

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

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

N° d'ordre :  
Série :

**THESE**

**PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT EN SCIENCES  
PHYSIQUE**

**SPECIALITE : SCIENCES DES MATERIAUX**

**OPTION: SEMICONDUCTEURS**

**THEME**

**Etude de l'interaction électron-matière des  
nanostructures de l'arséniure de gallium**

**PAR :**

**AOUATI REDHA**

SOUTENUE LE : 15 / 09 / 2011

**Devant le jury :**

<b>Président :</b>	B. Boudine	Prof.	Université Mentouri Constantine
<b>Rapporteur :</b>	A. Nouiri	Prof.	Université Oum-El-Bouaghi
<b>Examineurs :</b>	M. T. Belahrache	Prof.	Université Mentouri Constantine
	M. Zaabat	Prof	Université Oum-El-Bouaghi
	M. Ledra	M.C.A	Université Mohamed Khider Biskra

## بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

والحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات والصلاة والسلام على أشرف المرسلين سيدنا محمد النبي الأمين المبعوث هدى ورحمة للعالمين وعلى آله وصحبه أجمعين. ولما كان طلب العلم فريضة على كل مسلم ومسلمة كان لزاما علينا أن نبدل الغالي والنفيس من أجل هذا الواجب المقدس خاصة وأن رسالة الإسلام أول ما بدأت تحت عيله هو طلب العلم والقراءة في قوله عز وجل في القرآن الكريم " **إقرأ باسم ربك الذي خلق الإنسان من علق** علق **إقرأ وربك الأكرم الذي علم بالقلم علم الإنسان ما لم يعلم** " سورة العلق.

فكان للإسلام السبق منذ القدم في الحث على طلب العلم . فالحمد لله الذي وفقنا في نيل نصيب منه واسأله تعالى أن يوفقنا إلى خير من هذا وأبعد وأن يجعلنا ممن ينتفع بعلمه وينفع وأن يجعلنا من المصلحين في أرضه وأن يفع بنا راية الإسلام والمسلمين والحمد لله على إتمام هذه الأطروحة والله الموفق وهو يهدي السبيل.

تمت بحمد الله وعونه هذه الرسالة يوم 21 شوال 1432

# إهداء

إلى من جرع الكأس فارغاً ليسقيني قطرة حب  
إلى من كلت أنامله ليقدّم لنا لحظة سعادة  
إلى من حصد الأشواك عن دربي ليمهد لي طريق العلم  
إلى القلب الكبير والذي العزيز

إلى من منحني الحب والحنان  
إلى رمز الحب وبلسم الشفاء وريحانة الدنيا  
إلى القلب الناصع بالبياض والدي الحبيبة

إلى القلوب الطاهرة الرقيقة والنفوس البرينة إلى رياحين حياتي إخوتي

الآن تفتح الأشرطة وترفع المرساة لتنتقل السفينة في عرض بحر واسع مظلم هو بحر الحياة وفي  
هذه الظلمة لا يضيء إلا قنديل الذكريات ذكريات الأخوة البعيدة إلى الذين أحببتهم وأحبوني  
في الله أصدقائي وزملائي الأعزاء

لكم جميعاً أهدي هذا العمل.....

## Remerciements

Cette étude a été réalisée au niveau de département de physique de l'université Mentouri Constantine, sous la direction de Monsieur Nouri Abdelkader.

Je tiens à adresser toute ma gratitude à Monsieur **Nouri Abdelkader**, Professeur à l'université de Oum-El-Bouaghi, pour son encadrement durant deux années de magister et aussi pour quatre années de doctorat et pour tout les conseils qui m'apporté, malgré sa charge croissante de responsabilités.

Je remercie Monsieur **Boudine Boubekur**, Professeur à l'université de Mentouri Constantine, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de thèse.

Je tiens à remercier Monsieur **Ledra Mohamed**, Maître de conférence à l'université de Mohamed Khider- Biskra, d'avoir accepté de participer au jury de soutenance.

Je remercie également Monsieur **Belahrache M. Tahar**, Professeur à l'université de Mentouri Constantine, d'avoir accepté de participer au jury de soutenance.

Je suis reconnaissant envers **Zaabat Mourad**, professeur à Professeur à l'université d'Oum-El-Bouaghi, pour avoir fait partie de mon jury.

Je remercie également Monsieur **Medjroubi M. Larbi**, pour les touches et les points finals de ce travail, mercie également à mes amis et mes collègues pour la contribution amicale dans ce travail.

Enfin un grand merci à ceux qui m'ont encouragé tout au long de mes études et sans qui rien de tout cela n'aurait été possible : à mes parents ...

# **Sommaire**

## Sommaire

<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I : Les Nanostructures de GaAs</b>	
I.1 Les matériaux semiconducteurs III-V massifs.....	4
I.1.1 Introduction.....	4
I.1.2 Propriétés cristallines .....	5
I.1.3 Propriétés électroniques .....	6
I.1.3.1 Introduction .....	6
I.1.3.2 Structure de bande .....	7
I.1.3.3 Impuretés, dopage et conduction .....	8
I.2 L'alliage AlGaAs .....	8
I.3 Les nanostructures et les hétérostructures de semi-conducteurs III-V .....	12
I.3.1 Puits quantiques .....	12
I.3.2 Les hétérostructures.....	13
I.3.3 Diagramme de bande d'énergie.....	14
I.3.4 Les Hétérojonction de GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As.....	16
I.3.5 Les propriétés électroniques d'hétérostructures.....	19
I.3.5.1 Niveaux d'énergie électronique dans un puits quantique.....	19
I.3.6 Les structures à Multipuits quantiques.....	20
I.3.7 Propriété électronique des nanostructures et des nanocristaux.....	21
I.3.7.1 Confinement quantique.....	21
I.3.7.2 Effet de la réduction des dimensions des cristallites sur la structure électronique.....	22
I.4 Techniques de croissance.....	23
I.4.1 L'épitaxie par jets moléculaires d'hétérostructures AlGaAs/GaAs.....	23
I.4.1.1 Introduction.....	23
I.4.1.2 Processus de croissance des hétérostructures AlGaAs/GaAs.....	24
I.4.2 Autres techniques de croissance.....	26

## Chapitre II : interaction électron matière et méthodes de caractérisation des nanostructures

II.1 L'interaction électron matière.....	28
II.1.1 Introduction.....	28
II.1.2 Rappels sur les interactions électrons-matière.....	28
II.1.2.1 Interactions élastiques.....	28
II.1.2.1.1 Théorie élémentaire.....	28
II.1.2.1.2 Conséquences des interactions élastiques.....	30
a) Effet thermique.....	30
b) Effet chimique.....	30
c) Effet du déplacement atomique.....	30
II.1.2.1.3 Caractéristiques de la diffusion élastique.....	30
II.1.2.2 Interactions inélastiques.....	31
II.1.2.2.1 Théorie élémentaire.....	31
II.1.2.2.2 Conséquences des interactions inélastiques.....	32
a) Excitation des niveaux de conduction ou de valence.....	32
b) Excitation des niveaux atomiques profonds.....	32
II.1.2.3 Caractéristiques de la diffusion inélastique.....	33
II.1.2.4 Particules et rayonnements émis.....	34
a) Les électrons rétrodiffusés.....	35
b) Les électrons secondaires.....	35
II.1.2.5 Recombinaison.....	37
II.1.2.5.1 Introduction.....	37
II.1.2.5.2 La recombinaison bande à bande.....	37
II.1.2.5.3 La recombinaison bande – impureté.....	37
a) Recombinaisons donneur neutre - bande de valence ( $D_0, h$ ).....	37
b) Recombinaison bande de conduction - accepteur neutre ( $e, A_0$ ).....	38
II.1.2.5.4 Recombinaison donneur - accepteur neutres ( $D_0, A_0$ ).....	38
II.1.2.5.5 La recombinaison Auger.....	38
II.1.2.5.6 La recombinaison excitonique.....	38
a) Exciton libre.....	38

b) Exciton lié.....	38
II.1.2.5.7 Recombinaison radiative/non-radiative.....	39
II.1.2.6 Profondeur de pénétration.....	40
II.1.2.7 Dissipation de l'énergie du faisceau électronique par Choc Inélastique.....	41
II.1.2.8 Énergie de formation de paires électron-trou.....	41
II.2 Méthodes de caractérisation des nanostructures.....	41
II.2.1 Microscopie électronique à balayage.....	41
II.2.1.1 Introduction.....	41
II.2.1.2 Formation de l'image et modes d'imagerie.....	42
a) Appareillage.....	42
b) Interaction faisceau-échantillon.....	42
c) Modes d'imagerie.....	43
II.2.2 Cathodoluminescence .....	44
II.2.2.1 Création de paires électron-trou.....	44
II.2.2.2 Cathodoluminescence et recombinaison radiative dans les semi-conducteurs	44
II.2.3 Courant induit d'échantillon.....	46
a) principe .....	46
b) Configuration expérimentale.....	47
II.2.4 Microscopie capacitive à balayage (MCB).....	47
II.2.5 Cathodoluminescence en champ proche optique.....	49

## Chapitre III : Modélisation

III.1 Introduction .....	50
III.2 La Méthode Monte Carlo.....	50
III.2.1 Introduction .....	50
III.2.2 Quelques Applications de la méthode Monte Carlo .....	51
III.2.2.1 Simulation de trajectoires avec collisions .....	51
III.2.2.2 La marche aléatoire.....	52
III.2 Génération de nombres aléatoires.....	52
III.2.1 La fonction Ran .....	52
III.2.2 Définition de la fonction Ran .....	52
III.2.3 La syntaxe de la fonction Ran.....	53

III.3 Détails du modèle .....	54
III.3.1 Les bases physiques.....	54
III.3.1.2 Diffusion des électrons à travers les puits quantiques .....	56
III.3.2 Les étapes de calcul .....	59
III.3.2.1 Puits quantique perpendiculaire ( $\text{Al}_{55}\text{Ga}_{45}\text{As}/\text{GaAs}$ ).....	59
III.3.2.1.1 Trajectoire des électrons.....	60
III.3.2.1.2 Profondeur de pénétration.....	60
III.3.2.1.3 Profil de distribution (génération des porteurs en excès).....	61
III.3.2.1.4 Calcul de signal CL (recombinaison des porteurs en excès) .....	62
III.3.2.1.5 Organigramme.....	64
III.3.2.2 Multi puits quantiques parallèles ( $\text{Al}_{55}\text{Ga}_{45}\text{As}/\text{GaAs}$ ).....	65
III.3.2.2.1 Trajectoire des électrons.....	65
III.3.2.2.2 Profondeur de pénétration.....	65
III.3.2.2.3. Calcul de nombre de paires ( $\Delta n_i$ ) généré.....	66
III.3.2.2.4 Calcule le signal cathodoluminescence.....	68
III.3.2.2.5 Organigramme.....	69
III.4. Conclusion.....	70

## Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1 Introduction.....	71
IV.2 Trajectoire des électrons.....	71
IV.3 Volume de génération.....	73
IV.4 La profondeur de pénétration .....	74
IV.4.1 Profondeur de pénétration pour GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .....	74
IV.5 Profil de distribution .....	75
IV.5.1 Profil de distribution pour GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .....	75
IV.5.2 Profil de distribution des porteurs en excès pour AlAs/GaAs .....	76
IV.6 Signal cathodoluminescence $I_{\text{CL}}$ .....	77
IV.6.1 Signal cathodoluminescence $I_{\text{CL}}$ dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ massive.....	77
IV.6.2 Signal cathodoluminescence $I_{\text{CL}}$ dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ .....	78
IV.6.3 Influence de la longueur de diffusion $L_D$ dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ .....	79
IV.6.4 Influence de l'épaisseur de la barrière de potentiel dans l' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$ ... 80	

---

IV.7 Signal CL dans une hétérostructure parallèle au faisceau.....	81
IV.7.1 Influence de largeur du puits quantique.....	81
IV.7.2 Influence de longueur de diffusion.....	82
IV.7.3 Influence de l'énergie d'accélération.....	84
IV.7.4 Comparaison avec l'expérimental.....	86
IV.7.4.1 Simulation de l'intensité d' $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ à puits quantique.....	86
IV.7.4.2 Simulation de l'intensité de $\text{GaAs}/\text{AlAs}/\text{GaAlAs}$ multipuits quantiques.....	87
IV.8 Conclusion.....	88
<b>Conclusion générale</b> .....	89
<b>Références</b> .....	91
<b>Annexe</b>	

# **Introduction générale**

## **Introduction générale :**

L'interaction électron-matière conduit à plusieurs processus physiques et excitations électroniques produisant des signaux qui permettent la caractérisation des matériaux (électrons secondaires, électrons rétrodiffusés, rayons X, photons...).

En plus de l'information structurale donnée par certains processus tels que la canalisation des électrons, d'autres processus tels que la cathodoluminescence CL et le courant induit par le faisceau électronique (EBIC) produisent des informations sur les sites de recombinaison des porteurs libres et les propriétés électroniques.

La CL est l'émission de lumière sous l'effet du bombardement électronique. Les mécanismes conduisant à cette émission de lumière dans un semiconducteur sont similaires pour les différentes formes d'excitation. Cependant la comparaison de la CL avec d'autres techniques de la luminescence telles que la photoluminescence PL et l'électroluminescence EL donne des résultats similaires avec quelques différences associées aux détails des processus d'excitation des paires électrons-trous par exemple le taux et le volume de génération. Aussi l'excitation par un faisceau électronique conduit en général à l'émission de lumière par tous les mécanismes de luminescence présents dans le semiconducteur, alors que l'émission de la PL dépend fortement de l'énergie d'excitation qui peut donner des informations complémentaires importantes (excitation sélective).

L'avantage de CL, en plus de la haute résolution spatiale, est la capacité d'obtenir une information résolue en profondeur en faisant varier l'énergie du faisceau électronique.

Cette intervention passe en revue le principe et les applications de la CL en microscopie électronique à balayage dans l'évaluation des propriétés électroniques des semiconducteurs. Cette évaluation inclut l'activité électrique des différents défauts et leur distribution, la détermination des paramètres physiques de ces défauts et des porteurs libres générés par le faisceau électronique.

En effet, l'interaction électron-matière offre la possibilité de déterminer avec succès des informations quantitatives et qualitatives aux propos, des paramètres électriques et optiques des matériaux. Comme l'étude de la nanostructure AlGaAs/GaAs par la cathodoluminescence (CL) exige une bonne simulation fiable et exacte de signal CL, et comme la génération des paires  $e-h$  provient de la dissipation de l'énergie du faisceau d'électrons dans la matière, et

puisque la diffusion des électrons se fait d'une façon aléatoire nous avons choisi la méthode Monte Carlo (MC) comme méthode de simulation.

D'autre part, l'élaboration des premières couches minces semi-conductrices, au début des années 1970, a ouvert le vaste champ de recherche des hétérostructures semi-conductrices.

Les puits quantiques furent les premières structures réalisées. Elles se distinguent du matériau massif par leur caractère bidimensionnel et la quantification partielle des excitations électroniques induite par le confinement. Les multipuits quantiques et les hétérojonctions à base de semi-conducteurs III-V sont au cœur de cette thèse.

Les puits quantiques et les hétérojonctions donc forment une classe d'hétérostructures dont les propriétés, au moins dans leurs caractéristiques les plus générales, reflètent la spécificité de leur dimensionnalité.

Le travail proposé dans ce sujet appartient au domaine de la physique numérique et simulation, le progrès réalisé dans le domaine de l'ordinateur a permis d'utiliser la méthode de Monte Carlo.

Malgré les travaux réalisés dans le domaine de l'interaction électron-matière, il reste toujours quelques problèmes quand on prend le cas des hétérostructures ou les multicouches nanostructures, en particulier, la mauvaise résolution d'image CL à l'échelle nanométrique.

L'objectif général de notre travail est de calculer la profondeur de pénétration ainsi que le parcours électronique (la trajectoire des électrons) dans l'hétérostructure à puits quantique d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  et leur variation en fonction de l'énergie d'accélération. On a également étudié l'intensité de signal cathodoluminescence  $I_{\text{CL}}$  dans la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  à un seul puits quantique et la structure  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  (multipuits quantiques) dans le but est de déterminer les paramètres responsables de la résolution de l'imagerie CL.

Ce présent travail est organisé en quatre chapitres comme la suite :

**Chapitre I :** dans ce chapitre nous exposons une étude bibliographique sur les matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les hétérostructures de type  $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$  à puits quantiques, leurs propriétés électroniques et optiques, et leurs techniques de croissance

**Chapitre II :** Nous présentons dans ce chapitre un rappel théorique concernant l'interaction électron matière et les différents modèles théoriques décrivant la profondeur de pénétration et

la dissipation d'énergie des électrons incidents dans les solides, la génération des paires électron trou dans les semi-conducteurs, les principes de la technique cathodoluminescence, et quelques techniques de caractérisation des nanostructures

**Chapitre III :** contient le détail de notre modèle proposé, on utilise la méthode Monte Carlo et la technique de la cathodoluminescence, c'est l'intérêt essentiel de ce travail, où les bases physiques de calcul sont bien détaillées, avec des organigrammes qui sont les représentations synthétiques des diverses parties du programme Fortran.

**Chapitre IV :** comporte les résultats du calcul de la trajectoire des électrons, la profondeur de pénétration  $R(E_0)$ , le profil de distribution  $D(n)$  et l'intensité  $CL(E_0)$  pour la structure AlGaAs/GaAs à un seul puits quantique (la diode laser).

Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons calculé l'intensité du signal cathodoluminescence  $I_{CL}(x)$  en fonction de la fraction molaire  $x$  d'aluminium pour l'hétérostructure à multipuits quantiques AlGaAs/GaAs.

En fin, nous comparons notre modèle numérique avec l'expérience par l'ajustement des courbes théorique avec celles de l'expérience.

# **Chapitre I**

## **Les Nanostructures de GaAs**

## I.1 Les matériaux semiconducteurs III-V massifs :

### I.1.1 Introduction :

Les matériaux semiconducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3ème colonne et d'un élément de la 5ème colonne de la classification périodique. Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure des bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande interdite. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphure de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [1], qui demande des semiconducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [2]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

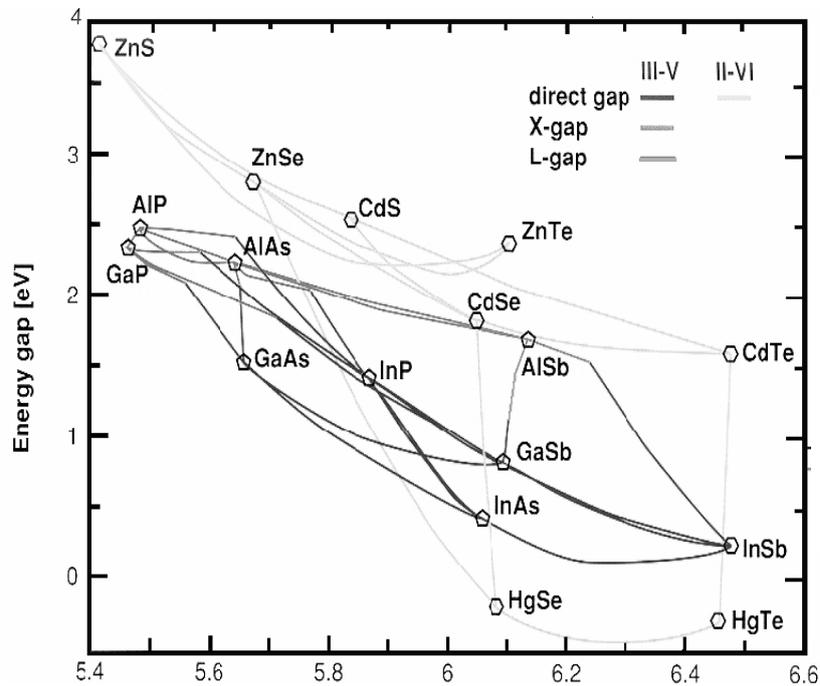
Le tableau (I.1) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	$E_g$ (eV)	$\lambda_g$ ( $\mu\text{m}$ )	$m^*/m_0$	$a_0$ (Å)	Structure de la Bande interdite
<i>AlAs</i>	2,16	0,57		5,661	<i>indirecte</i>
<i>AlSb</i>	1,58	0,75	0,12	6,138	
<i>GaP</i>	2,26	0,55	0,82	5,449	
<i>GaAs</i>	1,42	0,87	0,063	5,653	<i>directe</i>
<i>GaSb</i>	0,72	1,85		6,095	
<i>InP</i>	1,35	0,92	0,08	5,868	

Tableau.I.1. Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.  
 $E_g$  énergie de bande interdite ;  $\lambda_g$  longueur d'onde du seuil d'absorption,  
 $m^*$  masse effective des électrons ;  $a_0$  paramètre de maille du cristal.

L'intérêt pratique des semiconducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ , ou quaternaires comme  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ . Le **figure I.1** représente les variations de la largeur de bande interdite de l'alliage en fonction du paramètre cristallin, qui varie lui-même avec la composition. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux

dont la largeur de bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme.



**Figure I.1:** Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V et II-VI.

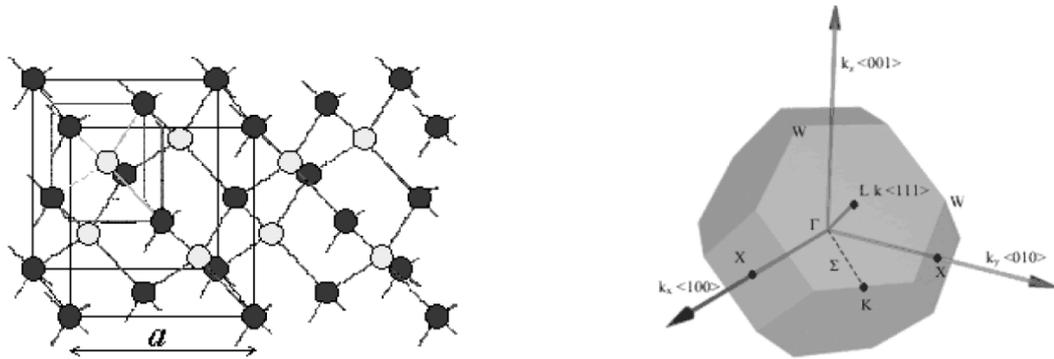
### I.1.2 Propriétés cristallines :

Les semi-conducteurs III-V tels que *GaAs* (arséniure de gallium), *AlAs*, *AlSb*, etc... ont une structure cristallographique de type blende de zinc. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (*Si*, *Ge*, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale (voir la **figure I.2a**, l'atome en rouge représente un élément III par exemple, l'atome en jaune représente un élément V.). La maille élémentaire comporte deux atomes, le premier (*Ga*) à l'origine et l'autre (*As*) à  $(a/4, a/4, a/4)$ , où  $a$  représente le paramètre de maille du matériau.

Du fait que les deux sous-réseaux cubiques à faces centrées sont décalés, le cristal n'est pas centrosymétrique. Il en découle des propriétés physiques différentes suivant les directions cristallographiques considérées.

Les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalentes comme dans le cas du silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V (*As*) sur ceux du groupe III (*Ga*). Dans un cristal composé de l'arséniure de gallium, chaque atome

d'arséniure est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'arséniure. Il se produit alors un échange d'électrons, le cristal se construit avec les ions  $Ga^-$  et  $As^+$ , qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires) qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. Cette propriété est en particulier responsable de l'anisotropie optique dans les hétérostructures semi-conductrices III-V qui a été mise en évidence expérimentalement par Krebs et Voisin [3].



**Figure I.2:** (a) La structure blende de zinc et (b) sa première zone de Brillouin [4].

Le réseau réciproque du réseau de Bravais correspondant à la structure blende de zinc est un réseau cubique centré. La première zone de Brillouin du réseau réciproque a la forme octaèdre tronqué (voir **figure I.1(b)**) par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté  $\Gamma$  et les axes de symétrie  $\Delta$ ,  $\Lambda$ , et  $\Sigma$ . Les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande [4].

### I.1.3 Propriétés électroniques :

#### I.1.3.1 Introduction :

Les matériaux de semi-conducteurs III-V ont huit électrons par cellule unitaire contribuant aux liaisons chimiques. Les autres électrons n'interviennent pas dans les propriétés optiques des hétérostructures. Les orbitales de type  $s$  et de type  $p$  de chaque atome de gallium  $Ga$  s'hybrident avec les orbitales des atomes d'arséniure  $As$ , et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type  $sp^3$  : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antiliantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin, et forment la bande de valence. Cette bande est pleinement occupée par des électrons à  $T=0^\circ K$ , pour un semi-conducteur parfait. Les quatre autres orbitales antiliantes donnent naissance à

quatre bandes supérieures, et forment la bande de conduction qui est inoccupée et est séparée de celle précédente par une bande d'énergie interdite de largeur  $E_g$  (band gap en anglais). Pour les semi-conducteurs à gap direct, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au point  $\Gamma$ . En présence du couplage spin-orbite, l'hybridation des orbitales anti-liantes de type p donne naissance à une bande  $\Gamma_{8c}$  doublement dégénérée et une bande  $\Gamma_{7c}$  distante d'une énergie  $\Delta_1$ . La bande de conduction contient donc une bande  $\Gamma_{6c}$  qui résulte de l'hybridation des orbitales de type s, et les deux bandes  $\Gamma_{8c}$  et  $\Gamma_{7c}$ . De manière similaire, la bande de valence contient une bande  $\Gamma_{8v}$  doublement dégénérée et une bande split-off  $\Gamma_{7v}$  distante d'une énergie  $\Delta_0$ . On montrera dans la troisième section un schéma et les éléments de matrice du semi-conducteur III-V.

