III.7), on remarque que même dans le domaine des faibles tensions le courant est influencé par l'énergie de création d'une paire (é-h)  $E_{é-h}$ . Cette influence est due essentiellement à la diminution du nombre de paires créés (porteurs minoritaires) lorsque  $E_{é-h}$  même quand on est au tensions faibles.

L'ajustement du résultat de calcul avec les points expérimentaux trouvés par F.Battistella [2], s'est fait en faisant varier les paramètres ( $L_n$  et  $E_{é-h}$ ). Le bon fitting pour le premier échantillon (recuit à 750°C pendant 24h) (ajustage) est réalisé pour les valeurs suivantes :  $L_n=60\mu\text{m}$ ,  $E_{é-h} = 3,8$  eV. Pour le deuxième échantillon (recuit à 450°C pendant 24h), le bon fitting est trouvé pour  $L_n=72\mu\text{m}$ ,  $E_{é-h} = 3,8$  eV.

Donc les figures (III.8) et (III.9) montrent la méthode de détermination de la longueur de diffusion et l'énergie de formation d'une paire (é-h) en utilisant cette comparaison.



**Fig.III.8** L'intensité  $I_{cc}$  en fonction de  $E_0$   
 La ligne continue est le resultat du modèle proposé pour  
 $L_n = 60 \mu\text{m}$  et  $E_{e-h} = 3,8 \text{ eV}$



**Fig.III.9** L'intensité  $I_{cc}$  en fonction de  $E_0$   
 La ligne continue est le resultat du modèle proposé pour  
 $L_n = 72 \mu\text{m}$  et  $E_{e-h} = 3,8 \text{ eV}$

Le tableau (III.1) résume quelques valeurs de  $L_n$  ( $L_p$ ) et  $E_{e-h}$  mesurées par différents auteurs :

Référence		$L_n$ ( $\mu\text{m}$ )	$E_{e-h}$ (eV)
Berz et Kuiken[2]	Brut	57	//
	Recuite à 24 h à 450°C	71	//
	Recuite à 24 h à 750 °C	60	//
Marek[2]	Recuite à 24 h à 450°C	182	//
	Recuite à 24 h à 750 °C	91	//
Donolato[2]	Recuite à 24 h à 450°C	106	3.67
	Recuite à 24 h à 750 °C	92	3.68
Modèle proposé	Recuite à 24 h à 450°C	72	3,8
	Recuite à 24 h à 750 °C	60	3.8

**Tableau III.1**

### **III.6. Conclusion :**

La profondeur de pénétration des électrons et la trajectoire des électrons ont été calculés, et ainsi qu'une comparaison avec d'autres modèles est réalisée.

Les limites du volume de génération ne sont pas bien définies, mais il faut noter qu'il prend la forme d'une poire.

On a trouver aussi, que le profile de distribution prend la forme d'une Gaussienne.

Pour les courbes  $I_{cc}$  en fonction de  $E_0$ , la relation est linéaire. Chaque paramètre du matériau donne sa influence sur l'allure de la courbe  $I_{cc}=f(E_0)$ , ce qui rend possible la détermination de ces paramètres à partir de la comparaison des courbes théoriques avec les résultats expérimentaux.

Cette confrontation, a permis de valider le modèle proposé, et les paramètres dérivés pour les deux échantillons sont respectivement :

$$[L_n = 60 \mu\text{m et } E_{\epsilon-h} = 3,8 \text{ eV}] \text{ et } [L_n = 72 \mu\text{m et } E_{\epsilon-h} = 3,8 \text{ eV}] .$$

## Conclusion générale

## Conclusion générale :

Un modèle numérique dans toutes ses étapes a été élaboré pour simuler la technique du courant induit par faisceau d'électrons (EBIC) qui est utilisée comme technique de caractérisation pour les semiconducteurs.

Ce modèle est basé sur la méthode Monte Carlo. Le principe physique est que la conservation de l'énergie est respecté, c'est-à-dire, chaque électron arrive à la surface de l'échantillon avec une énergie  $E_0$  (l'énergie d'accélération) va perdre son énergie par des collisions aléatoires (le principe de la méthode de Monte Carlo) en créant des paires (é-h). Les paires (é-h) vont se collecter sous forme de courant (EBIC) en utilisant un contact Schottky. L'avantage de ce modèle est qu'on calcule le nombre des paires un par un. La fonction RAN donnée par FORTRAN est utilisée comme générateur de nombres aléatoires. L'angle de direction de l'électron diffusé prend des valeurs aléatoires.

A partir de ce modèle on a trouvé que :

- La trajectoire de l'électron est presque aléatoire.
- Le volume de génération prend une forme de poire, et il est une fonction de l'énergie d'accélération.
- La profondeur de pénétration coïncide avec celle obtenue par d'autres chercheurs, surtout à basse énergie, exceptée celle de Everhart-Hoff.
- Le profil de distribution représente une gaussienne.
- Le signal EBIC en fonction de l'énergie d'accélération augmente d'une façon presque linéaire.
- L'influence de deux paramètres, la longueur de diffusion et l'énergie de création de pair électron-trou, est étudiée.
- La comparaison des courbes obtenues par ce modèle avec les résultats expérimentaux montre une bonne coïncidence et par conséquent on peut déterminer quelques paramètres par le fitting.