### I.1.3.2 Structure de bande :

Le problème de l'électron dans un solide cristallin revient à considérer l'interaction des électrons avec un potentiel périodique. On montre en développant les calculs dans le cristal parfait que les électrons ne peuvent pas occuper un état d'énergie arbitraire, mais qu'ils sont confinés à des bandes d'énergies qui présentent entre elles des zones interdites. Une bande pleine (dont tous les états sont occupés) est inerte pour la conduction électrique et thermique: la conduction est possible seulement lorsqu'une bande est incomplète.

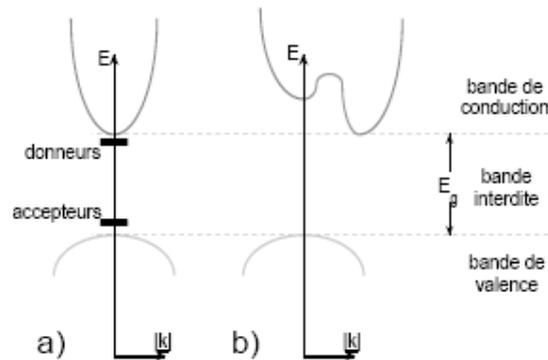
L'occupation des bandes est décrite par une statistique Fermi-Dirac. A température nulle, les états dont l'énergie est inférieure à une énergie  $E_F$  appelée énergie de Fermi sont occupés, et les états dont l'énergie est supérieure à  $E_F$  sont libres. Dans les semi-conducteurs, l'énergie de Fermi est située dans la bande interdite, dont la largeur varie selon le matériau de 0 eV à quelques eV.

Pour avoir conduction, il faut qu'un électron de la bande inférieure passe dans la bande supérieure, ce qui peut être réalisé soit par activation thermique (en augmentant la température), optique (avec des photons d'énergie supérieure à l'énergie de bande interdite) ou électronique.

On se restreint ainsi pour l'étude des propriétés électriques et optiques du matériau aux deux bandes de part et d'autre du niveau de Fermi, nommées bande de valence et bande de conduction. La figure 1.5a schématise l'allure de la densité d'états autour de la bande interdite pour un semi-conducteur à bande interdite directe: les deux bandes présentent un extremum au même point de l'espace des vecteurs d'onde  $k$ . La plupart des semi-conducteurs III-V et II-VI sont à bande interdite directe. Le Si et le Ge, quant à eux, ont une bande interdite indirecte avec des extrema déplacés dans l'espace  $k$ , comme à la figure 1.5b [20].

### I.1.3.3 Impuretés, dopage et conduction :

Les impuretés peuvent être incorporées au semi-conducteur. Elles sont insérées dans le matériau lors de la croissance ou par diffusion, et présentent un nombre d'électrons de valence différent de celui de l'atome qu'elles remplacent. Les impuretés "donneur", par exemple Si sur un site Ga dans le GaAs, possèdent plus d'électrons de valence. Ces électrons surnuméraires ont une énergie située à quelques meV en dessous du minimum de la bande de conduction (**figure I.3a**). Ils peuvent donc facilement passer dans la bande de conduction à  $T > 0$  K. Un comportement analogue décrit les impuretés "accepteur", qui ont un électron en moins (par exemple Be sur un site Ga). Ces impuretés induisent un état libre dans la bande interdite à quelques meV au dessus de la bande de valence (**figure I.3a**). Un électron peut quitter la bande de valence, qui prend alors part à la conduction. On dit dans ce cas que l'accepteur donne un trou à la bande de valence, un trou étant une particule fictive qui décrit un électron manquant. La conduction par les trous est analogue à la conduction par les électrons, sauf que la charge est positive et que la masse effective, qui tient compte des interactions de la particule avec le réseau cristallin, est plus élevée. Dans la bande de valence, on distingue les trous lourds (hh pour "heavy holes") et les trous légers (lh pour "light holes") [20].



**Figure I.3:** Densité d'états au voisinage de  $k = 0$  d'un semi-conducteur (a) à bande interdite directe, et contenant des impuretés donneur et accepteur; et (b) à bande interdite indirecte [20]

## I.2 L'alliage AlGaAs :

L'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  est une solution solide de  $GaAs$  et de  $AlAs$ . Tout paramètre physique relatif à cet alliage peut être obtenu par combinaison des paramètres correspondants au  $GaAs$  et à l' $AlAs$ . Les deux matériaux ont la même structure cristalline. Les paramètres physiques de ces deux matériaux sont voisins et se rejoignent pour une température de 900 °C environ.

La nature de la transition énergétique de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  change selon le taux d'aluminium  $x$ , avec  $0 < x < 1$ . Pour une fraction d'aluminium inférieure à 0,45, la transition de l'alliage est identique à celle du  $GaAs$  caractérisé par une transition directe (le bas de la bande de conduction est la vallée  $\Gamma$ ). Quand le taux d'aluminium devient supérieur à 0,45 la transition devient indirecte comme celle de l' $AlAs$  (le bas de la bande de conduction se déplace vers la vallée  $X$ ). Les différents paramètres physiques de l' $Al_xGa_{1-x}As$  sont donnés en fonction de la fraction  $x$  de l'aluminium. À la température ambiante l'affinité électronique  $\chi$  s'écrit [5] :

$$\begin{aligned} \chi &= 4,07 - 1,1x \quad \text{pour } x < 0,45 \\ \text{et } \chi &= 3,64 - 0,14x \quad \text{pour } 0,45 < x < 1 \end{aligned} \quad (I.1)$$

Les énergies liées à la structure de bandes, peuvent être déduites en fonction de la différence entre les énergies du bas des différentes vallées de la bande de conduction et le haut de la bande de valence. Considérons tout d'abord le sommet de la bande de valence, il est caractérisé par deux propriétés essentielles qui sont communes à tous les semiconducteurs à structure cubique. Il est situé au point  $\Gamma$  qui est le centre de la zone de Brillouin et il est constitué de la convergence de deux bandes qui sont dégénérées au sommet. Compte tenu de l'unicité du point  $\Gamma$  dans la première zone de Brillouin, le maximum de la bande de valence est unique. Le minimum de la bande de conduction présente une situation beaucoup moins uniforme que pour la bande de valence [6].

Comme nous l'avons signalé auparavant, l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  se caractérise par deux transitions, l'une directe et l'autre indirecte selon la fraction de l'aluminium. À température ambiante (300 K) le minimum de la bande de conduction se trouve soit en vallée  $\Gamma$  quand  $x$  est inférieur 0,45, ou en vallée  $X$  quand le taux d'aluminium est supérieur à 0,45 (**figure I.4**). Les différentes valeurs de l'énergie de la bande interdite  $E_g$  en fonction de  $x$ , et l'énergie entre les différentes vallées de la bande de conduction et le haut de la vallée  $\Gamma$  de la bande de valence sont données en  $eV$  par les équations (I.2, I.3, I.4 et I.5) [5]. Dans ces équations  $E_{\Gamma-\Gamma}$ ,  $E_{X-\Gamma}$  et  $E_{L-\Gamma}$  font référence respectivement à la différence d'énergie entre les vallées  $\Gamma$ ,  $X$  et  $L$  de la bande de conduction et la vallée  $\Gamma$  de la bande de valence [6].

$$\begin{aligned} E_g &= 1,4241 + 247x \quad \text{pour } x < 0,45 \\ \text{et } E_g &= 1,9 + 0,125x + 0,143x^2 \quad \text{pour } x > 0,45 \end{aligned} \quad (I.2)$$

$$E_{\Gamma-\Gamma} = 1,424 + 1,155x + 0,37x^2 \quad (I.3)$$

$$E_{X-\Gamma} = 1,9 + 0,124x + 0,144x^2 \quad (I.4)$$

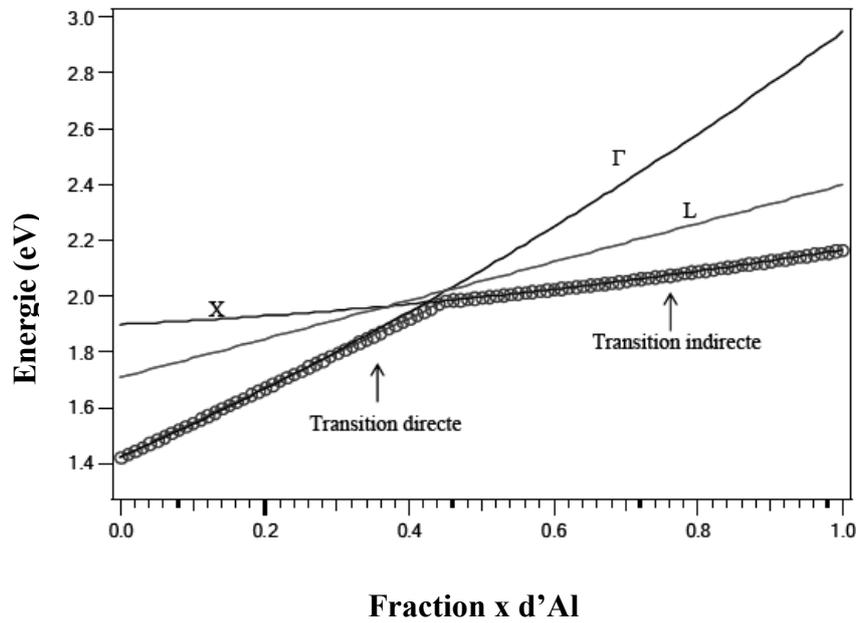
$$E_{L-\Gamma} = 1,71 + 0,69x \quad (I.5)$$

La dépendance de ces énergies (en eV) en fonction de la température s'écrit [7].

$$E_{X-\Gamma} = E_{\Gamma-\Gamma}(0) - 5,41 \cdot 10^{-4} \frac{T^2}{T + 204} \quad (I.6)$$

$$E_{X-\Gamma} = E_{L-\Gamma}(0) - 4,6 \cdot 10^{-4} \frac{T^2}{T + 204} \quad (I.7)$$

$$E_{X-\Gamma} = E_{\Gamma-\Gamma}(0) - 6,05 \cdot 10^{-4} \frac{T^2}{T + 204} \quad (I.8)$$



**Figure I.4:** Evolution de l'énergie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point  $\Gamma$  de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium. Résultats déduits des équations I.3, I.4 et I.5.

Dans ces équations les énergies à la température zéro degré Kelvin sont données par :

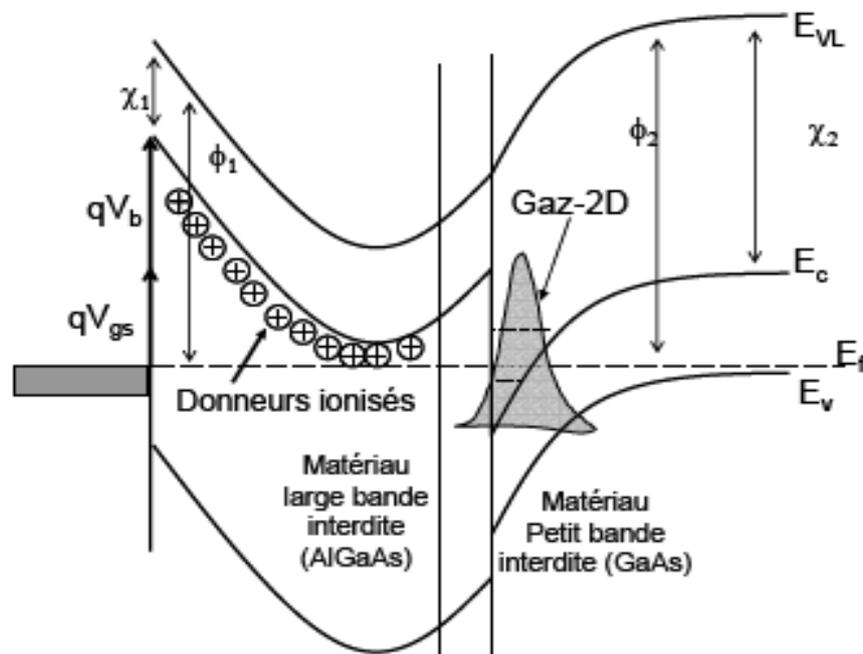
$$E_{X-\Gamma}(0) = 1,981 + 0,124x + 0,144x^2 \quad (I.9)$$

$$E_{\Gamma-\Gamma}(0) = 1,519 + 1,155x + 0,37x^2 \quad (I.10)$$

$$E_{L-\Gamma}(0) = 1,815 + 0,69x \quad (I.11)$$

L'hétérojonction issue de ces deux matériaux (*GaAs* et *AlGaAs*) dans le cas des HEMTs est formée par une couche donneuse *AlGaAs* dopée n, séparée d'une deuxième couche intrinsèque de *GaAs* formant le canal par une couche *AlGaAs* non dopée (espaceur). Les deux matériaux se différencient par leur largeur de bande interdite  $E_g$ , leur travail de sortie  $\phi$  et leur affinité électronique  $\chi$ .  $E_{VL}$ ,  $E_C$  et  $E_V$  représentent respectivement le niveau du vide, l'énergie de la bande de conduction et l'énergie de la bande de valence.

Les différents paramètres relatifs au *GaAs* sont obtenus en donnant à x la valeur zéro dans les équations précédentes.



**Figure I.5:** Diagramme énergétique de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs.

Anderson [8] a donné l'expression de la discontinuité des bandes de valence et de conduction partant de la continuité du niveau du vide.

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \quad (\text{I.12})$$

$$\Delta E_v = (E_{g2} - E_{g1}) - \Delta E_c \quad (\text{I.13})$$

Avec  $E_{g1}$  ( $E_{g2}$ ) et  $\chi_1$  ( $\chi_2$ ) la largeur de la bande interdite et l'affinité électronique d'*AlGaAs* (*GaAs*). Cependant, la détermination exacte des affinités électroniques est difficile. La mécanique quantique permet d'écrire pour l'hétérojonction *AlGaAs/GaAs* :

$$\Delta E_c = (0,85 \pm 0,03)(E_{g2} - E_{g1}) \quad (\text{I.14})$$

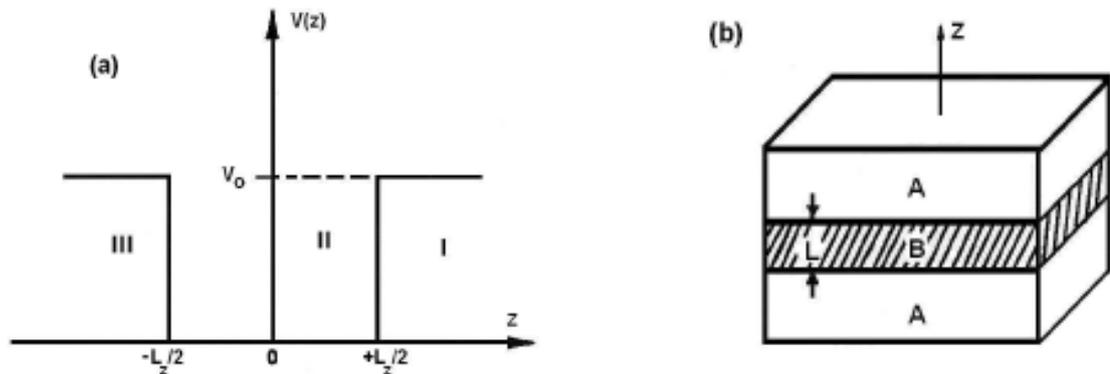
$$\Delta E_v = (0,15 \pm 0,03)(E_{g2} - E_{g1}) \quad (\text{I.15})$$

### I.3 Les nanostructures et les hétérostructures de semi-conducteurs III-V :

Une nanostructure est une structure atomique dont la taille se situe entre celle d'une molécule (de l'ordre de un milliardième de mètre, soit un nanomètre) et celle d'un objet microscopique (pas plus grand qu'une bactérie, soit 100 nanomètres). Il en existe dans la nature mais elles sont aussi fabriquées et utilisées dans de nombreux domaines (nanotubes, nanocomposants électroniques...), les hétérostructures à puits quantiques dans les quels nous avons intéressés.

Dans cette partie de la thèse, nous présenterons brièvement les propriétés électroniques des hétérostructures des semi-conducteurs III-V, les multipuits quantiques et les nanostructures d'*AlGaAs/GaAs*.

#### I.3.1 Puits quantiques :



**Figure I.6:** (a) : PQ carré de largeur  $Lz$  et de hauteur  $V_0$  ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.

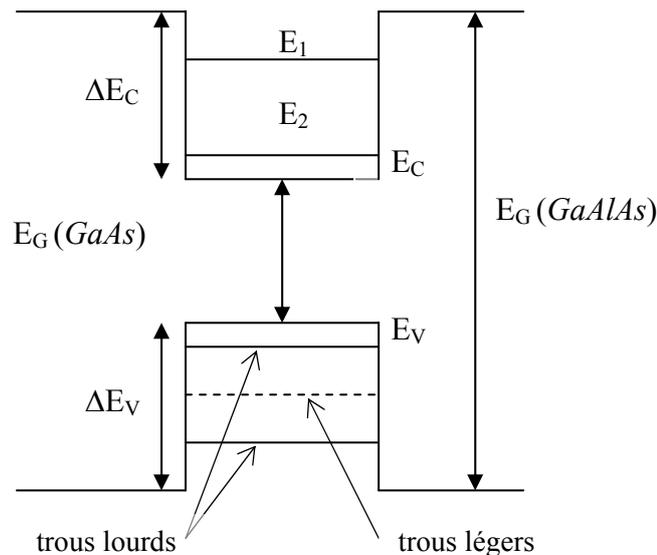
Un puits quantique (PQ) est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur A entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur B. Ce dernier a un gap d'énergie supérieur à celui du matériau A (**figure 1.6.a**). La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans le puits quantique [9].

Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue trois types de puits quantiques :

1) puits quantique de type-I où électrons et trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon émis dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits

2) puits quantiques de type-II où les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux puits et barrière respectivement. Dans ce cas, l'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

3) enfin, dans les puits quantiques dit de type-III (ex : système GaSb/InAs) qui est un cas particulier du type-II, le bas de la bande de conduction est situé en dessous du haut de la bande de valence. Dans cette configuration, dite aussi semi-métallique, l'énergie du photon émis n'est fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, c'est-à-dire, de l'épaisseur des couches puits et barrière [9].



**Figure I.7:** Schéma des bandes d'énergie d'un puits quantique [10].

### I.3.2 Les hétérostructures :

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [11] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé.

Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  par

Dingle et Störmer [12]. Les multipuits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique mésoscopique.

Une hétérostructure est une jonction formée par la juxtaposition de deux matériaux de natures différentes.

Les hétérostructures semiconducteur-semiconducteur sont généralement des hétéroépitaxies car les deux semiconducteurs mis en présence ont la même structure cristallographique (cubique faces centrées la plupart du temps) et un relatif accord de maille. Quand les deux semiconducteurs ont une conductivité du même type, l'hétérostructure est dite isotype. Dans le cas contraire elle est anisotype.

De nombreux composants à hétérostructure ont aujourd'hui produit industriellement, la plupart étant des composants *GaAs/GaAlAs* : diode laser à double hétérostructure, transistors bipolaires hétérojonction, diode laser à puits quantiques... [13].

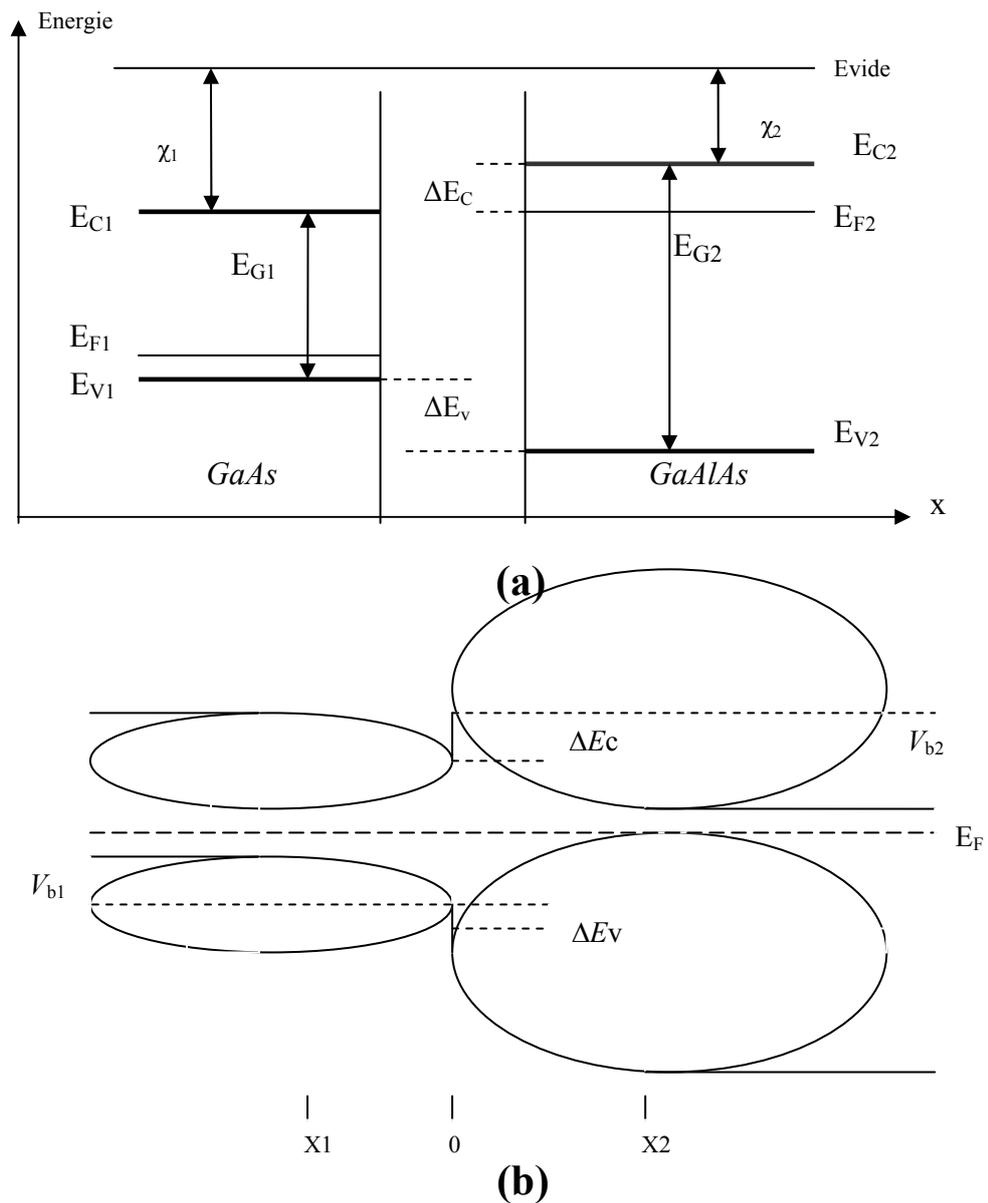
### I.3.3 Diagramme de bande d'énergie :

Lorsque deux semiconducteurs différents sont en contact, il apparaît une barrière de potentiel à l'interface, donnée par [13]:

$$E_b = e(\chi_1 - \chi_2) \quad (\text{I.16})$$

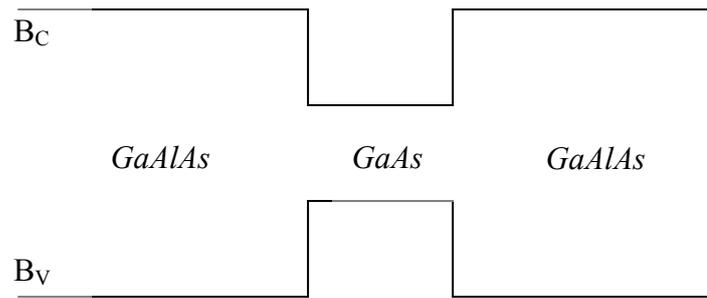
Où  $e\chi_1$  et  $e\chi_2$  représentent les affinités électroniques des semiconducteurs. La forme de cette barrière et le diagramme énergétique correspondant, est en outre fonction des gaps des semiconducteurs de leurs dopages respectifs.

Considérons deux semiconducteurs, par exemple *AlAs* et *GaAlAs*, caractérisés par les affinités électroniques  $e\chi_1$  et  $e\chi_2$  et l'énergie des gaps  $E_{F1}$  et  $E_{F2}$  et le niveau de Fermi à la bande de conduction. En l'absence de tout contact les diagrammes énergétiques dans chacun de semiconducteurs sont représentés sur la **figure I.8.a**. Lorsque les deux semiconducteurs sont mis en contact, ils échangent des électrons de manière à aligner leurs niveaux de Fermi. Cette échange se fait au voisinage de la jonction et fait apparaître, comme dans la jonction p-n, une charge d'espace à laquelle est associée une barrière de potentielle (la tension de diffusion  $V_d$ ) qui arrête la diffusion des porteurs et définit l'état d'équilibre, le Schéma de bandes d'énergie d'hétérojonction *GaAlAs/AlAs* est représenté sur la **figure I.8.b**.



**Figure I.8:** (a) Structure de bandes d'énergie pour *GaAs* et *GaAlAs*.  
 (b) Schéma de bandes d'énergie d'hétérojonction *GaAlAs/AlAs*

Pour simplifier les études théoriques, il est courant d'adopter en première approximation un schéma de bandes plates (**figure I.9**). Nous verrons que c'est le schéma de bandes classique retenu dans l'étude des lasers à puits quantique. Il existe plusieurs types de contacts semiconducteur-semiconducteur. Les valeurs de gap, de dopage et d'affinités électroniques déterminent la nature de contact entre les deux semiconducteurs.



**Figure I.9:** Schéma de bandes d'un laser à puits quantique [13].

### I.3.4 Les Hétérojonction de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ :

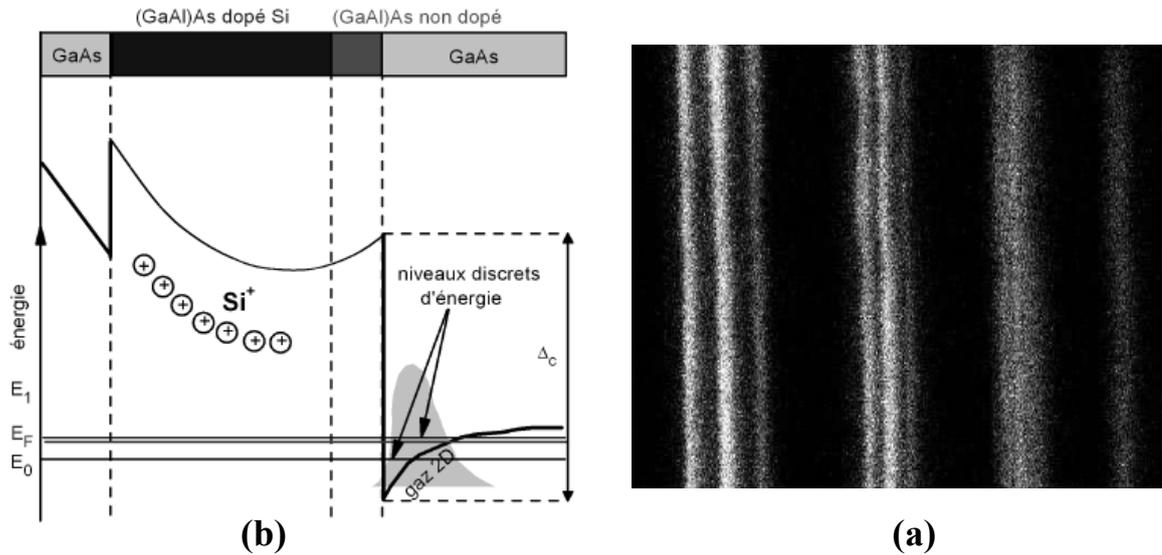
Le semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur pur, c'est à dire dans lequel il y a très peu d'impuretés. Il ne conduit pas l'électricité à très basse température.

Tous les électrons dans le cristal sont utilisés pour former les liaisons solides. Il n'y a pas d'électrons libres. Pour pouvoir conduire l'électricité, on devra introduire des porteurs (soit des électrons, soit des trous), cette étape est connue sous le nom de "dopage". Cependant, ce dopage introduit des impuretés qui diffusent très fortement les porteurs. Dans le cas du matériau massif, ce dilemme est infranchissable.

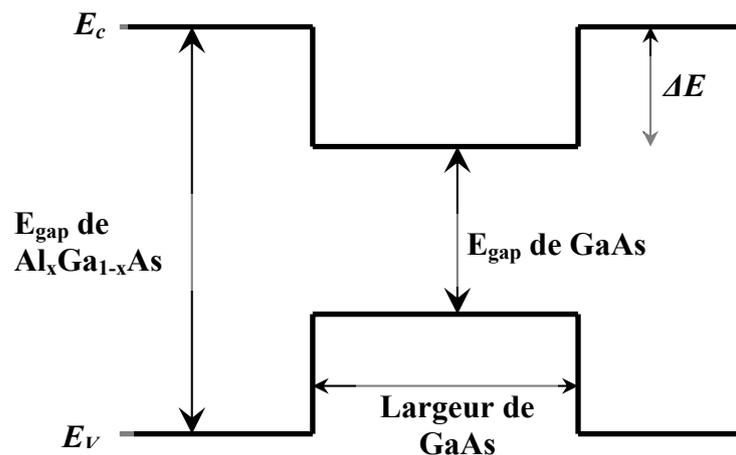
Alors que dans le système bidimensionnel, on peut introduire une couche séparatrice appelée espaceur, qui permet de séparer les porteurs mobiles de leurs centres d'impuretés. Cette couche n'est pas très épaisse pour que les impuretés puissent transférer leurs porteurs, mais elle n'est pas non plus mince afin de diminuer l'interaction de Coulomb entre le centre d'impuretés et leurs porteurs. L'hétérojonction à dopage modulé est un système constitué de deux semi-conducteurs dont la bande interdite est différente. Pour le cas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , elle est obtenue par la croissance sur un substrat GaAs d'épaisseur de l'ordre de  $2\ \mu\text{m}$  d'une succession de couches de grande bande interdite  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (qui jouent le rôle de barrières) et de couches de petite bande interdite GaAs (qui jouent le rôle de puits). Ces deux semi-conducteurs formant le puits et la barrière sont pratiquement en accord de maille.

Ceci permet d'avoir des hétéro-interfaces sans défaut, sans contrainte et de hautes qualités. Au cours du processus de la croissance, les dopants sont introduits dans la barrière, une couche séparatrice d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  non-dopée est mise entre la barrière et le puits permettant de faire varier la mobilité des électrons situés à l'interface du GaAs et de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (voir la **figure I.10**). L'épaisseur de cette couche séparatrice est de l'ordre de 15 nm. Du fait de la discontinuité de la bande de conduction (et la bande de valence) à l'interface, les donneurs transfèrent donc spontanément et irréversiblement leurs électrons dans le semi-conducteur de faible bande interdite (GaAs). Les porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons (ou de trous)

formés à l'interface d'  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  et GaAs sont confinés suivant la direction de croissance  $z$  et sont libres dans les deux autres directions  $x, y$ . Les électrons sont confinés selon la direction  $z$  par un potentiel de confinement  $V(z)$ . Ce potentiel est composé d'une part la discontinuité de la bande de conduction  $\Delta E_c$  et d'autre part du potentiel électrostatique  $\phi(z)$  issu du processus de transfert de charges.



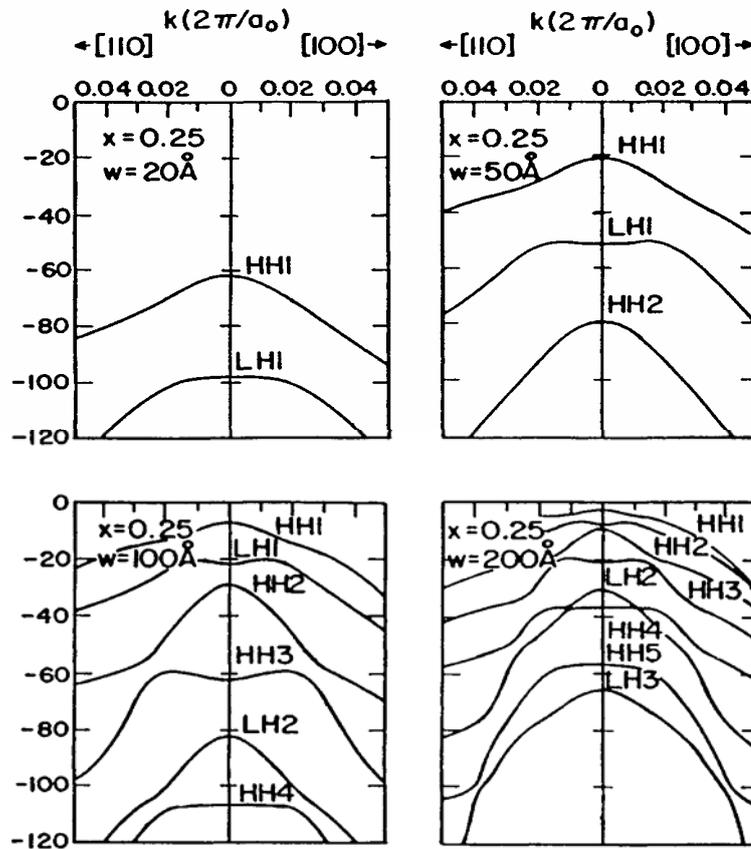
**Figure I.10:**(a) Image CL d'une hétérostructure GaAlAs/GaAs/AlAs ,(b) Alternance des couches déposées et profil des bandes d'une hétéro-jonction GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  et formation du gaz bidimensionnel d'électron (ou de trou) à l'interface entre GaAs et  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Les électrons (ou trous) sont maintenus contre  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  par le champ électrique venant du dopants chargés (+) de silicium dans  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .



**Figure I.11:** Schéma de bandes d'une hétérojonction de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$  [14]

Dans la **figure I.12** nous avons représenté la structure de bande de valence d'hétérostructure

GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>As à puits quantique obtenue par la méthode (k.p) pour plusieurs largeurs de puits quantique.



**Figure I.12:** la structure de la bande de valence de GaAs/Ga<sub>0.75</sub>Al<sub>0.25</sub>As à puits quantique pour différents largeurs de puits : w = 20, 50, 100,200 Å [15].

Le **tableau (I.2)** illustre les valeurs expérimentales de l'énergie de bande de valence et de conduction ( $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$ ) pour plusieurs hétérostructures.

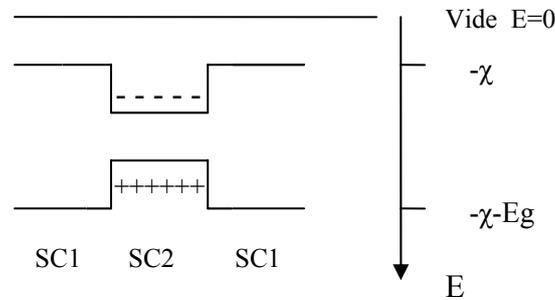
hétérostructure	$\Delta E_c$ (eV)	$\Delta E_v$ (eV)
GaAs/AlAs	0.98	0.63
GaAs/Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As (x<0.3)	0.75x	0.50x
InAs/GaAs	1.03	0.07
GaSb/AlSb/AlSb	1.26	0.3
HgTe/CdTe	1.56	0.35

**Tab.I.2.** Valeurs expérimentales de l'énergie de bande de valence et de conduction pour plusieurs hétérostructures [15].

### I.3.5 Les propriétés électroniques d'hétérostructures :

#### I.3.5.1 Niveaux d'énergie électronique dans un puits quantique :

Les hétérostructures de type I (**Figure I.13**) les plus étudiées concernent le couple GaAs/GaAlAs.



**Figure I.13:** configuration des bandes de conduction et de valence dans une hétérostructure [13].

Nous allons maintenant uniquement nous intéresser aux hétérostructures de type I. Le niveau d'énergie de la bande de conduction peut être calculées à partir du modèle de la fonction enveloppe. En partant d'un modèle de Kane, la fonction d'onde d'un électron peut s'écrire[13]:

$$\Psi(r) = \sum_{n=1}^N \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_{//}r_{//}u_c(r)} \chi_n(z) \quad (\text{I.17})$$

où S représente l'aire de l'échantillon,  $k_{//} = (k_x, k_y)$  est vecteur bidimensionnel correspondant au mouvement de l'électron dans le plan de l'hétérostructure,  $u_c(r)$  une fonction de Bloch de la bande de conduction et N le nombre de niveaux considérés.

Ainsi,  $\Psi(r)$  est la somme d'un produit de fonctions variant rapidement,  $u_c(r)$ , car elles ont la périodicité du réseau cristallin, et de fonctions à variation lente, les fonctions enveloppes  $\chi_n(z)$ .

Les niveaux d'énergie dans le puits sont déterminés en résolvant l'équation aux valeurs propres :

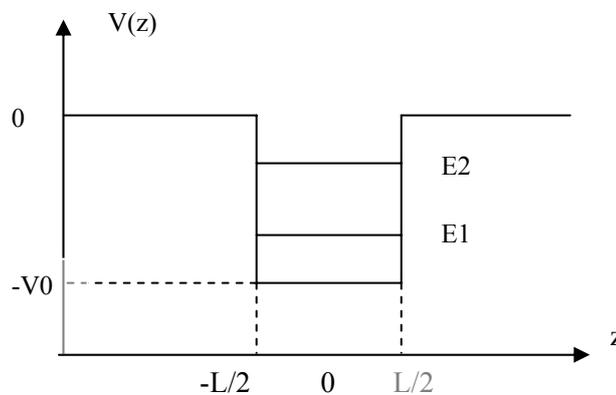
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \chi_n(z) = E_n \chi_n(z) \quad (\text{I.18})$$

où  $m^*(z)$  est la masse effective de l'électron, et  $V(z)$  l'énergie potentielle dans la structure à l'abscisse  $z$  (**figure I.14**).

$$\begin{aligned} V(z) &= 0 & \text{pour} & \quad z > L/2 \text{ ou } z < -L/2 \\ V(z) &= -V_0 & \text{pour} & \quad -L/2 < z < L/2 \end{aligned} \quad (\text{I.19})$$

Les conditions aux limites qui permettent de résoudre complètement l'équation différentielle sont les suivantes :

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} |\chi(z)| = 0, \quad \chi(z) \quad \text{et} \quad \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \chi_n(z)}{\partial z} \quad \text{sont continus aux interfaces}$$



**Figure I.14:** modèle de la boîte quantique pour un électron piégé dans un puits de potentiel idéal à un dimension [13].

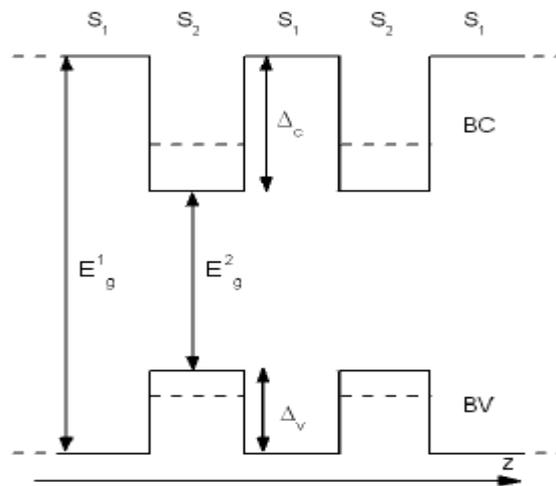
Le mouvement des électrons étant quasi libre dans le plan de l'hétérostructure, l'énergie totale d'un électron s'écrit [13] :

$$E = E_c + E_n + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} \quad (\text{I.20})$$

### I.3.6 Les structures à Multipuits quantiques :

Les structures à multipuits quantiques sont composées de plusieurs hétéro-interfaces entre deux semi-conducteurs  $S_1$  et  $S_2$  (par exemple  $S_1 = \text{InAs}$ ,  $S_2 = \text{AlSb}$ ) (voir la **figure I.15**). Ces deux semi-conducteurs sont en général en très bon accord de maille de sorte que la contrainte générée lors de la croissance est très faible. Plusieurs configurations sont possibles suivant la localisation de ces deux puits dans l'espace réel [16]. En raison du fait que les matériaux  $S_1$  et  $S_2$  sont des alliages ioniques, composés d'un anion et un cation ( $S_1 = A_1C_1$ ,  $S_2 = A_2C_2$ ), les interfaces entre  $S_1$  et  $S_2$  sont donc du type  $A_1-C_2$  ou bien du type  $A_2-C_1$ . Différentes liaisons dipolaires sont ainsi formées, ce qui peut rendre le puits asymétrique. C'est à dire que ces

liaisons dipolaires donnent lieu à différentes contributions à l'offset de bande. La différence de composition de deux matériaux nous permet de classer les multipuits en deux types. Pour le premier, appelé multipuits avec atome commun, les deux matériaux massifs partagent la même anion :  $C_1 \neq C_2$  et  $A_1 = A_2$ . Les multipuits GaAs/AlAs appartiennent bien à ce type. Par contre, dans le cas du deuxième, appelé multipuits sans atome commun, on a  $A_1 \neq A_2$  et  $C_1 \neq C_2$ . Un bon exemple de ce deuxième type est le super-réseau InAs/AlSb. Une étude bien approfondie de ces interfaces est présentée dans les travaux d'Ivchenko [18,19], ainsi que dans les thèses d'Olivier Krebs [17] et Sébastien Cortez [17].



**Figure I.15:** Profil de bande pour un multipuits quantique (ou super-réseau). Les niveaux d'énergies des états d'électron et de trous sont indiqués par les traits pointillés. Les notations  $\Delta_c$  et  $\Delta_v$  représentent l'offset de conduction et l'offset de valence.

### I.3.7 Propriété électronique des nanostructures et des nanocristaux :

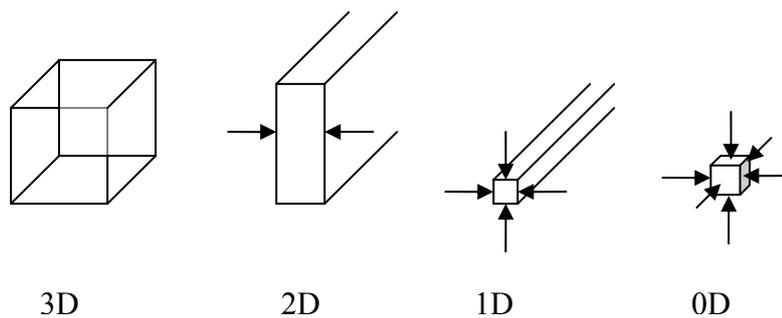
Les propriétés optiques des semi-conducteurs sont liées à la structure des états électroniques, elles dépendent du spectre d'énergie des paires électron-trou confinées. Il est donc essentiel de comprendre le phénomène de la variation des propriétés électroniques en fonction de la taille des nanocristaux pour pouvoir envisager la fabrication de systèmes nouveaux aux propriétés optiques intéressantes[66].

#### I.3.7.1 Confinement quantique :

Les propriétés électroniques particulières que présentent les nanocristaux des semiconducteurs sont dues à leur taille qui induit un effet de confinement des excitations. La **figure I.16** représente les différents systèmes quantiques et leurs directions de confinement respectives.

Dans les structures à deux dimensions (films minces, puits quantiques, super-réseaux), les électrons sont libres de se déplacer dans deux directions. Le confinement est unidimensionnel dans les fils quantiques ; les électrons sont libres de se déplacer dans une direction. Dans les structures quasi-zéro dimensionnelles (cristallites, boîtes quantique), les électrons sont confinés dans les trois dimensions de l'espace, cela se traduit par l'apparition de transitions électroniques d'énergie discrète au lieu de structure de bande habituelle et un déplacement du seuil d'absorption vers les hautes énergies, traduisant ainsi un élargissement du gap, de plus en plus important au fur et à mesure que la taille des cristallites diminue[66].

### I.3.7.2 Effet de la réduction des dimensions des cristallites sur la structure électronique :



**Figure I.16** : Les différentes directions de confinement pour les systèmes 3D, 2D, 1D, 0D [66].

Le cristal infini à un spectre d'énergie cinétique continue. Ceci vient du fait que les porteurs sont libres de se mouvoir, et le vecteur d'onde  $\vec{k}$  de l'électron peut prendre toutes les valeurs possibles dans la première zone de Brillouin. L'énergie cinétique de l'électron est donnée par :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Au fur et à mesure que la taille diminue, les électrons deviennent confinés et leur mouvement se produit dans un espace réduit. Le vecteur d'onde ne peut prendre que des valeurs discrètes :

$$k = (N \pi/2), N = 1, 2, 3 \dots$$

Et dans ce cas le spectre d'énergie cinétique est discret. Pour un nanocristal de diamètre  $2R$ , le moment  $\vec{k}$  de l'électron et inversement proportionnel à  $2R$ , et l'énergie cinétique et proportionnelle à  $1/(2R)^2$ .

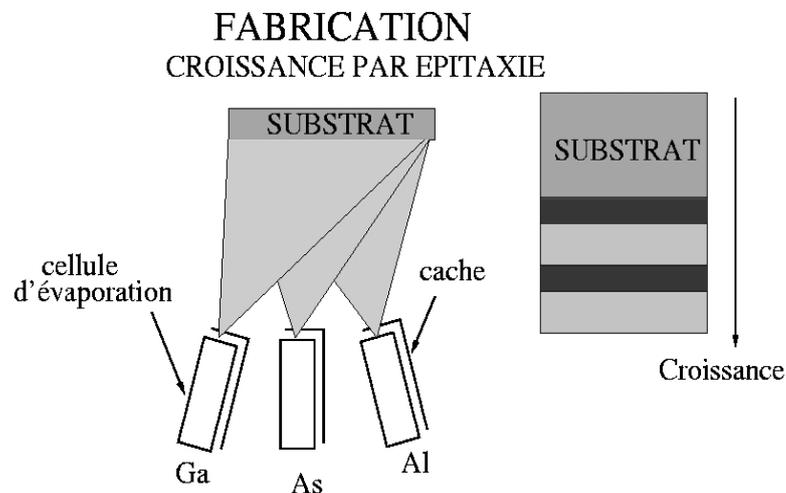
La taille fine des cristallites conduit donc, à une augmentation de l'énergie cinétique des quasi-particules confinées. L'énergie fondamentale se déplace vers les hautes énergies lorsque le diamètre des nanocristaux diminue [66].

## I.4 Techniques de croissance :

### I.4.1 L'épitaxie par jets moléculaires d'hétérostructures *AlGaAs/GaAs* :

#### I.4.1.1 Introduction :

La technique d'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ou MBE en anglais (Molecular Beam Epitaxy) a été développée initialement à la fin des années 1960. Elle consiste à évaporer des éléments métalliques, isolants ou semi-conducteurs pour ensuite les condenser sur un substrat qui peut être chauffé. Pour garantir la pureté des matériaux déposés, des conditions d'ultravide sont nécessaires. Cet ultravide est généré et entretenu par un système de pompage adapté (pompes turbo-moléculaires et ioniques) et par des panneaux cryogéniques refroidis à l'azote liquide [21].



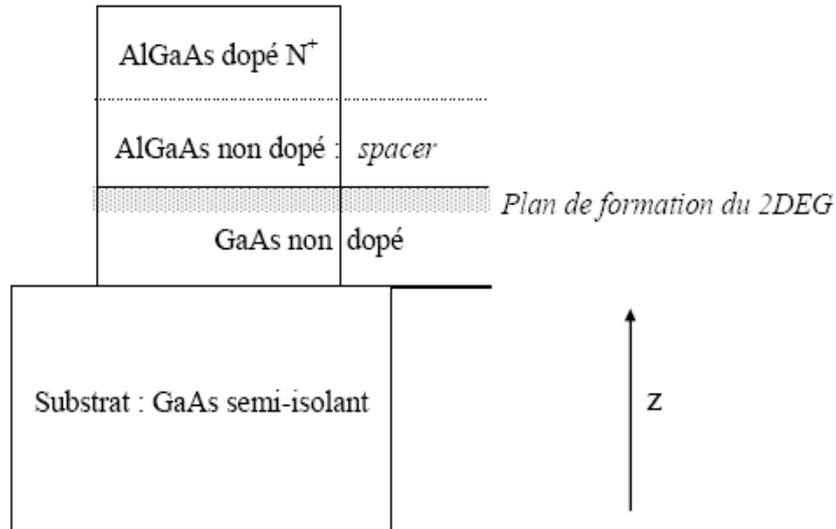
**Figure I.17:** Schéma de principe d'une croissance en EJM [22].

Suivant les conditions de croissance utilisées, on observe généralement trois modes de croissance [23]:

- le mode bidimensionnel, ou Frank-Van Der Merwe, pour lequel la croissance a lieu de façon idéale, monocouche après monocouche;
- le mode Volmer-Weber, qui correspond à une croissance tridimensionnelle (croissance par îlots) dès le début de la croissance, et est attribué à une différence substantielle des énergies de liaison chimique A-A et A-B entre le matériau déposé A et le substrat B;
- le mode Stransky-Krastanov, où la croissance passe d'un mode bidimensionnel à un mode tridimensionnel. Ce mode apparaît en général sur les matériaux qui présentent un important désaccord de paramètre de maille ( $> 2\%$ ) et semble être provoqué par les contraintes.

#### I.4.1.2 Processus de croissance des hétérostructure AlGaAs/GaAs :

Le fonctionnement de cette technique sera décrit dans ce qui suit pour réaliser d'étérostructures tures d'AlGaAs/GaAs.