### Perspective :

Une amélioration du modèle sera effectuée en étudiant d'autres géométries de la technique EBIC, en traitent le problème à trois dimensions et en prenant en compte d'autre paramètres tel que les défaut de surface. Des nanostructures peuvent être traitées en utilisant ce modèle.

## Références

## Références :

- [1] : S. Najar, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique, France, (1992).
- [2] : F. BATTISTELLA, Thèse de doctorat, Toulouse (1985).
- [3] : Y. Beggah, Thèse de Magister, Univ. Constantine (1992).
- [4] : M. Aven, J. Z. Devine, R. B. Bolon , G.W. Ludwig, J. Appl. Phys.43, p.4136 (1972)
- [5] : A. Eisenbeiss, H. Heinrich,. Opschoor R.P. Tijburg et H. Preier Appl. Phys. Leet. 50, p.1583 (1987)
- [6] : C.J. Wu, D.B. Wittry J. Appl. Phys. 49, p.2827 (1978)
- [7] : N. C. Macdonald, T.E Everhart, Appl. Phys. Lett. 7, p.267 (1965)
- [8] : W.H. Hackett, J. Appl.Phys. 43, p.1469 (1972)
- [9] : U. Werner, F. Koch and G oelgart , J. Phys. D: Appl. Phys. 21, p. 116, (1988).
- [10] : G. Oelgart and U. Werner, Phys. Status Solidi a 85, p.205 (1984)
- [11] : G. Oelgart and H. Scholz H, Phys. Status Solidi a 75, p.547 (1983)
- [12] : P.M. Petroff, « Microscopie électronique en science de matériaux », Edition du CNRS .Paris (1983).
- [13] : C.Frigeri, « EBIC Assesment of semiconductors properties », Sciences, Technology and education of microscopy : an overview.1,1,163, Spain (2003).
- [14] : A.Boudjani, Semicond.Sci. Technol 20,p.175 (2005).
- [15] : M. HadeF, Thèse de Magistère, Univ. Constantine (1999).
- [16] : A. Nouiri, Thèse de doctorat, Univ. Constantine (2000).
- [17] : L. Reimer, « Scanning Electronic Microscope », Springer-Verlag, Berlin (1985)
- [18] : K. Kanaya and S. Okayama, J. Phys. D : Appl. Phys. 5, 43 (1972).
- [19] : J.D. Jackson « Classical Electrodynamics » edited by John-Willey 1975.
- [20] : T. E. Everhart and P.H. Hoff, J. Appl. Phys.42, 5837 (1971)
- [21] :.R. Shimizu and T.E. Everhart, Optik,36,p.59 (1972)
- [22] : E.Napchan and D.B Holt, Proc.of the 5<sup>th</sup> conference on Microscopy of semiconducting Materials, 6-8 April 1987, Oxford, Ed. By A.G. Cullis, IOP L t d Pub. P.733-738 (1987)
- [23] : D.B. Wittry and D.F.Kyser, J.Appl. Phys. 49, 2827 (1978)

- [24] : D.F. Kyser, Proc. Of the 6<sup>th</sup> Int. Conf. On X-Rays optics and microanalysis-Osaka, University of Tokyo Press-Tokyo- P.147 (1972)
- [25] : B.G. Yacobi and D.B. Holt, J. Appl. Phys. 59, 4, R1 (1986)
- [26] : C.Bussolati, A. Fioreutini and G. Fabri, Phys.Rev.136, A1756 (1964)
- [27] : R.H.Pehl, F.S.Goulding,D.A.Landis, and M.Leuzinger,Nucl.Instr.Methods, 59,45 (1968).
- [28] : J.F.Bresse, Proc.5<sup>th</sup> Ann.Symposium (II TRI, Chicago), 105 (1972)
- [29] : R.D.Ryan, IEEE Trans.Nucl.Sci. Nci. NS-20, 473 (1973)
- [30] : W.W.Siekanowicz, H.C.Huang, R.E.Enstron, R.U.Martinelli, S.Ponezak, and J. Olmstead , IEEE Trans. Electron Devices, 21, ED-691 (1974).
- [31] : M.R. Normadi and H.W. Thompson, Jr. Sol. Stat. Elec., 18,499(1975)
- [32] : J.F.Bresse, these de docteur ingénieur, Université de Grenoble (1972)
- [33] : T.Matsukawa, R. Shimizu, K.Harada et T.Kato J. APPL. Phys.45, p.733 (1974)
- [34] : P. Baranski, V. Klotchkov, I. Potykévitch, « Electronique des semiconducteurs », Tome 1, Edition Mir. Moscou, 369 (1975).
- [35] : S-M.Sze, « semiconductor Device Development in the 1970s and 1980s – A perspective», IEEE Tech. Dig., Int. Electron Device Meet. , Washington, D.C., Dec.,(1980).
- [36] : N. Scala rand E. Burstein, Phys. Rev. 98, 1757 (1955)
- [37] : F. Lévy, « Physique et technologie des semiconducteurs », presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1995).
- [38] : M. Gerl, J-P.Issi, «Physique des matériaux », presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1997).
- [39] : H. Mathieu « physique des semiconducteurs et des composants électroniques », Masson, Paris (1987).
- [40] : D.E.Carlson, C.W. Magee, Proc.2<sup>nd</sup> EC Photovoltaic Solar Energy Conference, Berlin (1979), p.312.
- [41] : J.P.Nougier, « Méthodes de calcul numérique», Masson, Paris (1987).
- [42] : B.Lapeyre, E. Pardoux, R. Sentis. « Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion », Springer, Berlin (1998).
- [43] : D .Landau, K. Binder, « Monte Carlo Simulation in statistical Physics »,university press, Cambridge (2002).