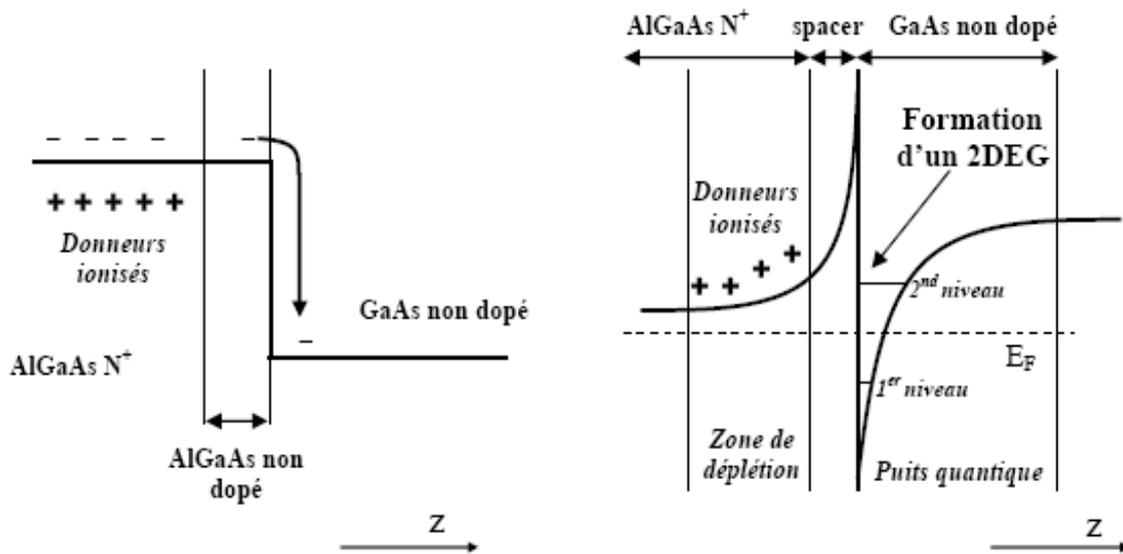
**Figure I.18:** Schéma d'une hétérojonction  $AlGaAs/GaAs$ .  $Z$  est l'axe de croissance.

Sur un substrat semi-isolant, on fait croître par épitaxie à jet moléculaire la structure représentée sur la **figure I.18**. Elle comporte une couche de  $GaAs$  non dopé, une fine couche de  $Al_xGa_{1-x}As$  non dopé puis une couche de  $Al_xGa_{1-x}As$  dopé  $N^+$ .  $GaAs$  et  $Al_xGa_{1-x}As$  ont des paramètres cristallins très proches, l'interface entre les couches présente donc peu de défauts. Par contre, la largeur de la bande interdite de  $Al_xGa_{1-x}As$  est supérieure à celle de  $GaAs$  et augmente avec la concentration  $x$  en aluminium. A l'interface de l'hétérojonction, les niveaux de Fermi s'alignent. La différence d'énergie de gap entre les deux semiconducteurs induit une courbure de bande. Coté  $GaAs$ , il se forme à l'interface un puits de potentiel triangulaire dans lequel sont transférés les électrons libres de  $AlGaAs$  qui s'accumulent (**figure I.18**). Selon la direction de croissance de l'hétérojonction, ceux-ci sont confinés sur une longueur inférieure à leur longueur d'onde de Fermi. On peut de plus montrer que, à basse température, seule la sous bande la plus basse en énergie est peuplée : il y a donc formation d'un gaz d'électrons purement bidimensionnel à l'interface  $AlGaAs/GaAs$ . Cette hypothèse est généralement vérifiée dans le cas d'hétérojonctions  $AlGaAs/GaAs$  de concentration électronique relativement faible [24].

En pratique, dans un semiconducteur intrinsèque tous les électrons apportés par les atomes

sont utilisés pour réaliser des liaisons chimiques entre eux. Seuls quelques électrons supplémentaires sont fournis par les atomes d'impureté présents dans le semiconducteur. Il en résulte que le nombre d'électrons venant peupler le puits est petit. Pour contrôler la densité électronique et remplir le puits de potentiel, la solution est d'introduire intentionnellement dans le semiconducteur des atomes d'impureté possédant des électrons supplémentaires : c'est le dopage (comme par exemple des atomes de Si pour le GaAs). Une fois séparés de leurs électrons supplémentaires les atomes de dopants possèdent une charge positive, on les appelle donneurs ionisés. Malheureusement si elle augmente le nombre d'électrons disponibles, l'introduction de ces impuretés apporte des défauts dans le cristal et dégrade les propriétés électriques de celui-ci. Il faut donc trouver un compromis entre l'apport d'électrons et la qualité des échantillons. Un grand progrès fût réalisé lorsque les dopants furent séparés spatialement du puits de potentiel par la couche d'AlGaAs non dopé (spacer) insérée entre GaAs et AlGaAs dopé. Cela permet de réduire la diffusion sur le potentiel des impuretés ionisées et donc d'accroître la mobilité du 2DEG, on réalise ainsi des 2DEG(gaz d'électrons bidimensionnels) de très haute mobilité ( $\mu > 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) et de densité surfacique de l'ordre de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . On parle de structure à modulation de dopage [25]. Dans ce cas les électrons piégés ne subissent plus l'influence néfaste des atomes donneurs ionisés.

La **figure 1.19** présente le schéma d'une hétérojonction *AlGaAs/GaAs*. Lorsque ces deux semiconducteurs sont mis en regard, les électrons contenus dans *AlGaAs* ont une énergie potentielle plus forte que dans *GaAs*. Ils migrent naturellement dans le GaAs. Cependant, suite à ce déplacement de charge *AlGaAs* n'est plus neutre électriquement et les donneurs ionisés tendent à rappeler les électrons par l'intermédiaire des forces électrostatiques (attraction coulombienne). Néanmoins l'énergie électrostatique n'est pas suffisante pour permettre aux électrons de passer la barrière de potentiel à l'interface *AlGaAs/GaAs*, ceux-ci s'accumulent donc à cet endroit. La présence de cette accumulation de charge courbe les bandes énergétiques dans les deux semiconducteurs et donne lieu, à l'équilibre, à la création d'un puits de potentiel triangulaire. Pour augmenter le nombre d'électrons on peut doper l'*AlGaAs*. Comme le gaz d'électrons se forme dans *GaAs*, les dopants et les électrons ne se situent pas dans une même région de l'espace. Cela améliore grandement les qualités du gaz 2D [25], c'est l'intérêt des hétérojonctions.



**Figure I.19:** Formation d'un 2DEG à l'interface de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs  
Formation d'un puits triangulaire [26]

#### I.4.2 Autres techniques de croissance :

D'autres techniques de croissance peuvent être utilisées pour l'élaboration des semi-conducteurs en couches minces [20]:

- l'épitaxie en phase liquide (EPL) : L'EPL est une technique de croissance simple permettant la croissance de composés ou d'alliages semi-conducteurs d'excellente qualité. L'utilisation de la phase liquide conduit à des vitesses de dépôt voisines de  $10^{-4}$  cm/mn. Cette valeur est avantageuse pour l'obtention de couches de plusieurs micromètres dans une période de temps raisonnable. De plus l'appareillage d'EPL est plus simple que celui utilisé en épitaxie en phase vapeur.

Cette technique est certainement la plus répandue et l'une des plus anciennes. Les couches croissent par précipitation à partir d'une phase liquide. Elle se prête mal à la croissance de couches minces et la dimension des surfaces épitaxiées est limitée, mais elle est relativement peu coûteuse, permet des vitesses de croissance élevées (jusqu'à 1  $\mu\text{m}/\text{min}$  contre 1  $\mu\text{m}/\text{h}$  pour l'EJM) et est effectuée dans des conditions proches de l'équilibre thermodynamique.

- la déposition chimique d'organométalliques en phase gazeuse (MOCVD pour "Metal Organic Chemical Vapor Deposition") utilise la décomposition thermique d'organométalliques et d'hydrures sur un substrat dans une chambre à pression quasi atmosphérique (quelques mTorr). Un organométallique est un hydrocarbure saturé, où un atome d'hydrogène est substitué par un atome métallique (de la colonne II ou III). Les

éléments du groupe V ou VI sont amenés sous forme d'hydrures (toxiques et beaucoup plus stables thermiquement que les organométalliques). Les avantages de la MOCVD résident dans la possibilité d'élaborer des couches contenant du phosphore (InP et dérivés) d'excellente qualité, ce qui est beaucoup plus délicat à l'heure actuelle en EJM; et dans une vitesse de croissance supérieure à l'EJM (1-4  $\mu\text{m}/\text{h}$ ). C'est la méthode la plus utilisée pour les fabrications de couches industrielles.

## **Chapitre II**

# **Interaction é-matière et méthodes de caractérisation des nanostructures**

## II.1 L'interaction électron matière :

### II.1.1 Introduction :

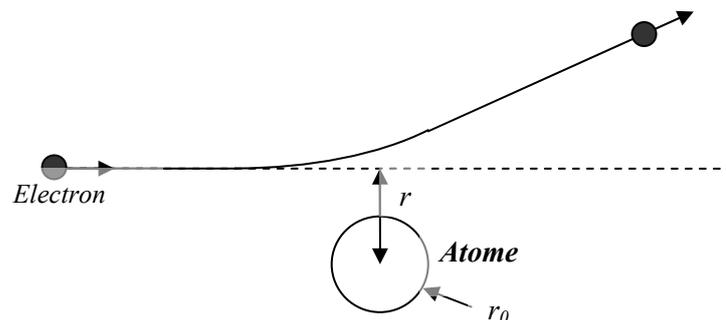
Ce chapitre est consacré à la description des mécanismes d'interaction mis en jeu lors du bombardement d'un échantillon par un faisceau d'électrons. Les différents types de collisions et leurs conséquences sur les pertes d'énergie des particules incidentes seront exposés dans la première partie de ce chapitre [27].

### II.1.2 Rappels sur les interactions électrons-matière :

Lorsque des électrons pénètrent un matériau, ils subissent un certain nombre de collisions avec les atomes de la cible qui dépendent des caractéristiques relatives du faisceau d'électrons et de la nature du matériau irradié. Ces interactions peuvent être divisées en deux catégories :

- les collisions élastiques qui affectent la trajectoire des électrons sans modifier leur énergie,
- les collisions inélastiques qui se traduisent par un transfert d'énergie entre les électrons incidents et les atomes constituant la matière.

L'importance de ces deux catégories d'interactions dépend essentiellement de la distance d'interaction  $r$  entre l'électron primaire et le centre de l'atome visé de rayon  $r_0$  **figure II.1** [27].



**Figure II.1:** Distance d'interaction entre un électron incident et un atome [27]

#### II.1.2.1 Interactions élastiques :

##### II.1.2.1.1 Théorie élémentaire :

Lorsque la distance d'interaction  $r$  est grande par rapport au rayon  $r_0$  de l'atome, l'interaction a lieu entre l'électron incident et l'atome dans son ensemble (noyau et électrons). De façon élémentaire, cette interaction (dite élastique) est comparable à un choc élastique en mécanique ; il suffit pour cela de considérer que **figureII.2** [27]:

- l'électron primaire présente initialement une énergie  $E_0$ , une masse  $m_0$  au repos, une vitesse  $v_0$ , un vecteur d'onde  $k_0$  et qu'après le choc, sa vitesse est  $v$  et son vecteur d'onde  $k$ .
- l'atome possède une masse  $M$  au repos et une vitesse  $V$  après choc.

D'après la théorie élémentaire du transfert d'énergie par choc élastique, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique sont conservées. Puisque la masse de l'électron est très petite par rapport à celle de l'atome, le transfert d'énergie  $\Delta E/E_0$  est très faible. En première approximation,  $v = v_0$  et la longueur d'onde associée est conservée,  $\lambda = \lambda_0$ .

L'électron est dévié d'un angle  $2\theta$ . La variation de mouvement subie par l'électron correspond à un vecteur parallèle au vecteur de diffusion défini par  $\vec{R} = \vec{k} - \vec{k}_0$  (avec  $|\vec{k}| = 1/\lambda$ ) et de module  $2.m_0.v.\sin\theta = MV$ . L'énergie  $\Delta E$  transférée à l'atome est obtenue en exprimant la conservation de l'énergie cinétique.

L'énergie transférée maximale est obtenue pour  $\theta = \pi/2$ , c'est à dire pour  $\sin\theta = 1$  :

$$\Delta E = \frac{1}{2}MV^2 = \frac{2m_0^2v^2 \sin^2 \theta}{2} \Rightarrow \Delta E(\max) = \frac{2m_0^2v^2}{M} \quad (\text{II.1})$$

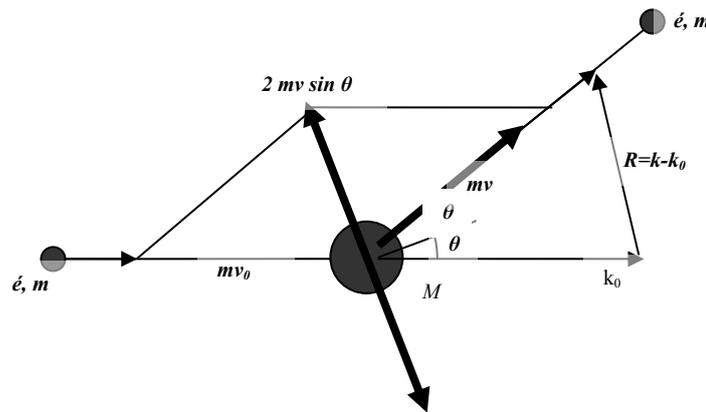
$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{4m_0}{M} \sin^2 \theta \Rightarrow \frac{\Delta E}{E_0} = \frac{4m_0}{M}$$

Puisque  $\frac{m_0}{M} \cong \frac{1}{1836A}$ , où  $A$  est la masse atomique de l'atome considéré, la relation précédente

donnant la variation relative d'énergie devient, en première approximation :

$$\frac{\Delta E(\max)}{E_0} = \frac{2,17 \cdot 10^{-3}}{A} \sin^2 \theta \quad (\text{II.2})$$

Ce raisonnement élémentaire ne peut s'appliquer qu'aux électrons d'énergie  $E_0 < 100$  keV, ce qui correspond très largement à la gamme d'énergie utilisée en microscopie électronique à balayage [28].



**Figure II.2:** Théorie élémentaire du choc élastique [28]

#### II.1.2.1.2 Conséquences des interactions élastiques :

Le transfert d'énergie entre l'électron primaire et l'atome produit les effets suivants, par ordre d'énergie croissante :

**a) Effet thermique :**

Si l'énergie transférée est de l'ordre de  $10^{-2}$  à  $10^{-1}$  eV, les atomes sont soumis à des oscillations autour de leur position d'équilibre. Ces oscillations peuvent se faire individuellement (effet Debye) ou collectivement, pour des états d'énergie quantifiés appelés phonons. La vibration des atomes se traduit par un dégagement de chaleur. Cet effet est utilisé industriellement dans les fours à bombardement électronique. Ceci représente un phénomène parasite pour les appareils à faisceau intense d'électrons comme les microscopes électroniques et les tubes à rayons X [28].

**a) Effet chimique :**

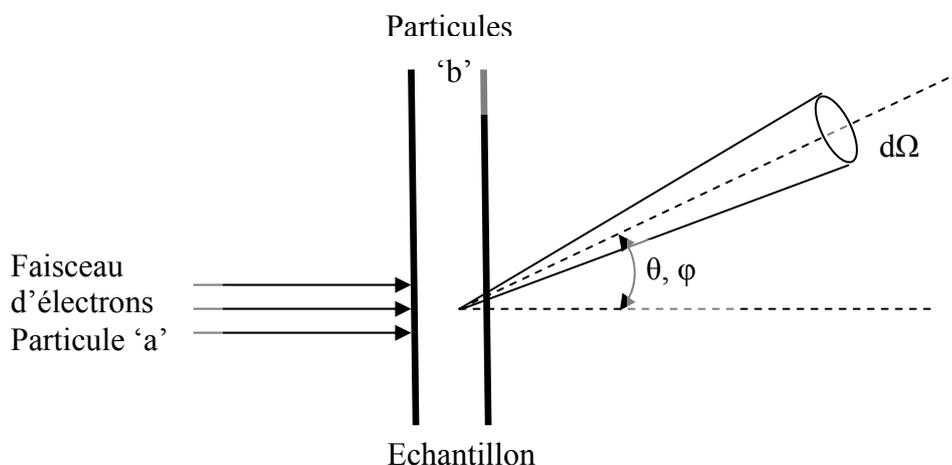
Lorsque l'énergie transférée est comprise entre 3 et 5 eV, il peut se produire une rupture des liaisons chimiques, en particulier des liaisons faibles, comme les liaisons organiques [28].

**b) Effet du déplacement atomique**

Quand le transfert d'énergie est supérieur au seuil de déplacement  $E_d$  de l'atome, ce dernier peut sortir du puits de potentiel qui entoure sa position d'équilibre dans le solide ; généralement, l'énergie nécessaire est de l'ordre de 15 à 30 eV. Des dommages d'irradiation permanents peuvent ainsi être créés [28].

**II.1.2.1.3 Caractéristiques de la diffusion élastique :**

Comme nous l'avons déjà signalé, la direction de l'électron incident peut être déviée lors d'une collision. Ce phénomène est appelé diffusion de l'électron. Considérons un faisceau incident de particules 'a' dirigé vers un échantillon constitué de particules 'b' comme



**Figure II.3:** Définition de la section efficace de diffusion

l'indique la **figure II.3** et plaçons un détecteur afin de déterminer le nombre de particules émises dans la direction  $(\theta, \varphi)$  par rapport au faisceau incident [29].

Le détecteur définit un angle solide  $d\Omega$  à partir du centre de la cible. Si  $F_{ai}$  désigne le flux de particules incidentes par unité de temps, et que l'échantillon est composé de  $N_b$  particules par unité de surface, le flux de particules diffusées  $F_{ar}$  dans l'espace a pour expression :

$$F_{ar} = F_{ai} \cdot N_b \cdot \sigma \quad (\text{II.3})$$

dans laquelle  $\sigma$  représente la section efficace de réaction, d'après Rutherford, son expression est de la forme :

$$\sigma(\theta) = \left[ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right]^2 \cdot \frac{1}{4E^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (\text{II.4})$$

avec :

- $e(C)$ , la charge de l'électron,
- $E(J)$ , l'énergie de l'électron incident,
- $Z$ , le numéro atomique,
- $\epsilon_0$ , la permittivité du vide,
- $\theta(\text{rad})$ , l'angle de diffusion.

### II.1.2.2 Interactions inélastiques :

#### II.1.2.2.1 Théorie élémentaire :

Lorsque la distance d'interaction est du même ordre de grandeur que le rayon de l'atome concerné, l'action du nuage électronique de ce dernier l'emporte. On parle alors d'interaction électron-électron [30,39]. Les masses des particules étant identiques, le transfert relatif d'énergie est loin d'être négligeable et a pour effet de modifier la structure et l'énergie interne de l'atome.

Considérons un électron incident d'énergie  $E_0$  et de vecteur d'onde  $k_0$  (figure 2.4). Après interaction inélastique, son énergie et la longueur de son vecteur d'onde deviennent respectivement  $E = E_0 - \Delta E$

et  $k = k_0 - \Delta k$ , avec  $k = (2mE/h^2)^{1/2}$ .

Pour de faibles variations relatives ( $\Delta k \ll k_0$  et  $\Delta E \ll E_0$ ), il résulte, en première approximation :

$$\frac{\Delta K}{K_0} \cong \frac{\Delta E}{2E_0} \quad (\text{II.5})$$

Le vecteur de diffusion  $\vec{R} = \vec{k} - \vec{k}_0$  ne peut s'annuler. La **figure II.4** montre que, pour des petits angles de diffusion, il est possible d'écrire l'approximation suivante :

$$R^2 \cong (\Delta k)^2 + (2\theta k_0)^2$$

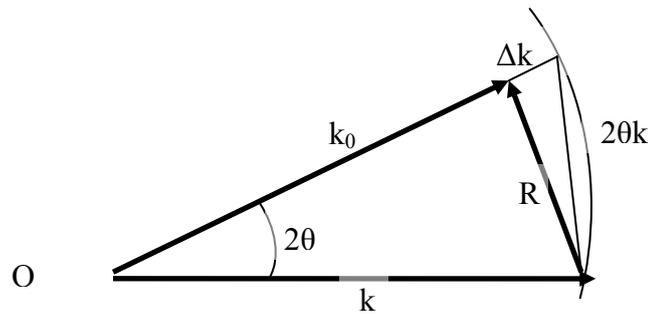
La valeur minimale du vecteur de diffusion atteinte quand l'angle de diffusion est nul est égale à  $\Delta k$ . Posons  $R_{\min} = \Delta k = k_0 \theta_E$  où  $\theta_E$  représente l'angle lié à la perte d'énergie considérée  $\Delta E$ . D'après l'équation (2.9), cet angle peut s'écrire :

$$\theta_E = \frac{\Delta k}{k_0} = \frac{\Delta E}{2E_0} \quad \text{(II.6)}$$

La longueur du vecteur de diffusion R devient alors :

$$R_2 = K_0^2 [(2\theta)^2 + \theta_E^2] \quad \text{(II.7)}$$

Pour une perte d'énergie donnée  $\Delta E$ , la section efficace différentielle a une demie largeur angulaire qui est de l'ordre de  $\theta_E$ .



**Figure II.4:** Diffusion inélastique. Valeurs approximatives aux petits angles [28]

### II.1.2.2 Conséquences des interactions inélastiques :

Les interactions électrons-matière de type inélastique engendrent des modifications de la structure électronique interne des atomes de la cible bombardée [28].

#### a) Excitation des niveaux de conduction ou de valence :

L'excitation des niveaux de conduction est collective et quantifiée sous forme de plasmons ; elle se manifeste par des pertes d'énergie discrètes ( $\Delta E < 50$  eV) caractéristiques des éléments concernés, qui peuvent être utilisées à des fins analytiques [28].

#### b) Excitation des niveaux atomiques profonds :

Les pertes d'énergie caractéristiques subies par les électrons ayant produits des excitations des niveaux atomiques profonds ( $\Delta E > 50$  eV) sont exploitées en spectroscopie de perte d'énergie. L'énergie transférée à l'atome se retrouve sous deux formes :

- énergie potentielle de l'atome excité. Le retour à l'état fondamental induit l'émission de rayonnements caractéristiques utilisés pour des analyses élémentaires ainsi que pour la production des rayons X [28].
- énergie cinétique des électrons éjectés, appelés électrons secondaires.

### II.1.2.3 Caractéristiques de la diffusion inélastique :

L'importance de l'interaction inélastique, dans le cas des électrons, a conduit à de nombreuses études telles que, par exemple, Bethe en 1930, Lenz en 1945 ainsi que Colleix et Jouffrey en 1972. Pour modéliser le processus de diffusion inélastique, P. Trebbia a proposé deux approches [30] :

- soit l'échantillon est considéré comme étant un solide constitué d'un ensemble d'atomes sans interaction (hypothèse valable pour les orbitales atomiques profondes et donc pour des pertes d'énergie supérieures à 100 eV),
- soit la cible est représentée par un gaz d'électrons en interaction, libres de se déplacer au milieu d'un gel de charges positives. Ce modèle dit de " jellium " est une approche correcte pour l'étude des électrons de conduction (pertes d'énergie inférieure à 50 eV).

Selon le formalisme de Bethe et corrigé par Inokuti concernant la diffusion élastique par un atome isolé, la section efficace différentielle partielle peut s'écrire [31] :

$$\frac{d^2\sigma}{d(\Delta E)d\Omega} = \frac{2e^4}{mv^2\Delta E} \cdot \frac{1}{\theta^2 + \theta_E^2} \cdot \frac{df(\theta, \Delta E)}{d(\Delta E)} \quad \text{(II-8)}$$

où :  $\theta_E$  est l'angle de diffusion critique :

$$\theta_E = \frac{\Delta E}{2E} \quad \text{(II.9)}$$

- $\frac{df(\theta, \Delta E)}{d(\Delta E)}$  est la force d'oscillation généralisée pour une transition correspondant à une perte d'énergie  $\Delta E$  entre un état initial d'énergie  $E_0$  et un état final du continuum défini par son énergie  $E$  et par un ensemble de paramètres quantiques comme le moment angulaire. Dans le cas du modèle basé sur le gaz d'électrons, Pines et Nozières ont montré qu'il était possible d'exprimer la section efficace en fonction de la constante diélectrique complexe du matériau  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega)$  [32, 33] permettant ainsi décrire correctement la réponse du gaz d'électrons à la perturbation extérieure créée par l'électron incident :

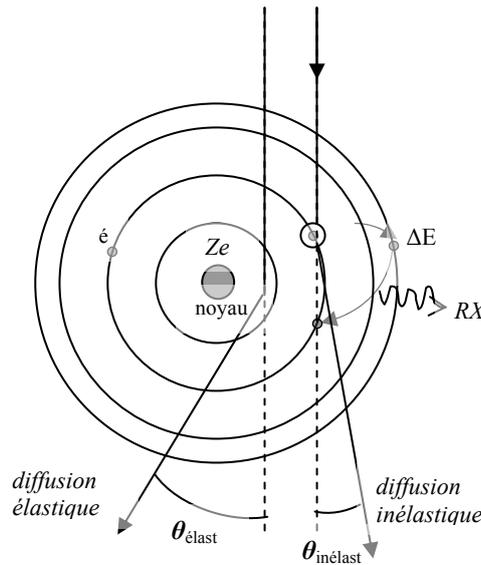
$$\frac{d^2\sigma}{d(\Delta E)d\Omega} = \frac{1}{2\pi E a_0} \cdot \frac{1}{\theta^2 + \theta_E^2} \cdot \text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon(\theta, \omega)}\right) \quad (\text{II.10})$$

où  $a_0$  est le rayon de Bohr.

Le terme  $\text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right)$ , nommé " fonction de perte d'énergie ", contient toute l'information concernant la réponse du gaz d'électrons à la perturbation. Il a pour expression :

$$\text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \quad (\text{II.11})$$

Les zéros de  $\varepsilon$  correspondent à l'excitation collective des électrons de valence et les maxima de  $\varepsilon_2$  à l'excitation de transitions entre les bandes. La diffusion élastique des électrons est essentiellement concentrée autour de la direction incidente comme l'indique la **figure(II.5)**, alors que la diffusion inélastique est beaucoup plus étalée [34].



**Figure II.5:** Les différents types de diffusion selon la distance entre l'électron incident et les

**II.1.2.4 Particules et rayonnements émis :**

L'irradiation des échantillons, par un faisceau d'électrons, induit un certain nombre d'effets au sein du matériau comme la création de photons (X, UV, visibles ou IR) et l'émission d'électrons secondaires et rétrodiffusés [35, 36]. Ces particules et ces rayonnements résultent des interactions élastiques et inélastiques et sont observables au microscope électronique à balayage équipé de détecteurs. L'émission des particules est

primordiale pour notre étude car elle permet l'observation de la surface de l'échantillon et d'expliquer en partie les modifications topographiques issues de l'irradiation électronique.

**a) Les électrons rétrodiffusés :**

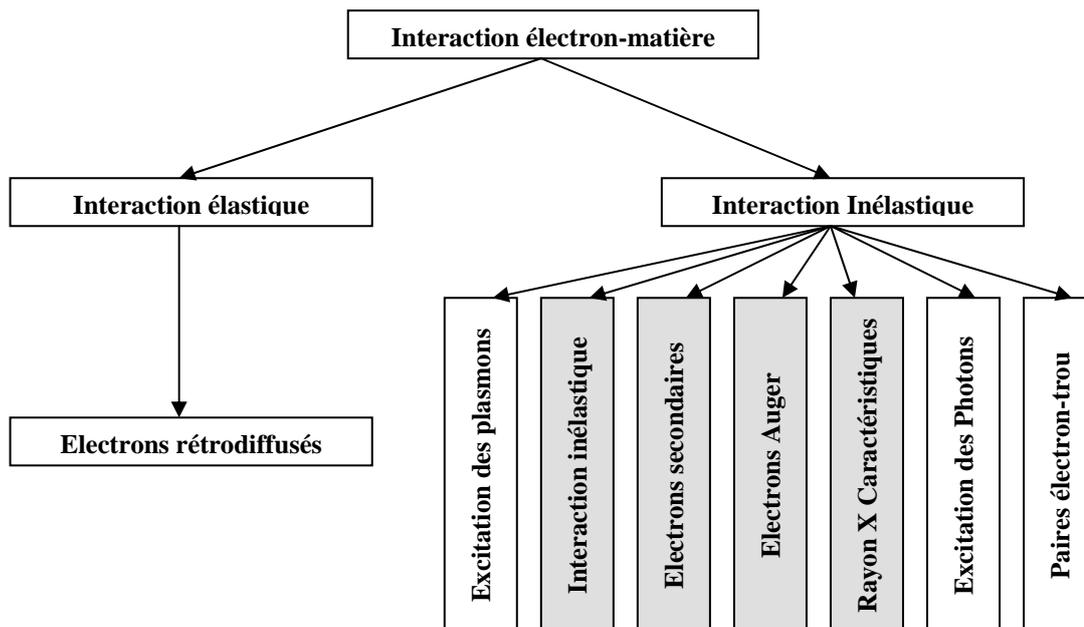
Sont des électrons du faisceau primaire qui ont réagi de façon quasi élastique avec les atomes de l'échantillon. Ils sont renvoyés dans une direction proche de leur direction d'origine avec une faible perte d'énergie. Ils sont attirés par un détecteur généralement placé à la verticale de l'échantillon dans l'axe du faisceau de sorte que le maximum de particules soit récolté. Compte tenu de cette position, le détecteur ne permettra pas d'observer correctement le relief de la cible. Cependant si l'échantillon est composé d'éléments chimiques possédant un numéro atomique élevé (charge positive du noyau plus grand), le nombre d'électrons rétrodiffusés sera plus grand. C'est pourquoi les régions avec numéro atomique élevé paraîtront à l'écran du microscope plus claires que celles ayant un numéro atomique faible. On appelle cela le contraste de phase. Cette particularité est fortement appréciée pour juger de l'homogénéité chimique d'un échantillon avant, par exemple, de l'analyser.

**b) Les électrons secondaires :**

Sont émis lorsque le faisceau primaire, qui a perdu une partie de son énergie excite les atomes de l'échantillon. Les électrons secondaires possèdent une énergie faible (autour de 50 eV) suivant un large spectre, ce qui est une véritable qualité car ainsi, ils sont facilement déviés par l'application d'une ddp en direction du détecteur et permettent d'obtenir une image avec un bon rapport signal/bruit. De plus, ils ne peuvent parcourir qu'un faible trajet dans l'échantillon car ils sont très vite arrêtés et donc proviennent d'une zone proche du faisceau ce qui donne des images avec une très bonne résolution.

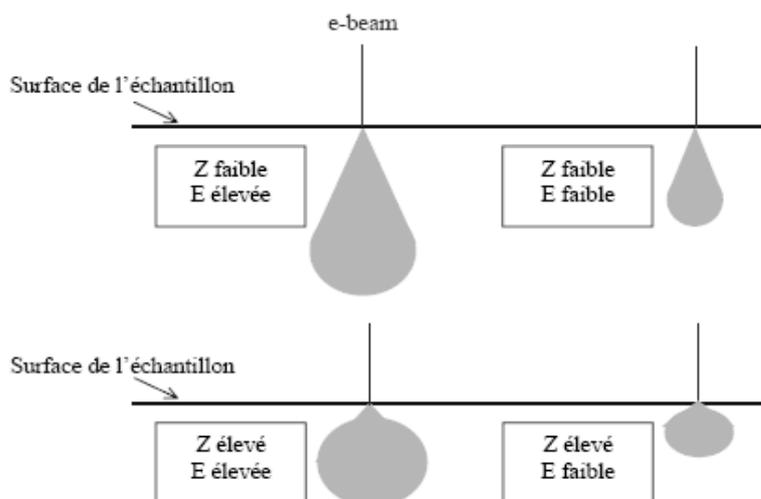
Le microscope électronique à balayage est également équipé d'un détecteur de rayons X qui permet de récolter les photons produits par le faisceau d'électrons primaires et de donner des informations sur la composition de la cible. Au cours de nos travaux, nous ne ferons pas de microanalyse par les rayons X car la silice est un matériau amorphe et donc difficilement caractérisable par cette méthode.

En plus des effets cités auparavant, le faisceau d'électrons engendre une augmentation locale de la température et conduit parfois, selon la nature de la cible et les conditions d'irradiation, à un endommagement du matériau (modification de la structure du matériau) [37]. Nous n'avons pas trouvé dans la littérature d'articles traitant directement du comportement thermique de la silice.



**Figure II.6:** Organigramme des différentes interactions possibles et des signaux émis lors de la pénétration d'un électron primaire dans la matière [40].

La pénétration des électrons primaires dans la matière s'accompagne d'un élargissement du faisceau en même temps qu'une perte progressive d'énergie. Le volume affecté est appelé familièrement "poire d'interaction". Les dimensions de cette poire **figure II.7** dépendent de l'angle d'incidence, de l'intensité du courant reçu par l'échantillon, de l'énergie du faisceau ainsi que du nombre atomique moyen de la cible [38]. Sous incidence oblique, la forme de la poire tend à s'allonger dans la direction du faisceau primaire.



**Figure II.7:** Evolution des dimensions de la poire d'interaction en fonction de l'énergie des électrons incidents et du numéro atomique du matériau irradié [38]

**II.1.2.5 Recombinaison :****II.1.2.5.1 Introduction :**

La recombinaison d'un électron avec un trou est un processus par lequel les deux particules s'auto-annihilent. Après une thermalisation rapide vers le bas de la bande de conduction, l'électron retourne par un saut direct ou par plusieurs sauts vers la bande de valence où il occupe un état vide associé au trou. La différence en énergie entre l'état initial et final de l'électron peut être restituée sous différentes formes.

Soit sous forme de photon, dans ce cas la recombinaison est dite radiative, soit transmise au réseau sous forme de phonons, on parle dans ce cas de recombinaison non radiative. Aussi, cette énergie peut être transmise à un autre électron sous forme d'énergie cinétique. Ce processus est connu sous le nom de recombinaison Auger. La **figure II.8** illustre les différents mécanismes de recombinaison dans un semi-conducteur.

**II.1.2.5.2 La recombinaison bande à bande :**

Dans ce processus de recombinaison, l'électron passe directement de la bande de conduction vers la bande de valence où il se recombine avec un trou. Dans les semiconducteurs à gap direct, ce processus est de loin le mécanisme de recombinaison dominant [41]. Cette recombinaison est une transition radiative et les photons qui y sont émis ont une énergie minimum qui correspond à celle du gap.

**II.1.2.5.3 La recombinaison bande – impureté :**

Dans ce cas, le retour de l'électron de la bande de conduction vers la bande de valence n'est pas direct. Il transite par des états intermédiaires situés dans la bande interdite. Ces états sont créés par la présence d'atomes étrangers (impuretés) ou par des défauts de structure. La présence de ces états dans la bande interdite rend plusieurs cas de transition possibles. Généralement, on parle de deux transitions principales, soit la transition bande à impureté et transition donneur-accepteur. Dans ce qui suit nous allons les citer brièvement.

**a) Recombinaisons donneur neutre - bande de valence ( $D_0, h$ )**

La présence d'une espèce chimique (impureté) appelée donneur crée des niveaux d'énergie dans la bande interdite du matériau semi-conducteur situés à une énergie  $E_D$  du bas de la bande de conduction. La recombinaison d'un électron situé sur ce niveau avec un trou de la bande de valence donne lieu à l'émission d'un photon d'énergie :

$$E = E_g - E_D \dots\dots\dots \text{(II.12)}$$

**b) Recombinaison bande de conduction - accepteur neutre (e, A0)**

Dans ce cas, l'impureté crée dans la bande interdite un niveau dont l'énergie est située au dessus du maximum de la bande de conduction à une énergie  $E_A$ . Le photon émis dans ce cas a une fréquence donnée par la relation :

$$h\omega = E_g - E_A \dots \dots \dots \text{(II.13)}$$

**II.1.2.5.4 Recombinaison donneur - accepteur neutres ( $D_0, A0$ ) :**

Lorsque un électron passe d'un niveau donneur vers un niveau accepteur cette transition donne lieu à l'émission d'un photon d'énergie égale à :

$$h\omega = E_g - (E_A + E_D) + \frac{e^2}{\epsilon R} \dots \dots \dots \text{(II.14)}$$

Où  $\frac{e^2}{\epsilon R}$  représente l'énergie d'attraction coulombienne entre les deux impuretés situées à une distance R l'une de l'autre.

**II.1.2.5.5 La recombinaison Auger :**

Dans les semi-conducteurs à gap direct fortement dopés l'un des mécanismes de recombinaison le plus compétitif pour la recombinaison bande à bande est la recombinaison Auger. Dans ce processus l'énergie produite par la recombinaison d'une paire électron-trou est transmise à un autre électron ou trou qui par la suite perd cette énergie par l'émission d'un photon.

**II.1.2.5.6 La recombinaison excitonique :**

**a) Exciton libre :**

Dans les semi-conducteurs de haute pureté et exempts de défauts cristallins, un électron libre peut interagir avec un trou libre à travers l'interaction coulombienne et former un exciton. Ceci a pour effet qu'à basse température la recombinaison radiative et par conséquent le spectre d'émission est dominé par des pics provenant de l'annihilation de ces excitons. Quand l'exciton est libre, sa recombinaison donne un photon d'énergie égale à :

$$h\omega = E_g - E_x \dots \dots \dots \text{(II.15)}$$

où  $E_x$  est l'énergie de liaison de l'exciton libre.

**b) Exciton lié :**

Dans le cas où l'exciton est lié à une impureté, sa recombinaison donne un photon d'énergie égale à :

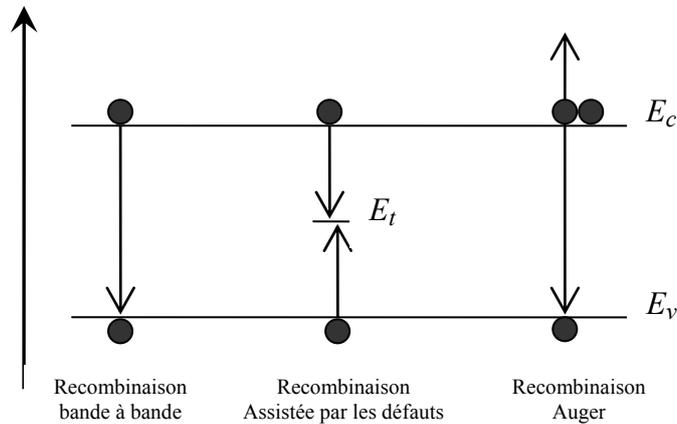
$$h\omega = E_g - E_x - E_L$$

où  $E_L$  est l'énergie de liaison de l'exciton à l'impureté.

Quand l'impureté est ionisée, l'émission du photon se fait à l'énergie

$$h\omega = E_g - (E_i - E_{ex}) \dots\dots\dots(\text{II.16})$$

avec  $E_i$  l'énergie de liaison de l'impureté et  $E_{ex}$  l'énergie de dissociation du complexe excitonique.



**Figure II.8:** Schéma représentant les différents mécanismes de recombinaison dans un matériau semi-conducteur.

**II.1.2.5.7 Recombinaison radiative/non-radiative :**

Une grande partie des dispositifs à semi-conducteur tire parti des propriétés de transport électrique uniquement.

Un électron de la bande de valence peut passer dans la bande de conduction si on lui fournit l'énergie nécessaire, par activation thermique, absorption d'un photon, collision inélastique avec un électron de haute énergie, etc. Il laisse alors un trou dans la bande de valence, et on parle de la génération d'une paire électron-trou. On considère comme principales interactions entre électrons et trous :

- l'interaction coulombienne, qui peut lier les deux particules à la manière de l'électron et du proton d'un atome d'hydrogène. On parle alors d'un exciton, qui présente un niveau d'énergie situé dans la bande interdite. La différence d'énergie entre la bande de conduction et le niveau de l'exciton est par définition l'énergie de liaison de l'exciton. Celle-ci est faible:  $\sim 5$  meV dans le GaAs.
- la recombinaison d'une paire électron-trou, par transition avec conservation du vecteur d'onde et de l'énergie, en général entre deux extrema de bande.

Dans un semi-conducteur à bande interdite directe, la transition est quasi verticale dans l'espace  $k$ , et l'énergie peut être conservée par émission d'un photon: on parle alors de

recombinaison radiative. L'étude de celle-ci permet de sonder la bande interdite au voisinage des extrema, et la distribution en énergie des photons émis (le spectre) reflète l'occupation des bandes et leur structure. Quand la température et la densité d'excitation (donc le nombre de paires électron-trou générées) augmentent, des états profonds dans les bandes sont alors occupés et il en résulte un élargissement du spectre. Dans un semi-conducteur à bande interdite indirecte, la recombinaison est accompagnée par l'émission ou l'absorption de phonons afin d'assurer la conservation du vecteur d'onde.

La recombinaison peut également être non-radiative. La transition a alors lieu, par exemple, par émission multiple de phonons, ce qui correspond à un transfert d'énergie thermique puisque les phonons sont une description corpusculaire des vibrations du réseau cristallin.

D'autres possibilités sont la recombinaison Auger, où l'énergie est transférée à un autre électron; ou la recombinaison par des états de surface ou de défauts [20].

**II.1.2.6 Profondeur de pénétration :**

La profondeur de pénétration maximum R ou le parcours électronique est exprimé par de nombreux auteurs comme suit (Yacobi et al [42]):

$$R = \left( \frac{k}{\rho} \right) \cdot E_0^\alpha \dots\dots\dots \text{(II.17)}$$

K et  $\alpha$  sont des constantes dépendant de Z et de l'énergie des électrons incidents  $E_0$ .

Kyser [43] a utilisé dans son étude sur l'émission X dans le cuivre une expression donnée sous la forme:

$$R(cm) = \frac{2.56 \cdot 10^{-3}}{\rho(g/cm^3)} \left( \frac{E_0(keV)}{30} \right)^{1.68} \dots\dots\dots \text{(II.18)}$$

Kanaya et Okayama [44] ont établi une relation valable pour des énergies  $E_0$  comprise entre 10 et 1000 keV exprimée sous la forme :

$$R(cm) = \frac{2.76 \cdot 10^{-6}}{\rho(g/cm^3)} \cdot \frac{A(g)}{Z^{8/9}} \cdot (E_0(KeV))^{5/3} \dots\dots\dots \text{(II.19)}$$

Everhart et Hoff [45] ont proposé une expression de R obtenu à partir d'une étude de la génération des paires électron trou dans le silicium sous la forme:

$$R(cm) = \frac{3.98 \cdot 10^{-6}}{\rho(g/cm^3)} (E_0(KeV))^{1.75} \dots\dots\dots \text{(II.20)}$$

Cette relation a été établie pour des énergies  $E_0$  comprise entre 5 et 25 keV et pour des matériaux ayant  $Z$  compris entre 10 et 15.

**II.1.2.7 Dissipation de l'énergie du faisceau électronique par Choc Inélastique :**

Le chocs inélastique des électrons incidents avec les électrons des couches profondes et de valence des atomes, engendre une perte d'énergie des électrons incidents au cours de leur trajectoire [10], ce processus statique, peut être décrit de façon continue par la formule de bethe(1933)[46,47,48],cette formule traduit la perte d'énergie moyenne  $dE$  par unité de longueur  $ds$ .

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{E A} \text{Ln}\left(\frac{1.166 E}{j}\right) \dots\dots\dots \text{(II.21)}$$

où  $e$  est la charge électronique,  $N_A$  est nombre d'Avogadro,  $\rho$  est la densité,  $A$  est le poids atomique,  $E$  est l'énergie moyenne d'électron, et  $J$  est le potentiel moyen d'ionisation, ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par[46,49] :

$$j = (9.76 Z + 58.5 Z^{-0.19})10^{-3} (keV) \dots\dots\dots \text{(II.22)}$$

**II.1.2.8 Energie de formation de paires électron-trou :**

Le nombre de paires électron trou créées par électron incident ou agent ionisant (photon, particule  $\alpha$ ,....etc.) est définit comme suit [50] :

$$Np = \frac{E_A}{E_{eh}} \dots\dots\dots \text{(II.23)}$$

$E_A$  est l'énergie absorbée dans le semi-conducteur

$E_{eh}$  est l'énergie de formation d'une paire électron trou, elle s'écrit sous la forme [51] :

$$E_{eh} \approx 3E_g \dots\dots\dots \text{(II.24)}$$

**II.2 Méthodes de caractérisation des nanostructures :**

**II.2.1 Microscopie électronique à balayage :**

**II.2.1.1 Introduction :**

La microscopie électronique à balayage est une méthode courante de caractérisation des matériaux. La facilité d'emploi des machines actuelles, qui permettent l'observation d'échantillons soit avec un haut pouvoir de résolution (moins de 5 nm), soit avec une grande profondeur de champ, en fait un outil apprécié et utilisé dans la plupart des laboratoires de recherche. En plus de l'observation classique de la topographie de l'échantillon, la

microscopie électronique à balayage fournit des informations quantitatives sur la composition chimique locale avec une résolution meilleure que le micron. D'autres modes d'analyse et d'imagerie donnent des informations complémentaires sur l'échantillon: la cathodoluminescence et la mesure du courant induit fournissent par exemple des indications sur les propriétés optiques et électriques des structures à semi-conducteur étudiées.

Nous rappelons ici le fonctionnement du MEB et les phénomènes physiques qui sous-tendent la formation du signal de cathodoluminescence et de courant induit.

### **II.2.1.2 Formation de l'image et modes d'imagerie :**

#### **a) Appareillage :**

Le principe de la microscopie électronique à balayage (MEB) est similaire à celui d'une caméra de télévision. La région de l'échantillon à observer est divisée en pixels (typiquement 768 lignes par 1024 colonnes), et le faisceau d'électrons balaye la région pixel après pixel. Les divers produits d'interaction résultant de l'impact et de la pénétration des électrons dans l'échantillon sont recueillis par des détecteurs. L'intensité mesurée lorsque que le faisceau se trouve sur un pixel est affichée sur le pixel correspondant de l'écran d'observation: l'image est ainsi formée par balayage séquentiel, et le grandissement obtenu dépend directement des dimensions de la zone balayée. La résolution de l'image dépend de la taille des pixels, du diamètre du faisceau et du volume d'interaction. Des détails de dimension inférieure à la taille des pixels ne pourront pas être observés et le faisceau doit avoir un diamètre inférieur ou égal à la résolution souhaitée (typiquement quelques nanomètres). Le but d'un MEB est donc de balayer un faisceau quasi-monochromatique d'électrons, d'une énergie d'environ 20 keV et d'un diamètre le plus faible possible, sur une région de l'échantillon et de mesurer les produits résultants de l'interaction faisceau-échantillon.

Pour cela, un microscope à balayage est composé de trois parties:

- la colonne, qui contient la source d'électrons et l'optique électronique;
- la chambre, où sont placés l'échantillon, monté sur une platine orientable, et les divers détecteurs qui recueillent les signaux issus de l'interaction des électrons avec l'échantillon;
- le système de contrôle et de balayage, qui pilote le système optique et assure le balayage synchronisé des écrans d'observation et du faisceau électronique.

#### **b) Interaction faisceau-échantillon :**

Le faisceau d'un MEB est quasi-monochromatique, avec une énergie des électrons  $E_b$  comprise entre 1 keV et 40 keV, et un courant de sonde  $I_b$  compris entre 10 pA et 100 nA. Le

faisceau est focalisé, dans le plan de l'échantillon, sur un spot de  $\sim 5$  nm de diamètre dans des conditions optimales d'utilisation.

On peut considérer que les processus d'interaction sont limités aux collisions élastiques et inélastiques:

- la collision élastique d'un électron avec les atomes de l'échantillon provoque une déviation à large angle de sa trajectoire sans perte d'énergie cinétique significative. Ce type de processus induit une dispersion latérale du faisceau dans l'échantillon ainsi que la rétrodiffusion de certains électrons.
- la collision inélastique d'un électron du faisceau avec un électron de l'échantillon cause une dissipation d'énergie et une déviation à faible angle. Cette perte d'énergie entraîne la création de "produits d'interaction" [42], comme des électrons secondaires, des électrons Auger, des plasmons, du rayonnement de freinage (Bremsstrahlung), des photons X et visibles, etc. Dans les semi-conducteurs la génération d'un électron secondaire se traduit par la création d'une paire électron-trou.

Le volume de l'échantillon dans lequel sont générés les produits d'interaction est appelé "**volumes de génération**", et a fait l'objet d'études aussi bien théoriques qu'expérimentales. Sa forme et son extension dépendent de l'angle d'incidence du faisceau sur la surface de l'échantillon et de l'énergie des électrons, ainsi que de la composition chimique et de l'orientation cristalline de l'échantillon.

### c) **Modes d'imagerie :**

Les produits d'interaction qui s'échappent de l'échantillon peuvent être recueillis par des détecteurs et le signal ainsi généré est alors utilisé pour faire une image de la région balayée.

La résolution de l'image et l'information obtenue dépendent directement des signaux détectés.

Les électrons secondaires, qui ont un libre parcours moyen dans l'échantillon très faible, ne s'échappent que si ils sont générés très près ( $< 5$  nm) de la surface. A cette profondeur, le volume d'interaction a un petit diamètre, comparable à la dimension du faisceau: la résolution de l'image sera donc optimale. Pour les autres produits d'interaction, le volume d'émission est beaucoup plus étendu (typiquement  $1\ \mu\text{m}$  pour une énergie de faisceau de 20 keV) et la résolution sera donc nettement moins bonne. La plupart des observations en microscopie à balayage sont ainsi effectuées en détectant les électrons

secondaires qui reflètent la topographie de la surface de l'échantillon, et donnent dans une moindre mesure des informations sur sa composition chimique. Le nombre d'électrons secondaires émis dépend directement du travail de sortie des électrons [20]

## II.2.2 Cathodoluminescence :

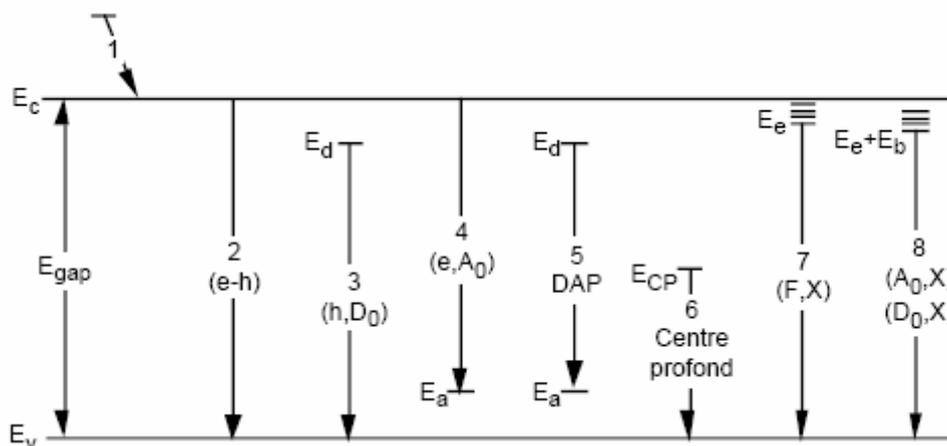
### II.2.2.1 Création de paires électron-trou :

Il faut, pour générer une paire électron-trou avec des particules de haute énergie (en comparaison avec l'énergie de bande interdite  $E_g$ ), une énergie  $E_{e-h}$  plus grande que  $E_g$ . En effet, les électrons excités par des particules de haute énergie subissent une transition entre deux états qui ne se situent pas forcément aux alentours des bords de bande. L'énergie nécessaire à la création d'une paire électron-trou par un électron de haute énergie (comparée à  $E_g$ ) est approximativement égale à  $3E_g$  [51].