- [44] : M.F. Bencharif, Thèse de Magister, Univ. Constantine (2005).
- [45] : Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for Scientists and Engineers(2003).
- [46] : A.Nouiri, M-F. Bencharif, Z. Elateche, Proc. 8<sup>ème</sup> Arab congress, Alexendria, Egypt, (2005).

## Résumé

Dans ce présent travail, nous avons étudié le **phénomène** de l'interaction électron-matière (SC) en élaborant un modèle numérique pour simuler la technique EBIC en utilisant la méthode Monte Carlo.

La procédure de calcul utilisé dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons et l'influence des paramètres du faisceau électronique (nombres des électrons  $n_{el}$  et l'énergie d'accélération  $E_0$ ) ainsi que celle des paramètres physiques du matériau (longueur de diffusion  $L_n$  et l'énergie de formation d'une paire électron-trou  $E_{e-h}$ ).

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 la valeur de certains paramètres physiques caractérisants l'échantillon du "Si" considéré. Ce point nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique élaboré, il est fiable pour la description de l'interaction électron-matière (SC).

**Mots clés** : Interaction, EBIC, Simulation Monte Carlo, longueur de diffusion, Energie de formation d'une paire é-h, Silicium.

---

---

(EBIC)

$E_0$        $n_{el}$       )  
(      -       $L_n$       )

---

---

## Abstract

In this present work, we studied the **of electron-matter** (SC) interaction phenomenon by elaboration of a numerical model to simulate the EBIC technique by using the Monte Carlo method. The procedure of calculation used in this modelling takes into count the random walk of the electrons and the influence of the electronic beam parameters (electrons numbers  $n_{el}$  and the acceleration energy  $E_0$ ) and the physical parameters of the material (diffusion length  $L_n$  and the formation energy of pair electron-hole pair  $E_{e-h}$ ).

Our results are compared with those of the experiments data available in the literature, as well as other

theoretical results and they are in concord. This comparison made it possible to deduce some physical parameters value characterizing the sample considered (Silicon). This point enabled us to note that in spite of the simplicity of the elaborate numerical model, it is reliable for the description of the interaction electron-matter (SC).

**Keywords:** Interaction, EBIC, Monte Carlo simulation, diffusion length, Energy of formation of a pair  $e-h$ , Silicon.

## Résumé :

Dans ce présent travail, nous avons étudié le phénomène de l'interaction électron-matière (SC) en élaborant un modèle numérique pour simuler sur la technique EBIC en utilisant la méthode Monte Carlo.

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  $n_{el}$  et l'énergie d'accélération  $E_0$ ) ainsi que celle des paramètres physiques du matériau (longueur de diffusion  $L_n$  et l'énergie de formation d'une paire électron-trou  $E_{e-h}$ ).

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 la valeur de certains paramètres physiques caractérisants l'échantillon du "Si" considéré. Ce point nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique élaboré, il est fiable pour la description de l'interaction électron-matière (SC).

---

**Mots clés :** Interaction, EBIC, Simulation Monte Carlo, longueur de diffusion, Energie de formation d'une paire é-h, Silicium.

---

(EBIC)

$$\left( \mathbf{E}_{e-h} - \left( \mathbf{E}_0 \quad \mathbf{n}_{el} \right) \mathbf{L}_n \right)$$

Abstract

In this present work, we studied the electron-matter (SC) interaction phenomenon by elaboration a numerical model to simulate the EBIC technique by using the Monte Carlo method.

The procedure of calculation used in this modelling takes into count the random walk of the electrons and the influence of the electronic beam parameters (electron numbers  $n_{el}$  and the acceleration energy  $E_0$ ), and the physical parameters of the material (diffusion length  $L_n$  and the formation energy of a pair electron-hole pair  $E_{e-h}$ ).

Our results are compared with those of the experiments data available in the literature, as well as other theoretical results and they are in concord. This comparison made it possible to deduce some physical parameters values characterizing the sample considered (silicon). This point enabled us to note that in spite of the simplicity of the elaborate numerical model, it is reliable for the description of the interaction electron-matter (SC).

---

---

**Keywords:** Interaction, EBIC, Monte Carlo simulation, diffusion length, Energy of formation of a pair  $e-h$ , Silicon.