Les paires électron-trou sont générées dans un volume sous le point d'impact du faisceau dont les dimensions varient notamment avec l'énergie des électrons.

### II.2.2.2 Cathodoluminescence et recombinaison radiative dans les semi-conducteurs :

La cathodoluminescence (CL) est la luminescence induite par l'interaction du faisceau d'électrons avec l'échantillon [52]. Dans les semi-conducteurs, un photon peut être émis lors d'une transition électronique entre deux états. Suivant la nature de ces états, la luminescence sera soit intrinsèque (fondamentale ou bande-à-bande) si la transition a lieu de la bande de conduction à la bande de valence, soit extrinsèque (ou activée) si la transition implique au moins un état localisé et caractéristique d'une impureté ou d'un défaut. Les différentes possibilités de recombinaison dans les semi-conducteurs sont résumées sur la **Figure II.9**:



**Figure II.9:** Principaux processus de recombinaison dans les semi-conducteurs.  $E_c$  désigne l'énergie de la bande de conduction,  $E_v$  l'énergie de la bande de valence.  $E_{d,a}$  est le niveau d'énergie d'un donneur et d'un accepteur, respectivement,  $E_{CP}$  le niveau d'un centre profond,  $E_e$  l'énergie de liaison d'un exciton et  $E_b$  l'énergie de liaison de l'exciton à un défaut ponctuel.

Le processus n°1 est une transition intrabande: un électron se trouvant au dessus du minimum de la bande de conduction (après la création d'une paire électron-trou) transite jusqu'au bord

de bande en atteignant l'équilibre thermique avec le réseau, le plus souvent par émission de phonons optiques d'abord et acoustiques ensuite. Cette transition, ou cette cascade de transitions, est aussi appelée "thermalisation" et a un temps de vie caractéristique très court (environ  $10^{-10}$  s) [53].

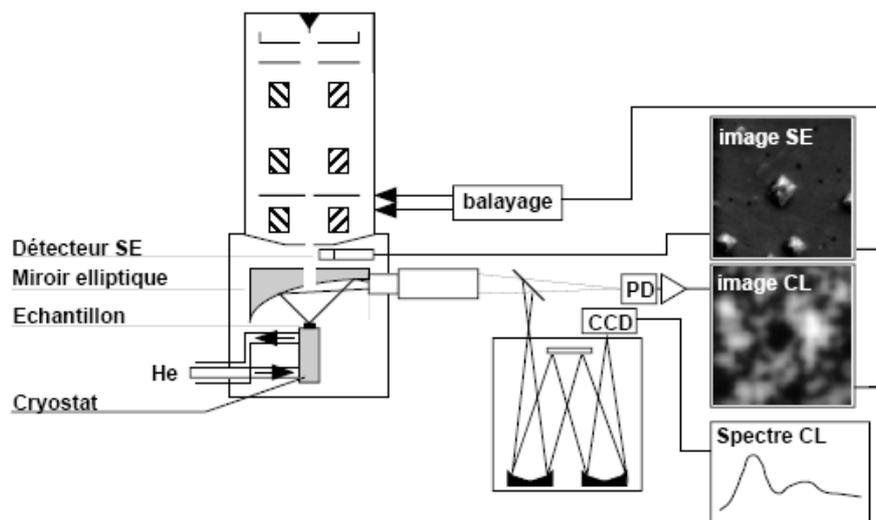
La principale caractéristique du spectre à température ambiante est la raie due aux transitions bande-à-bande (luminescence intrinsèque, processus n°2): son maximum se trouve à une énergie très proche de l'énergie de bande interdite [54].

La recombinaison entre un électron et un trou peut aussi avoir lieu par un état localisé situé près de l'une des bandes, par exemple entre un état neutre donneur (processus n°3) ou accepteur (processus n°4) et un état de la bande de valence ou de conduction respectivement.

La recombinaison entre un état donneur et un état accepteur est également possible (processus n°5): ce sont les transitions donneur-accepteur (ou DAP, Donor-Acceptor Pairs).

Les transitions entre un centre profond (ou piège, souvent une impureté ou un défaut) et l'une des bandes (processus n°6) sont généralement non-radiatives, au contraire des processus impliquant des impuretés peu profondes [55].

A partir d'une certaine température, les processus de recombinaison ont lieu non pas entre un trou et un électron libres, mais par l'annihilation d'un exciton qui est une quasi-particule formée d'un électron et d'un trou liés par interaction coulombienne. Comme dans un matériau massif dans un puits quantique, l'exciton peut être libre (processus n°7), ou lié à une impureté donneuse ou accepteuse (processus n°8).



**Figure II.10:** Schéma de l'expérience CL. La luminescence émise par l'échantillon est recueillie par un miroir elliptique et est utilisée soit pour former des images, soit pour des mesures spectrales.

### II.2.3 Courant induit par faisceau d'électron:

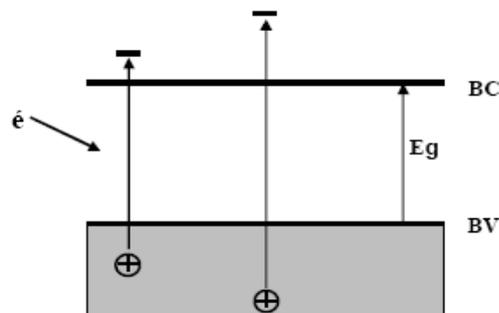
Le courant induit d'échantillon (en anglais, electron-beam induced current, EBIC) et la cathodoluminescence sont les modes d'imagerie les plus utilisés en analyse des semi-conducteurs par MEB [56].

La mesure du courant induit, bien que principalement utilisée pour visualiser des défauts, permet aussi d'estimer la longueur de diffusion des porteurs minoritaires et la vitesse de recombinaison en surface dans l'hétérostructures [57].

#### a) principe :

Lorsqu'un électron est accéléré sous plusieurs kilos électronvolts il pénètre dans un semi-conducteur et il perd une partie de son énergie en créant des paires électrons trou. Le mécanisme de cette génération de porteurs est schématisé sur la **figure II-11**. La génération de porteurs s'effectue lors d'une interaction inélastique entre un électron énergétique du faisceau incident et un électron de valence du matériau. Un atome est ainsi ionisé en produisant un électron dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence. Les densités de porteurs générés excédentaires  $\Delta n$  et  $\Delta p$  d'électrons et de trous respectivement sont égales. Le volume dans lequel les porteurs sont créés est appelé volume de génération. Les conditions d'observation sont telles que la concentration  $\Delta p$  engendrée par le faisceau est négligeable devant la concentration en dopant  $N_d$ , c'est à dire pour un matériau de type n,  $\Delta n = \Delta p \ll N_d$ . Cette condition est dite de faible injection. 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.

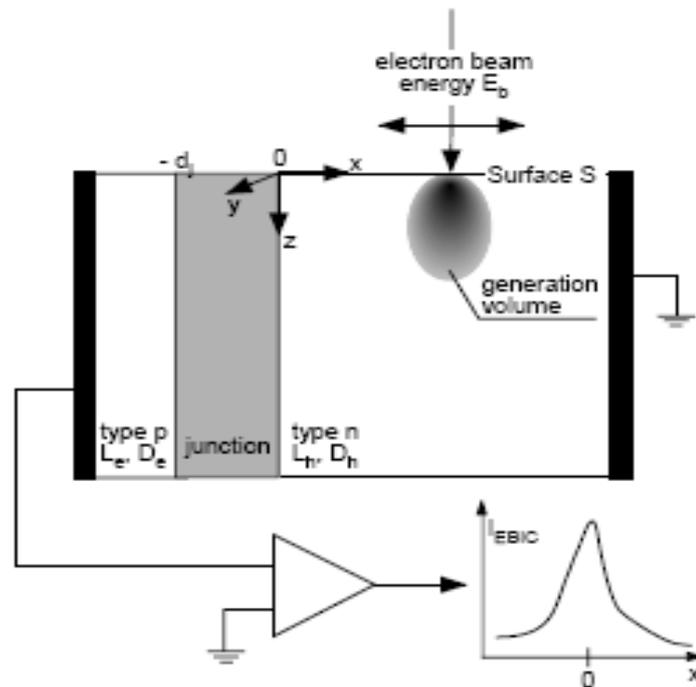
La technique EBIC consiste à récupérer ces charges pour en extraire les informations caractéristiques du matériau [58]



**Figure II.11:** Mécanisme de génération de porteurs

### b-Configuration expérimentale :

La situation expérimentale utilisée pour les mesures de courant induit est schématisée sur la **figure (II.12)**. On se place en géométrie de collection normale: la mesure est effectuée sur une surface clivée (110), avec une hétérostructure par exemple (jonction p-n) perpendiculaire à la surface d'observation. Le faisceau est déplacé sur une ligne perpendiculaire à la zone de déplétion (située ici entre  $-d_j \leq x \leq 0$ ). Le profil de courant mesuré montre alors un maximum de collection à la position de la jonction.

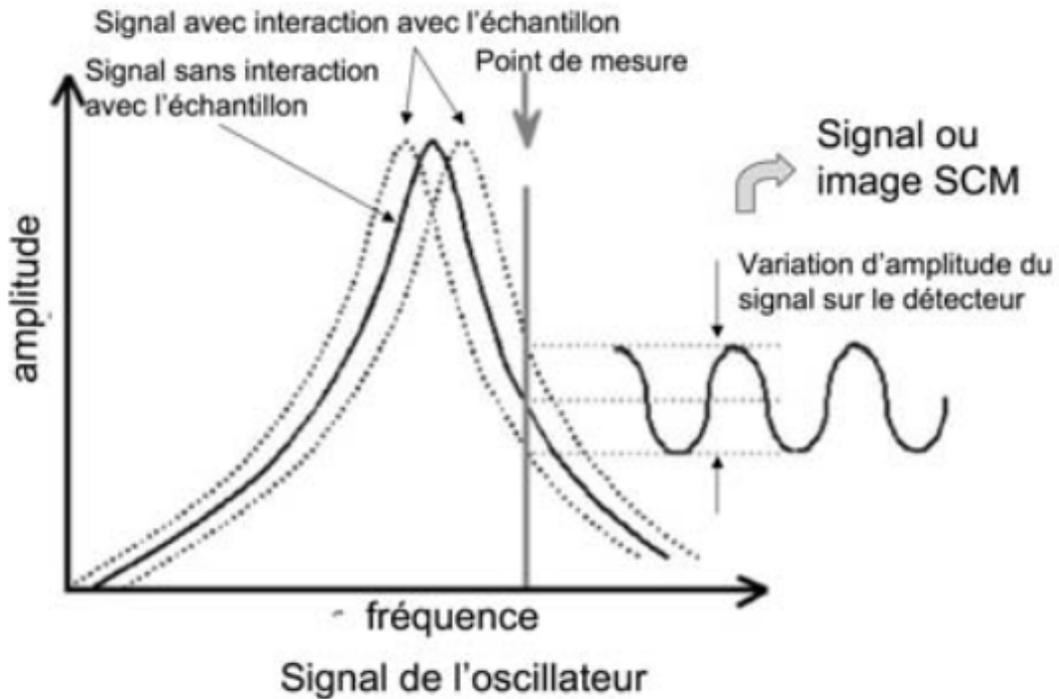


**Figure II.12:** Configuration expérimentale en géométrie de collection normale pour la mesure du courant induit par le faisceau d'électrons du MEB sur une surface clivée dans une structure comprenant une jonction p-n.

### II.2.4 Microscopie capacitive à balayage (MCB) :

La détection MCB est basée sur un circuit résonant à haute fréquence. Lorsque la pointe conductrice résonante est mise en contact avec le dispositif à tester, on remarque que l'échantillon, la pointe et sa ligne de transmission s'intègrent au circuit résonant. Les variations de capacité de l'ensemble pointe-échantillon, induites par le signal alternatif de polarisation de l'échantillon, modifient la fréquence de résonance du système. De petites variations dans la fréquence de résonance se traduisent par de fortes variations d'amplitude du signal mesuré en sortie (**figure II.13**). Le signal obtenu est le rapport  $dC/dV$  en fonction de  $V$  ( $V$  est l'amplitude du signal de polarisation). La référence [59] offre une description plus

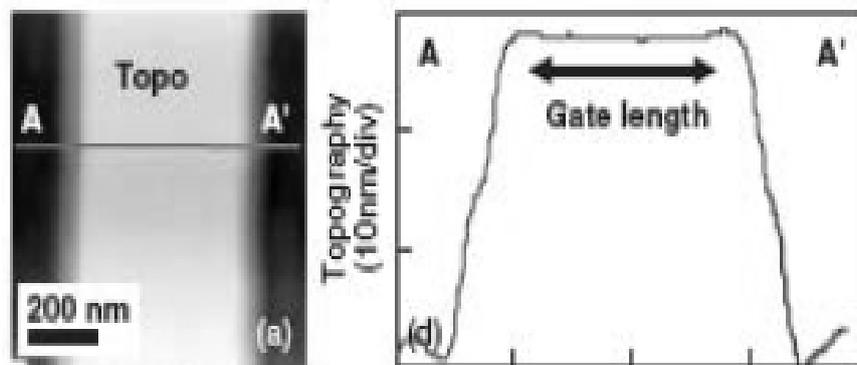
détaillée de cette technique, ainsi autres techniques de caractérisation électriques basées sur la microscopie en champ proche.



**Figure II.13** : Variations du signal détecté.

L'analyse MCB est utilisée pour le profilage 2D à haute résolution de dopants [60, 61], la caractérisation des diélectriques minces sur des semi-conducteurs [62], l'analyse de défauts dans les semiconducteurs [63]. la caractérisation des hétérostructures à puits quantiques et aussi capable de détecter les électrons situés dans les puits quantiques [64].

La **figure (II.14)** montre l'image topographique ainsi que le profil des porteurs obtenus sur un transistor MOSFET (analyse 2D) [60].



**Figure II.14** : Image SCM topographique

### **II.2.5 Cathodoluminescence en champs proche optique :**

Un nouveau système d'imagerie de cathodoluminescence, beaucoup plus performant en terme de résolution spatiale que les systèmes classiques actuels basés sur l'utilisation d'un microscope électronique à balayage (MEB) équipé d'un canon thermo-ionique et d'un système de collection des photons en champ lointain par un miroir parabolique, a été mis au point. La résolution des dispositifs classiques est généralement de l'ordre du  $\mu\text{m}$  à cause de la diffusion des électrons incidents par chocs et de la portée du transfert d'énergie au sein du matériau. Pour aller au delà de cette limite, un microscope à force atomique a été transformé en un microscope à champ proche optique et associé à un MEB équipé d'un canon à émission de champ et ceci dans le but de collecter en champ proche les photons émis suite à l'excitation par le faisceau électronique du MEB. Ainsi, des images de cathodoluminescence avec une résolution latérale de 100 nm ont été obtenues sur un échantillon [65].

La modélisation par la méthode de Monte Carlo et la technique de cathodoluminescence sera l'objet de la troisième partie.

# **Chapitre III**

## **Modélisation**

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

Les études modernes des nanostructures sont divisés en deux axes, le premier concerne les outils expérimentaux, tandis que le deuxième s'intéresse à la simulation et aux approches théoriques proposées pour comprendre les résultats expérimentaux d'une part, et de chercher les paramètres qui rentrent en jeu d'autre part. Les modèles analytiques existants jusqu'à présent ne peuvent pas traiter les cas des multicouches, parce que les structures et les propriétés physiques changent au fur et à mesure de la diffusion des électrons dans le matériau. Donc, il ne reste que la simulation et les modèles numériques pour traiter les hétérostructures.

Nous souhaitons souligner que le but des simulations n'est pas de fournir un ajustement de courbes aux données expérimentales mieux que celui de la théorie analytique, mais le but est de créer une compréhension des processus et des propriétés physiques, en se servant de la commande parfaite des conditions expérimentales dans l'ordinateur et de la possibilité d'examiner chaque aspect des configurations du système en détail. Le résultat désiré est alors l'élucidation des mécanismes physiques qui sont responsables des phénomènes observés [68].

La cathodoluminescence CL est une technique très utilisée pour étudier les matériaux semiconducteurs. Pour réaliser cette technique dans le cas des nanostructures 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 règles 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.

### **III.2 La Méthode Monte Carlo (MC):**

#### **III.2.1 Introduction :**

Les méthodes de Monte Carlo (MC) sont des méthodes d'intégration numérique qui utilisent l'aléatoire, si l'objectif est d'approcher une intégrale - incalculable explicitement. Elles permettent aussi de résoudre de nombreux problèmes autrement insolubles comme par exemple l'évaluation d'intégrales sur des domaines complexes et/ou de grande dimension, le calcul de fonctionnelles de processus stochastiques ou l'exploration de densités de probabilité complexes. Les grandes avancées méthodologiques dans le domaine des méthodes de Monte Carlo sont souvent dues aux physiciens. Néanmoins, ces propositions ne couvrent pas tous les domaines d'application : la recherche méthodologique autour des méthodes de simulation est

donc un axe de recherche d'actualité en prise avec de nombreux domaines scientifiques (physique statistique, ingénierie, statistiques computationnelles, finance...). [69].

Dans le sens le plus large, la simulation de MC signifie n'importe quelle simulation qui utilise des nombres aléatoires dans l'algorithme de simulation [70].

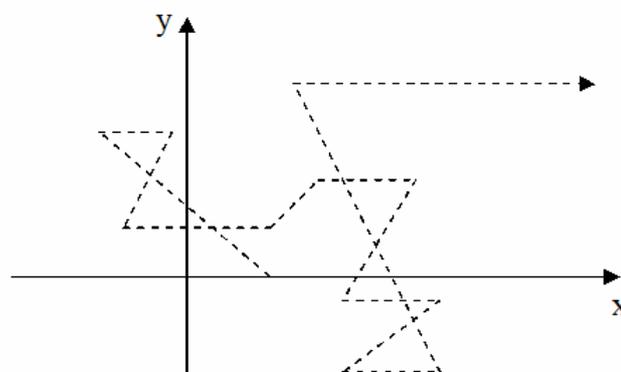
Les méthodes de MC, bien qu'utilisées depuis fort longtemps, ont pris une importance croissante depuis leur mise en œuvre par Von Neumann, Ulam et Metropolis à la fin de la seconde guerre mondiale dans le but d'étudier les processus de diffusion. Ces méthodes se prêtent bien à la modélisation de tels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

### III.2.2 Quelques Applications de la méthode Monte Carlo :

#### III.2.2.1 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 pour traiter ce type de problème [71].

La technique généralement utilisée pour traiter ce type de problème consiste à décomposer la trajectoire d'une particule en un grand nombre de séquences.



**Figure : III.1** Simulation Monte Carlo d'une trajectoire d'une particule

### III.2.2.2 La marche aléatoire :

La marche aléatoire ou le mouvement brownien, observé et décrit par le biologiste Robert Brown au dix-neuvième siècle, a été (et est encore actuellement) l'objet d'une quantité considérable de travaux scientifiques.

Beaucoup de processus physique tels que le mouvement brownien, le transport des électrons par les métaux, quand ils seront traités par des ordinateurs, ils seront modélés 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 y.

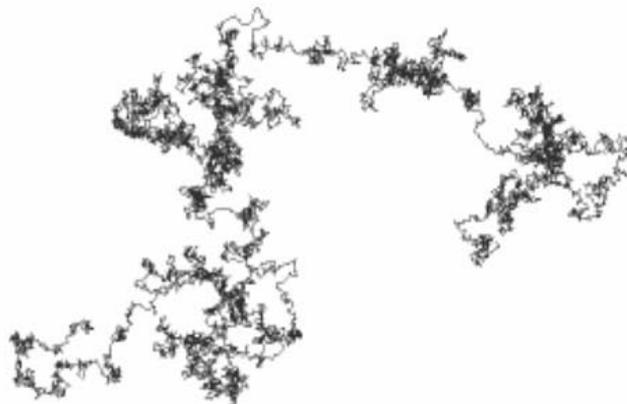


Figure : III.2 Simulation de la marche aléatoire (mouvement brownien)

## III.2 Génération de nombres aléatoires :

### III.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.

### III.2.2 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 :

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

Où :  $m = 2^{31}$ ,  $a = 843314861$ ,  $c = 453816693$  [72]

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  $[0,1]$ .

### III.2.3 La syntaxe de la fonction Ran :

La syntaxe de la fonction Ran est la suivante [73] :

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

Le terme *iseed* (germe en français), est la valeur initiale donnée pour faire tourner le programme. Par défaut le germe est  $X_0 = 0$  [72].

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 réinitialisé 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).

### III.3 Détails du modèle :

Beaucoup de modèles analytiques ont été 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.

Ainsi, les modèles analytiques ne peuvent pas traiter d'une façon fiable les structures les plus compliquées, telle que les multicouches et nano structures en général. Il reste, donc, les modèles numériques qui peuvent être apte pour analyser et comprendre les nano structures. Notre travail consiste à réaliser un modèle numérique dans toutes ces étapes en se basant sur des théories physiques connues.

#### III.3.1 Les bases physiques :

L'interaction du faisceau d'électrons avec la matière solide, la dissipation d'énergie d'électrons et la génération des porteurs dans le solide sont de grande importance pour l'analyse de la technique cathodoluminescence. 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 divisé 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 trajectoire des électrons, 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 (principe de la conservation d'énergie).

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

L'électron pénétrant aura une certaine énergie après sa traversé de la surface de l'échantillon. Cette énergie est donnée par [74] :

$$E = E_0 (1-\gamma) \quad \text{(III.3)}$$

$E_0$  : 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 entre deux collisions successives est donnée par [74] :

$$S = -\lambda \ln (R) \quad \text{(III.4)}$$

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

Remarque : si  $R=0$  le programme de calcul rejette la valeur et choisit un autre tirage

$\lambda$  : le libre parcours moyen du matériau

Le libre parcours moyen  $\lambda$  est donné par la relation suivante [74]:

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad (\text{III.5})$$

$A$  : 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 [74] :

$$\sigma = (5.21 \cdot 10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E + m_0 c^2}{E + 2m_0 c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta + 1)} \quad (\text{III.6})$$

Où :

$Z$  : le nombre atomique de l'atome ( $Z=64$  pour le GaAs qui est supposé en tant qu'un élément, ainsi  $Z_{\text{GaAs}} = Z_{\text{Ga}} + Z_{\text{As}}$ ) [74,75]. Le même procédé pour le AlGaAs qui est aussi supposé en tant qu'un élément, ainsi  $Z_{\text{AlGaAs}}$  égale, soit ( $Z_{\text{Al}} + Z_{\text{As}}$ ) soit ( $Z_{\text{Ga}} + Z_{\text{As}}$ ) suivant la fraction molaire  $x$  d'Al.

$E$  : l'énergie de l'électron incident (keV).

$\delta$  : Le paramètre d'écrantage.

Le paramètre d'écrantage est donné par la relation suivante [76] :

$$\delta = (3.4 \cdot 10^{-3}) \cdot \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (\text{III.7})$$

L'angle  $\alpha$  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  $\alpha$ ), qui peut être dérivé de l'équation (III.6) [74].

Ainsi, un rapport obtenu à partir de la probabilité de distributions est [74]:

$$\cos \alpha = 1 - \frac{2\delta R}{1 + \delta - R} \quad (\text{III.8})$$

on prend un angle  $\theta$  (aléatoire entre 0 et 180°), puis on compare après chaque collision les deux angles ( $\theta$  et  $\alpha$ ) pour connaître si la collision est élastique ou inélastique [75].

Dans le cas d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As l'énergie de la bande interdite est donnée par [77]:

$$E_g = \begin{cases} 1.424 + 1.247x & \text{for } (0 \leq x \leq 0.45) \\ 1.900 + 1.25x + 0.143x^2 & \text{for } (0.45 < x \leq 1.00) \end{cases} \quad \text{(III.9)}$$

L'énergie de création d'une paire électron trous est donnée par [51]:

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

La correction relativiste dans l'équation (III.6) peut être ignorée pour des énergies d'électron moins de 50 keV, c.-à-d., pour la plupart des travaux par 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 faible.

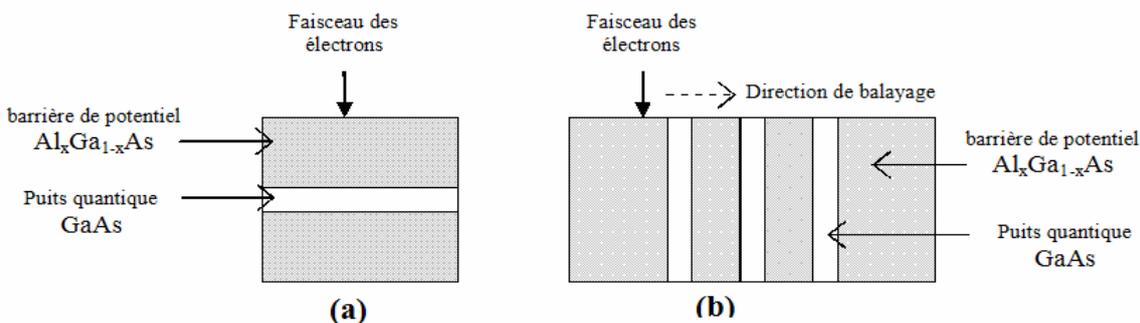
Req : La diffusion des paires électrons trous se fait selon l'équation :  $\Delta n_{(QW)} = \Delta n_{(Barrier)} e^{-\frac{x}{L_d}}$

**Tableau III.1:** quelques paramètres de GaAs et Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As utilisés dans notre calcul [77]:

Matériau	parametre de maille (Å)	Densité (g/cm <sup>3</sup> )	Energie du Gap (eV)	Type du Gap
GaAs	5.6533	5.360	1.424	direct
Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	5.6533+0.0078X	5.36-1.6X	1.424+1.247X (0 ≤ X ≤ 0.45) 1.900+0.125X+0.143X <sup>2</sup> (0.45 < X ≤ 1.00)	(0 ≤ X ≤ 0.45) direct (0.45 < X ≤ 1.00) indirect

### III.3.1.2 Diffusion des électrons à travers les puits quantiques :

Puisque les dimensions des couches dans les deux échantillons étudiées **Figure III.3** sont de l'ordre de nanomètre, il est donc préférable et obligatoire d'utiliser la mécanique quantique en résolvant l'équation de Schrödinger pour calculer le taux de transmission *T* et de réflexion *R* à travers les parois des puits quantiques et des barrières de potentiels.



**Figure III.3:** Schéma présente les deux échantillons étudiés **(a)** hétérostructure à un seul puits quantique, **(b)** hétérostructure à multipuits quantiques

Si la barrière de potentiel ( $V_{\max}$ ) est supérieur à l'énergie de l'électron il existe un coefficient de transmission  $T$  non nul, que l'on appelle communément la transparence de la barrière de potentiel, et un coefficient de réflexion  $R$  aussi non nul, sachant que  $T+R=1$ . C'est évidemment là l'effet le plus spectaculaire, car une telle barrière est rigoureusement infranchissable en mécanique classique. Cet effet nommé d'une façon imagée « effet tunnel », a joué un rôle important [78].

La barrière rectangulaire est définie par :

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a$$

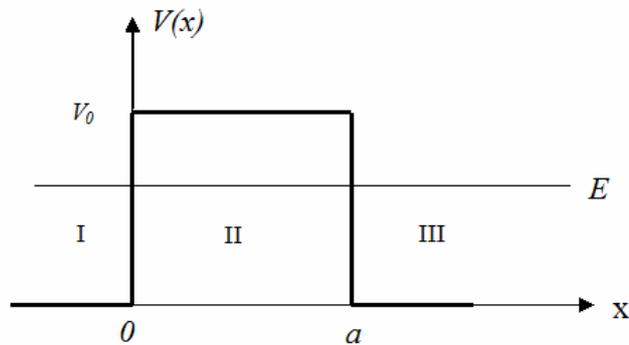
a) le cas où  $E < V_0$  :

Le traitement est très voisin de celui du puits rectangulaire, Dans les régions (I) et (III) pour les quelles  $V$  est nul, nous avons les solutions :

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi_{III} = e^{ik(x-a)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



**Figure III.4:** Barrière de potentiel rectangulaire ( $E < V_0$ ) [78].

Dans la région (II), l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi = 0$$

donc :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0$$

avec

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

nous avons la solution :

$$\psi_{II} = A' e^{\alpha x} + B e^{-\alpha x}$$

les conditions de continuité de  $\Psi_I$  et de  $\Psi_{II}$  fournissent les relations :

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow A + B = A' + B'$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \Rightarrow ik(A - B) = \alpha(A' - B')$$

$$\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \Rightarrow A' e^{\alpha a} + B' e^{-\alpha a} = 1$$

$$\frac{d\Psi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\Psi_{III}(a)}{dx} \Rightarrow \alpha(A' e^{\alpha a} - B' e^{-\alpha a}) = ik$$

Ce qui donne: 
$$4A = e^{-\alpha a} \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) \left(1 + \frac{\alpha}{ik}\right) + e^{\alpha a} \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) \left(1 - \frac{\alpha}{ik}\right).$$

Il est facile d'en déduire la transparence [78] :

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2 \alpha a$$

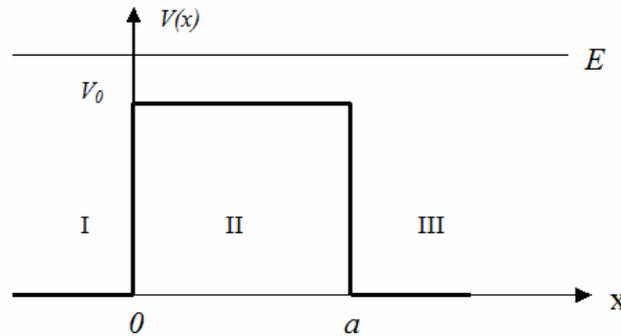
$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)} \quad \text{(III.11)}$$

On a : 
$$R + T = 1$$

Donc le coefficient de réflexion s'écrit [78] :

$$R = 1 - \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)} \quad \text{(III.12)}$$

b) Dans le cas où  $E > V_0$  :



**Figure III.4:** Barrière de potentiel rectangulaire ( $E > V_0$ ) [78].

dans ce cas la transparence s'écrit [78] :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}\right)} \quad (\text{III.13})$$

Et le coefficient de réflexion s'écrit [78]:

$$R = 1 - \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}\right)} \quad (\text{III.14})$$

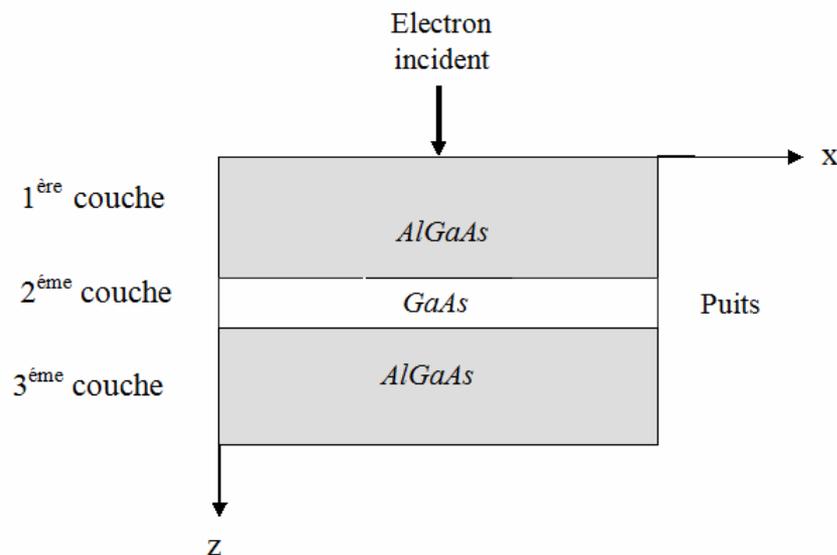
### III.3.2 Les étapes de calcul :

Le travail réalisé dans ce sujet peut être divisé en deux parties, la première partie concernant la caractérisation d'une hétérojonction à puits quantique *AlGaAs/GaAs/AlGaAs* dont la dimension du puits quantique de *GaAs* est de l'ordre de **centaines** de nanomètre.

La deuxième partie est consacrée à l'étude et la caractérisation d'une hétérostructure à trois puits quantiques ou (multi-puits quantiques) d'*AlGaAs/GaAs/AlGaAs*, dont les dimensions sont de l'ordre de **dizaines** de nanomètre.

#### III.3.2.1 Puits quantique perpendiculaire ( $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$ ) :

Un électron d'énergie  $E_0$  frappe l'échantillon d' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  à l'origine et à  $90^\circ$  de sa surface. Le premier événement d'interaction est supposé se produire à l'origine. Si l'électron continue à pénétrer dans l'échantillon, la direction et l'énergie sont enregistrés ou bien sauvegardés dans le programme. On prend en considération les paramètres physiques de chaque couche parmi les trois couches de l'échantillon selon la position  $z$  (**figure III.5**).



**Figure III.5:** Hétérojonction d' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  [84].

Dans notre calcul nous sommes intéressés par la génération des paires électrons-trous produites pendant la collision des électrons incidents avec les atomes du matériau.

### III.3.2.1.1 Trajectoire des électrons :

L'électron frappe la surface d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$ , et commence à faire des chocs inélastiques ou élastique avec les atomes de la matière cible.

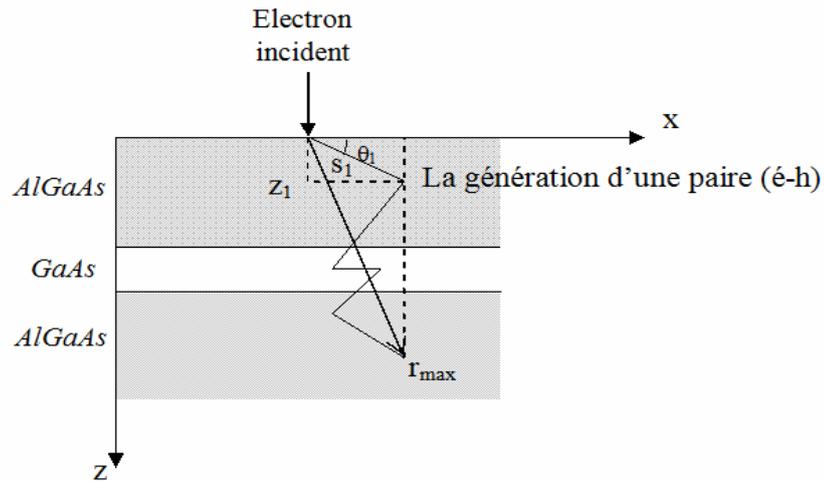


Figure III.6: Hétérojonction d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs$  [84].

Pour simplifier le calcul, on prend deux dimensions (x,z). Les coordonnées cartésiennes du point de choc, sont calculées à partir de la relation suivante :

$$\begin{cases} x_i = S_i \cos \theta_i \\ z_i = S_i \sin \theta_i \end{cases} \quad (\text{III.15})$$

Avec  $S_i$  est la distance entre deux collisions successives calculée à partir de l'équation (III.4). Si  $z_i$  appartient à la deuxième couche (GaAs) on prend dans ce cas les paramètres physiques de GaAs et l'électron continue sa trajectoire et enfin lorsque  $z_i$  appartient à la troisième couche on prend les paramètres d' $AlGaAs$ .

### III.3.2.1.2 Profondeur de pénétration :

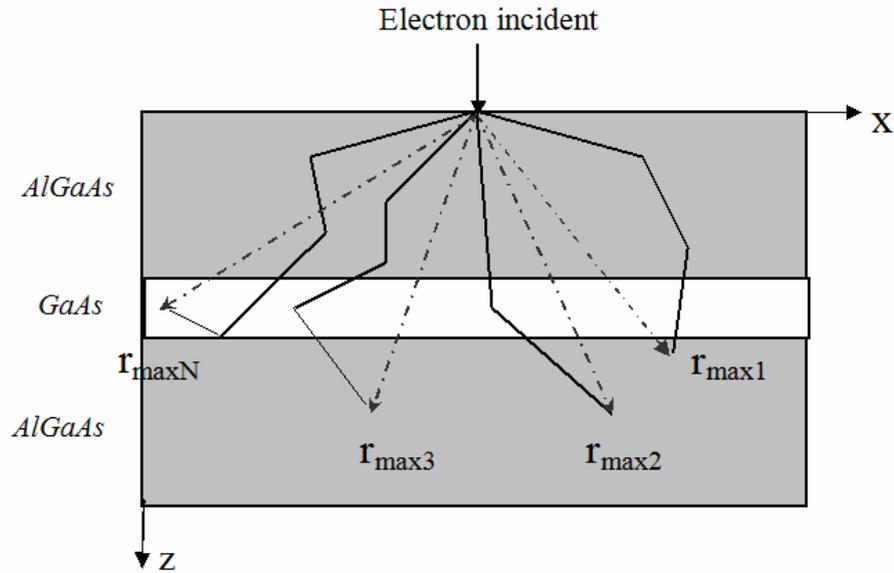
$r_{\max}$  qui est la distance la plus grande qui peut être parcouru par un électron incident comme il est illustrée dans le figure (III.7).

Donc :

$$(r_{\max})_i = [(x_n)^2 + (z_n)^2]^{1/2} \quad (\text{III.16})$$

Où  $(x_n, z_n)$  sont les coordonnées cartésiennes du point n qui correspond à la distance la plus grande, pour un faisceau électronique qui contient  $n_{el}$  électrons pénétrants dans l'échantillon, la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{\max})_i$ , elle est donnée par la relation suivante :

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{\max i}}{n_{el}} \quad (\text{III.17})$$



**Figure III.7:** Calcul de la profondeur de pénétration dans l'hétérostructure  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ .

Après avoir calculer cette profondeur, on a introduit les relations (I.18), (I.19) et (I.20) (les relations des parcours électroniques calculés d'après : Wittry-Kyser, Kanaya – Okayama et Everhart – Hoff) dans notre programme pour faire une comparaison entre le parcours trouvé par notre modèle pour le *GaAs* et ceux trouvés par ces chercheurs.

### III.3.2.1.3 Profil de distribution (génération des porteurs en excès):

Pour calculer le profil de distribution on a poursuivi les étapes suivantes :

- calcul du nombre des paires ( $\Delta n_i$ ) généré dans chaque zone.
- nous introduisons la correction due à la diffusion des porteurs (e-h) (grâce au gradient de concentration) dans le puits quantique de *GaAs*. La probabilité pour qu'un électron traverse une distance  $z_i$  s'écrit :

$$P \propto e^{-\frac{z_i}{L_D}} \quad \text{(III.18)}$$

$z_i$  : distance traversé par un électron dans le semiconducteur.

$L_D$  : longueur de diffusion de l'électron dans un semiconducteur.

Donc, lorsque les électrons pénètrent le puits quantique de *GaAs* ils sont confinés dans ce puits, et la concentration des pairs (é-h) augmente.

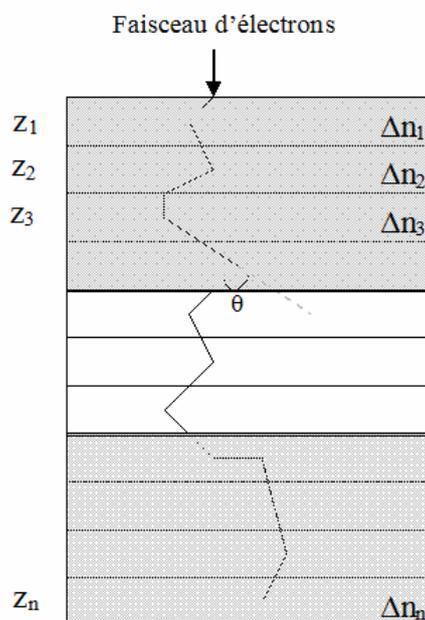
- Calcul de la surface rectangulaire  $S_i$  pour chaque zone.

La concentration linéaire  $C_i$  [cm] dans la zone  $i$  sera :

$$C_i = \Delta n_i / z_i \quad \text{(II.19)}$$

une autre répartition à été fait (**Fig III.8**) cette répartition est basée sur la division théorique de l'échantillon en un nombre de zones horizontales,  $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_n$ .

(parce que dans ce cas, chaque pair (e-h) qui appartient a une telle zone a la même distance de la surface, ce qui permet de calculer le signal cathodoluminescence ultérieurement)



**Figure III.8:** Zones horizontales pour calculer le signal CL.

#### III.3.2.1.4 Calcul de signal CL (recombinaison des porteurs en excès) :

Dans ce calcul nous essayons de déterminer l'allure de l'intensité de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération.

Après la division de l'échantillon comme il est montré dans la **figure III.8**, dans chaque zone, une quantité de paires électron trou ( $\Delta n_i$ ) est générée. Mais l'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$ , résulte seulement de la recombinaison radiative des porteurs en excès dans le *GaAs*. Dans *AlGaAs*, la recombinaison est non radiative et donc on ne la prend pas en considération dans le calcul du signal  $I_{CL}$ , sauf les porteurs qui se trouvent près du puits quantique, dans ce cas il y a une probabilité non nulle pour que ces porteurs peuvent diffuser vers le puits (*GaAs*) et se recombinent d'une façon radiative.

Dans notre cas, à cause des phénomènes de confinements, on a supposé que tous les porteurs  $\Delta n$  vont se recombiner, par conséquent le signal cathodoluminescence est donné par :

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \Delta n(z) \exp(-\alpha z) dz \quad \text{(III.20)}$$

$\alpha$  : est le coefficient d'absorption.

En utilisant les couches proposées dans notre modèle (**figure.III.7**), cette intégrale devient une sommation sur le nombre de couches, on a alors :

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

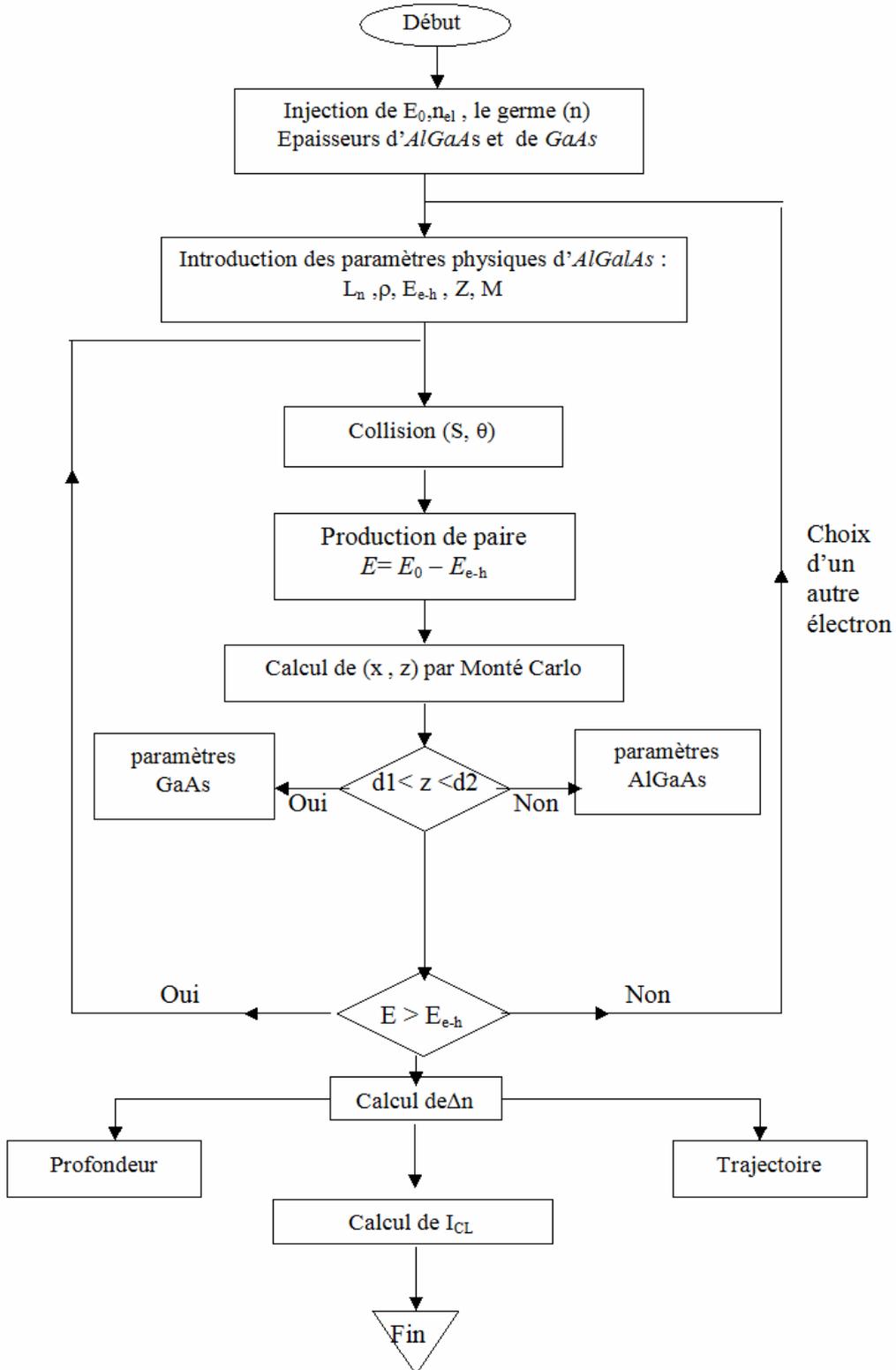
Remarque: dans le cas du théorème de Shockly-Read-Hall, l'intensité de la cathodoluminescence est donnée par:

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

Le terme  $(\Delta n/\tau_n)$  est le taux de recombinaison dans le cas d'un échantillon massive.

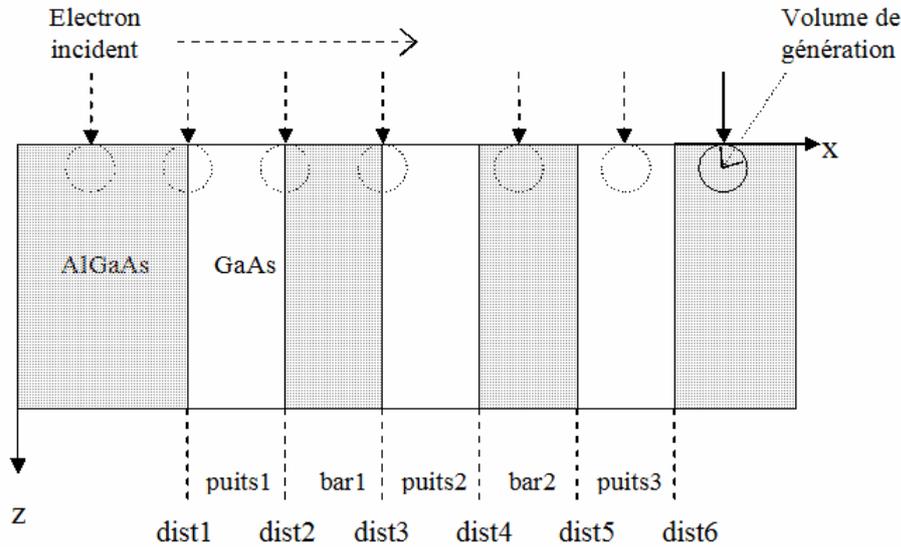
**III.3.2.1.5 Organigramme :**

Le programme a été écrit en langage FORTRAN, l'organigramme du programme est représenté si dessous :



**III.3.2.2 Multi puits quantiques parallèles :**

Considérons le cas d'un électron incident d'énergie  $E_0$  parallèle par rapport au puits quantiques, qui frappe une face plane de l'échantillon (multi puits quantiques) comme il est montré dans la **figure III.8**.



**Figure III.8:** Multi puits quantiques parallèles  $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs$

On fait déplacer le faisceau électronique le long de la surface de l'échantillon, le volume de génération est assimilé à une sphère, parce que l'énergie d'accélération  $E_0$  est faible.

L'électron frappe l'échantillon dans la région d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  au départ et commence à faire des collisions et après chaque collision l'électron perd une partie de son énergie en produisant une paire électron-trou.

**III.3.2.2.1 Trajectoire des électrons :**

Les coordonnées cartésiennes du point de choc, sont calculées à partir de la relation **III-15**

**III.3.2.2.2 Profondeur de pénétration :**

$r_{max}$  qui est la distance maximale qui peut être traversé par un électron incident est illustrée dans les **figure III.9**, donc :  $(r_{max})_i = [(x_n)^2 + (z_n)^2]^{1/2}$

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

Pour un faisceau électronique qui contient  $n_{el}$  électrons pénétrant dans l'échantillon, la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{max})_i$ , il est donné par la relation **III-17** :

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{max\ i}}{n_{el}}$$

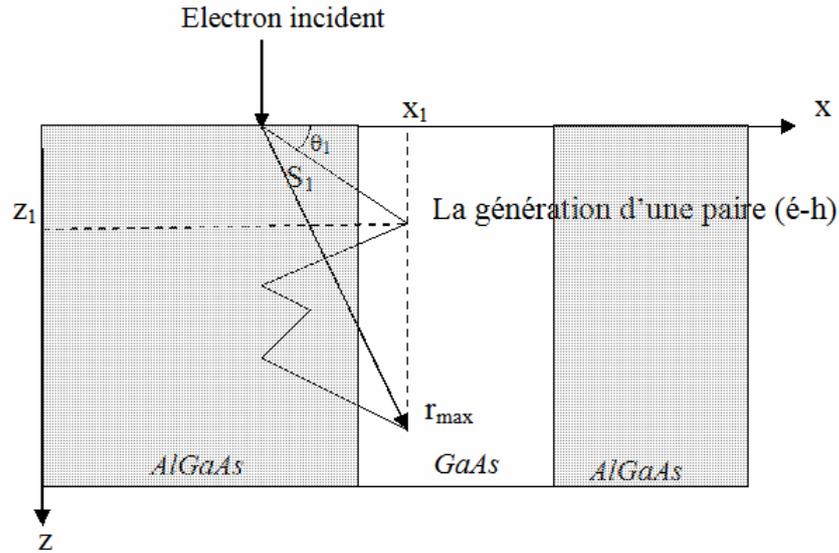


Figure III.9: Représentation de  $r_{max}$ .

III.3.2.2.3 Calcul de nombre de paires ( $\Delta n_i$ ) généré:

On considère un échantillon qui a trois puits quantiques de *GaAs* parallèles, donc trois régions de type *GaAs* et quatre régions de type *AlGaAs*, donc deux barrières de potentiels rectangulaires comme il est montré dans la **figure III.10**.

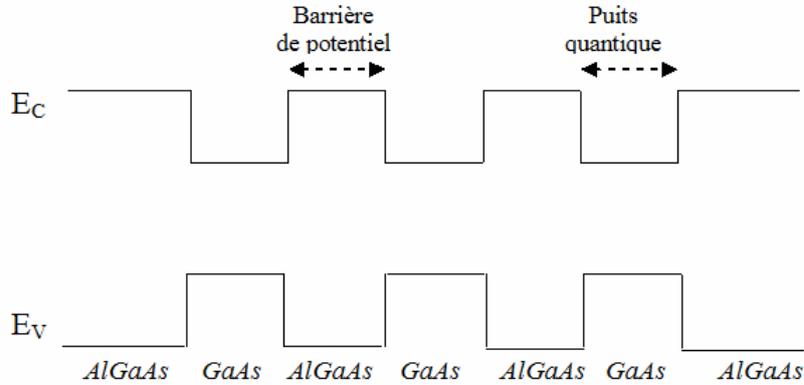
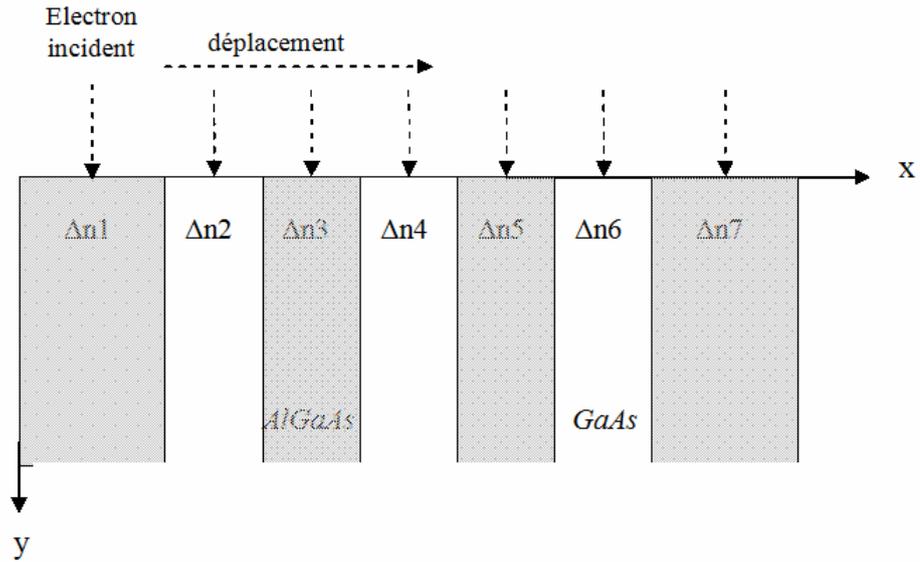


Figure III.10: Représentation énergétique de l'hétérojonction à puits quantiques

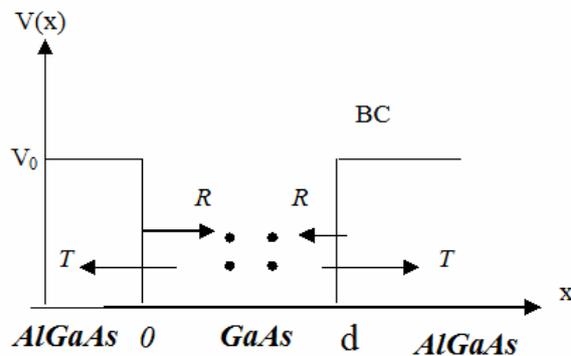
Les séquences de calcul sont les suivants :

- Lorsque le faisceau électronique balaye la surface de l'échantillon une quantité des paires électron-trou ( $\Delta n_i$ ) est générée dans chaque région : ( $\Delta n_1$ ), ( $\Delta n_2$ ), ( $\Delta n_3$ ), ( $\Delta n_4$ ), ( $\Delta n_5$ ), ( $\Delta n_6$ ), ( $\Delta n_7$ ) dans les régions 1,2,3,4,5,6, et 7 respectivement, comme il est montré dans la **figure (III.11)**.



**Figure III.11:** Séquence de calcul de nombre de paires ( $\Delta n_i$ ) généré.

- Dans notre modèle, la diffusion des électrons se fait à travers les barrières (AlGaAs) par les phénomènes de transmission et de réflexion ( $T \neq 0$  et  $R \neq 0$ ). La réflexion et la transmission peuvent se faire plusieurs fois dans le puits quantique selon la durée de vie de l'électron qui est déterminée par la longueur de diffusion ( $L_D$ ) et la largeur de barrière ( $d$ ) (**figure III.12**).



**Figure III.12:** Electrons dans une barrière de potentiel.

Lorsque les électrons traversent le puits quantique, le coefficient de transmission par l'effet tunnel est donné par la relation **III-13**.

Dans le cas de la réflexion de ces électrons sur les parois de ce puits le coefficient de réflexion est donné par la relation **III-14**.

Une fois l'électron entre dans le puits quantique (GaAs), il sera confiné, c'est-à-dire il fera des réflexions totales entre les parois du puits quantiques ( $T = 0$  et  $R = 1$ ), **figure (III.13)**.

### III.4 Conclusion :

- Dans ce chapitre un modèle de calcul Monte Carlo des trajectoires électroniques et de la profondeur de pénétration ainsi que de l'intensité du signal cathodoluminescence est présenté pour deux hétérostructures à puits quantique et à multipuits quantiques. de la famille  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ .
- Ce modèle prend en compte les paramètres du matériau (coefficient d'absorption, longueur de diffusion  $L_D$ , les largeurs des puits quantiques  $d$ , la fraction molaire  $x$ , aussi un autre paramètre important qui est l'énergie d'accélération des électrons incidents  $E_0$ .
- Le modèle proposé prend en considération des effets quantiques, tels que la transmission et la réflexion à travers les barrières ( $AlGaAs$ ), ainsi que le confinement dans les puits quantiques ( $GaAs$ ), en utilisant la mécanique quantique (résolution de l'équation de Schrödinger avec les ondes planes  $\psi(r) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}}$ ).

Pour montrer la consistance du modèle le troisième chapitre est consacré aux résultats obtenus.

## **Chapitre IV**

### **Résultats et discussions**

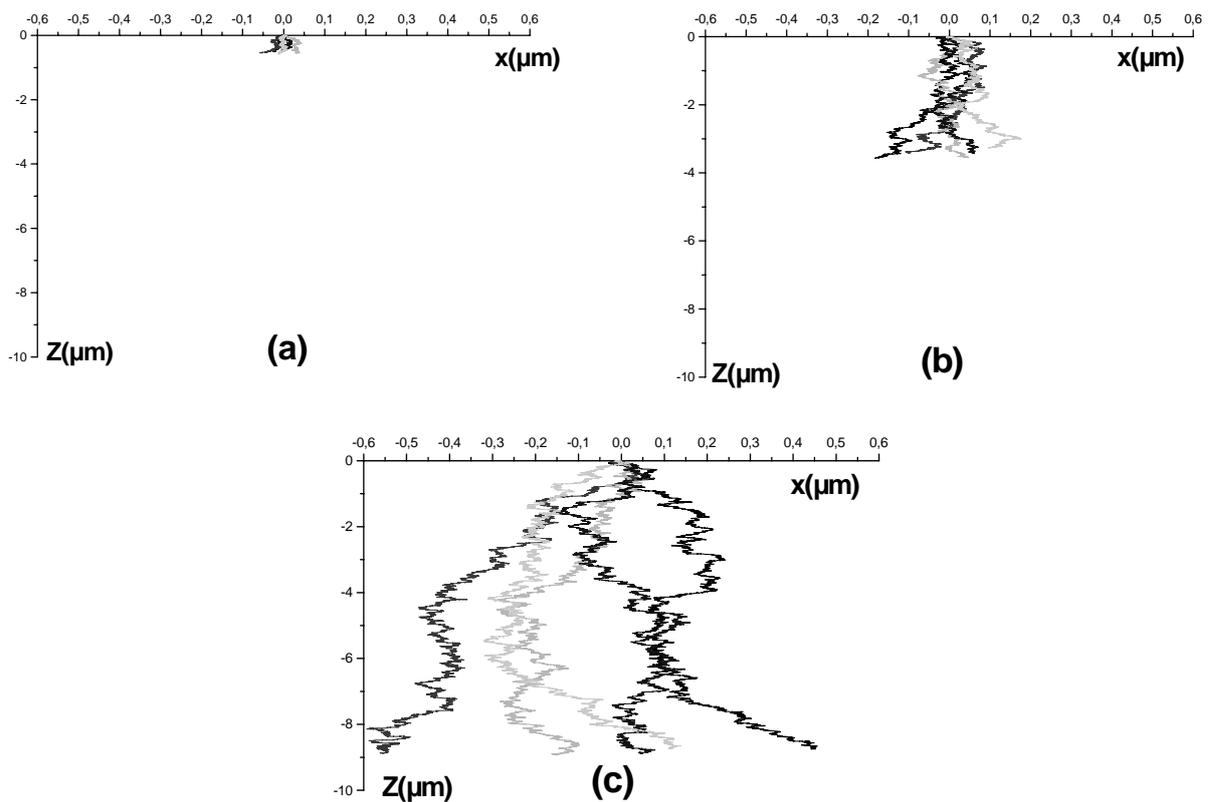
### IV.1 Introduction :

Dans ce chapitre, on présentera les résultats de calcul concernant les trajectoires des électrons, la profondeur de pénétration, le volume de génération et le profil de distribution sous l'influence de l'épaisseur des puits quantiques et la longueur de diffusion des électrons, ainsi que le signal CL dans les deux hétérostructures, à un seul puits  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  et à multi puits quantiques de type  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ .

Dans le but est de prévoir et de déterminer les paramètres responsables de la variation du signal CL et même dans l'imagerie CL, on présentera les résultats de simulation basés sur notre modèle concernant le calcul du signal CL dans une hétérostructure à multipuits quantiques.

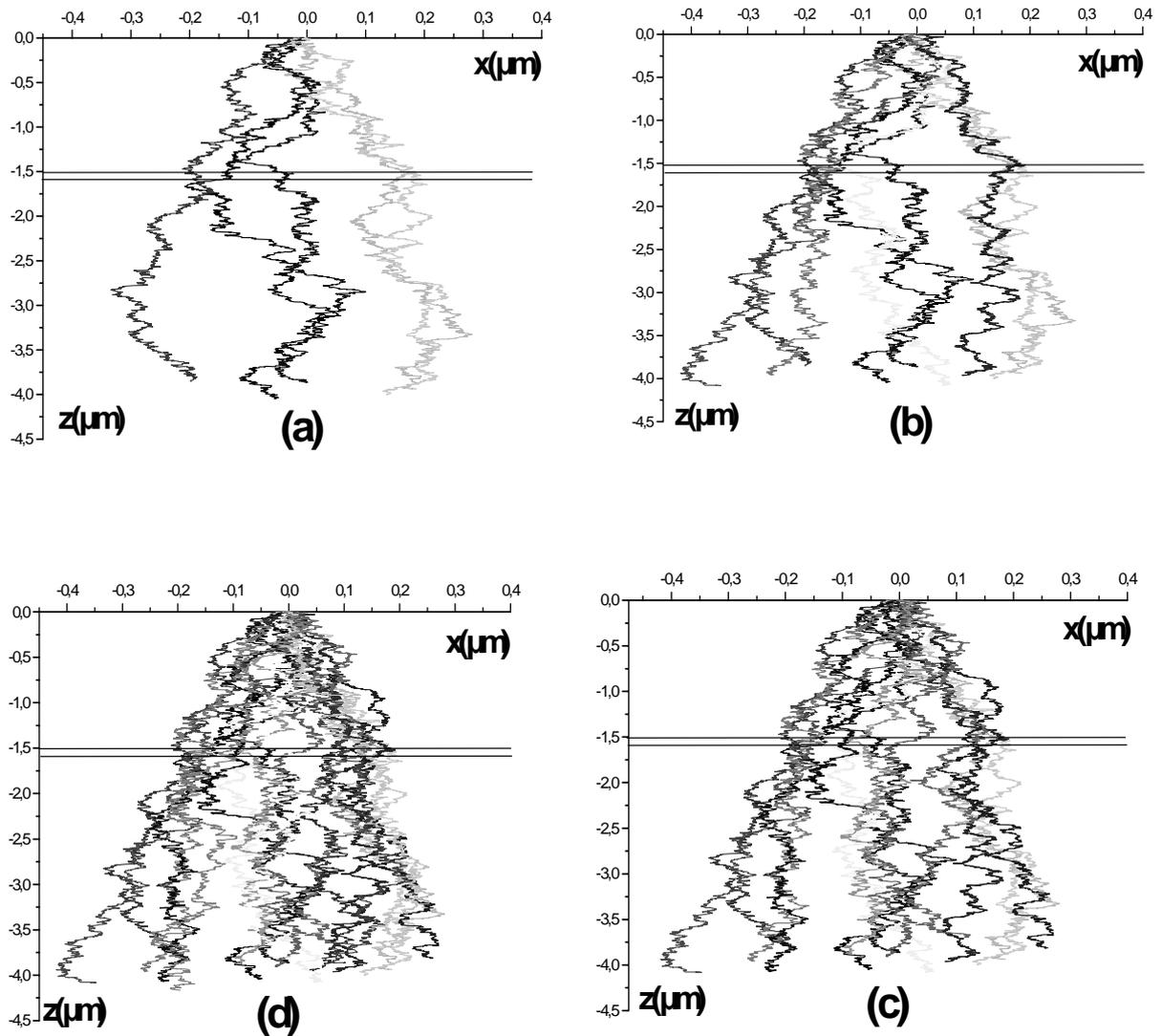
### IV.2 Trajectoire des électrons:

La **figure IV.1** représente des trajectoires électroniques dans le GaAs massive pour différentes valeurs de l'énergie d'accélération  $E_0$ .



**Figure IV.1:** Les trajectoires des 5 électrons pénétrants dans le GaAs pour :  
 (a)  $E_0 = 10$  keV, (b)  $E_0 = 25$  keV, (c)  $E_0 = 40$  keV.

La **figure IV.2** représente les trajectoires électroniques dans d'AlAs/GaAs/AlAs, sachant que la largeur de puits de GaAs est  $d = 500$  nm.

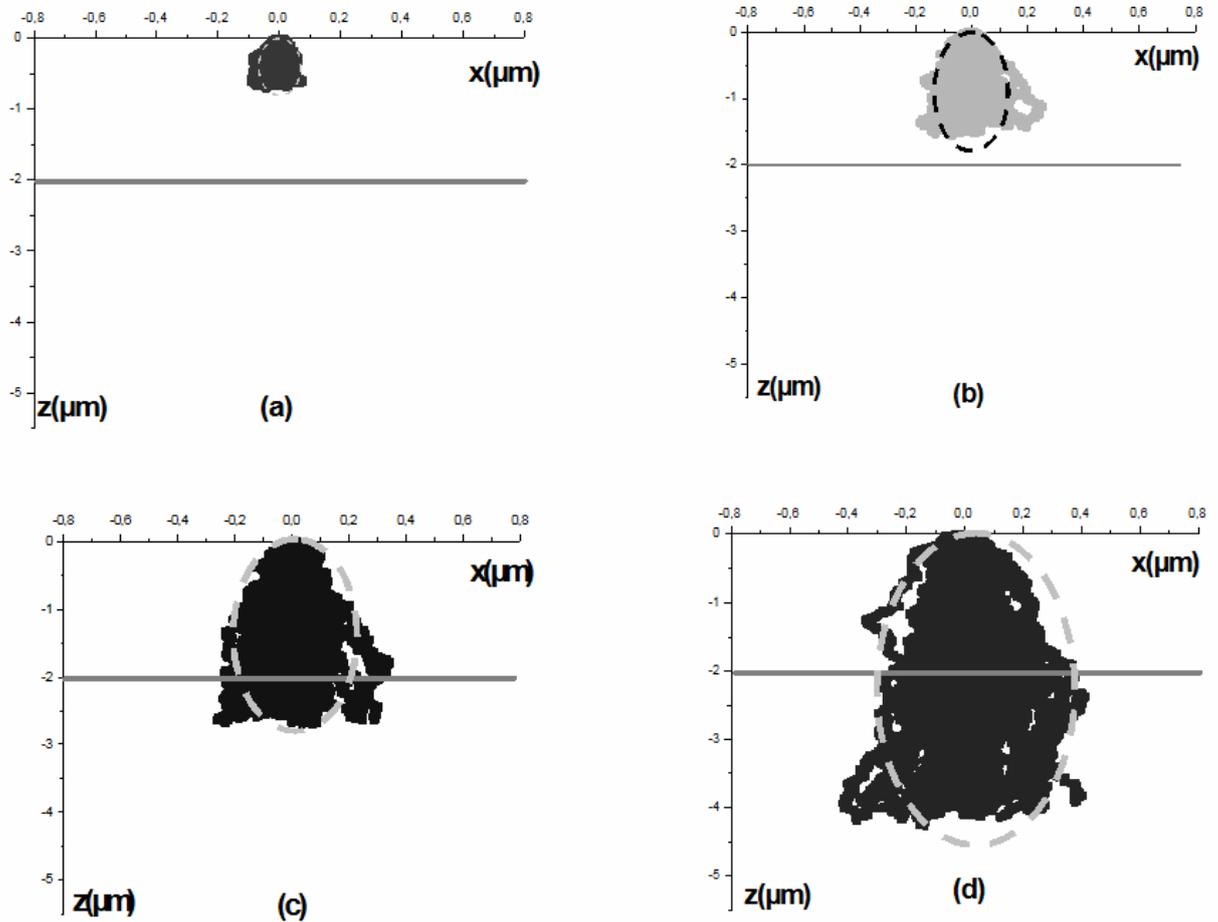


**Figure IV.2:** Les trajectoires des électrons pénétrants dans le AlAs/GaAs/AlAs pour  $E_0 = 25$  keV: (a) pour 5 électrons, (b) 10 électrons, (c) 15 électrons, (d) et 20 électrons.

A partir des **figures IV.1** et **IV.2** On remarque facilement que :

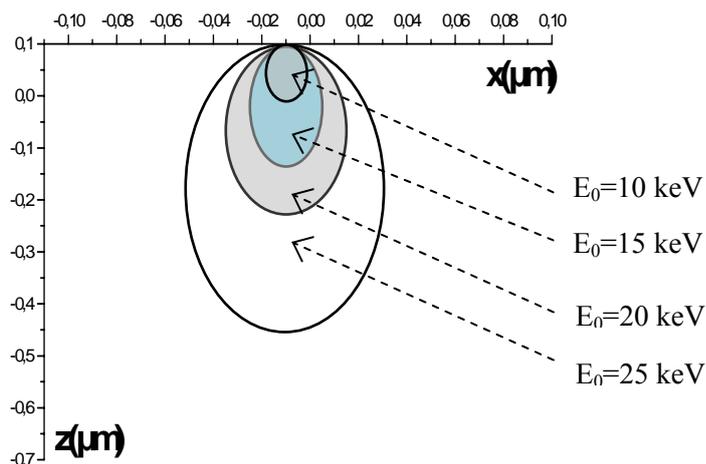
- La trajectoire de l'électron est aléatoire.
- La trajectoire dépend de l'énergie d'accélération des électrons.

### IV.3 Volume de génération :



**Figure IV.3:** Le volume de génération de 50 électrons pénétrants dans le  $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  pour : (a)  $E_0 = 10$  keV, (b)  $E_0 = 15$  keV, (c)  $E_0 = 20$  keV et  $E_0 = 25$  keV

On peut estimer que le volume de génération prend la forme d'une poire, qui est la forme la plus proche de notre modèle, car il n'y a pas assez de travaux qui peuvent bien préciser la forme correspondante d'une façon exacte (dans le cas des hétérostructures à puits quantique et les nanostructures).



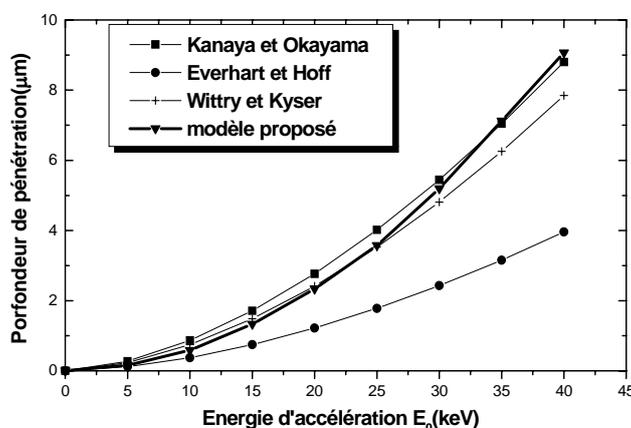
**Figure IV.4:** La poire de génération de 50 électrons pénétrants dans le  $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  pour :  $E_0 = 10, 15, 20$  et  $25$  keV

On remarque facilement que le volume de génération des électrons augmente avec l'énergie d'accélération du faisceau électronique.

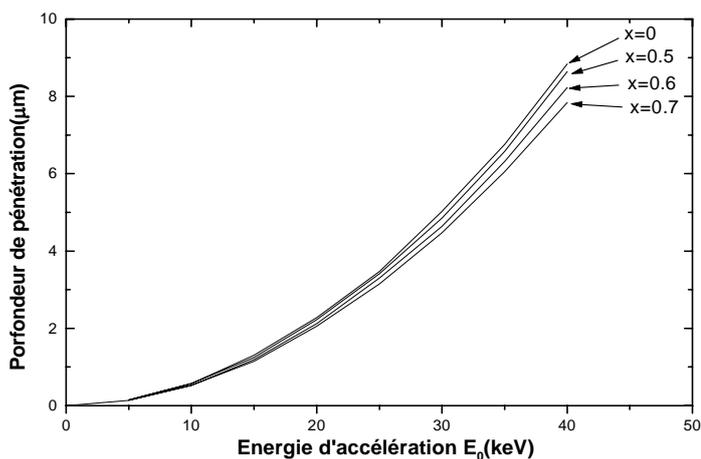
#### IV.4 La profondeur de pénétration :

##### IV.4.1 Profondeur de pénétration pour GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ :

Les figures IV.5.a et IV.5.b représentent la profondeur de pénétration calculée par notre modèle pour le *GaAs* et pour le *AlGaAs* respectivement. Dans le cas du *GaAs* on a fait une comparaison entre les profondeurs de pénétration trouvées par les modèles de Wittry et Kyser (relation (I.3)), Everhart et Hoff (relation (I.5)), et celui de Kanaya et Okayama (relation (I.6)). Notre modèle montre clairement que la profondeur de pénétration des électrons incidents croît en fonction de l'énergie d'accélération du faisceau incident.



**Figure IV.5.a:** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de  $E_0$  pour le GaAs.



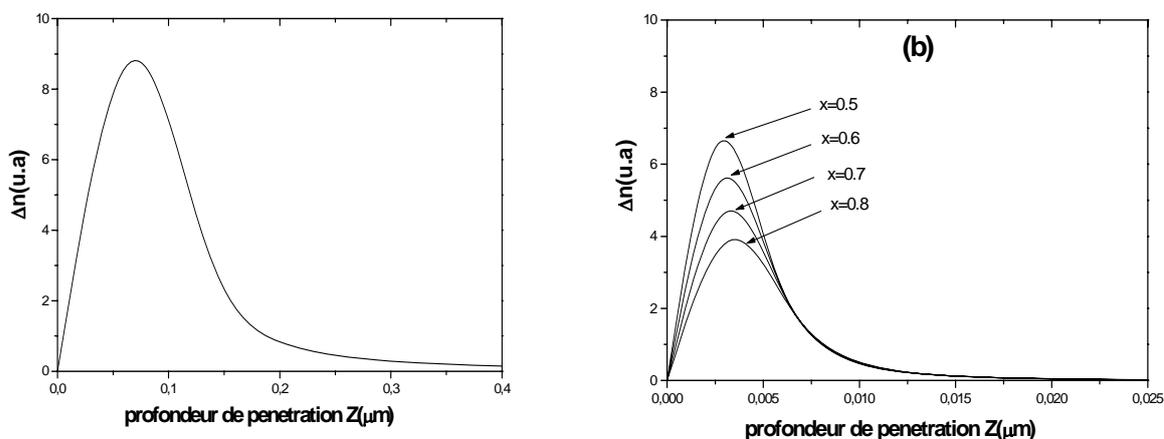
**Figure IV.5.b:** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de  $E_0$  d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Pour différentes valeurs de la fraction molaire  $X$ .

La **figure IV.5.b** montre pour l'échantillon d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  massive que la profondeur de pénétration des électrons dépend de la fraction molaire  $X$ , elle décroît avec l'augmentation de la fraction molaire  $X$  puisque l'énergie de la bande interdite  $E_g$  du matériau augmente.

## IV.5 Profil de distribution des porteurs en excès :

### IV.5.1 Profil de distribution pour GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ :

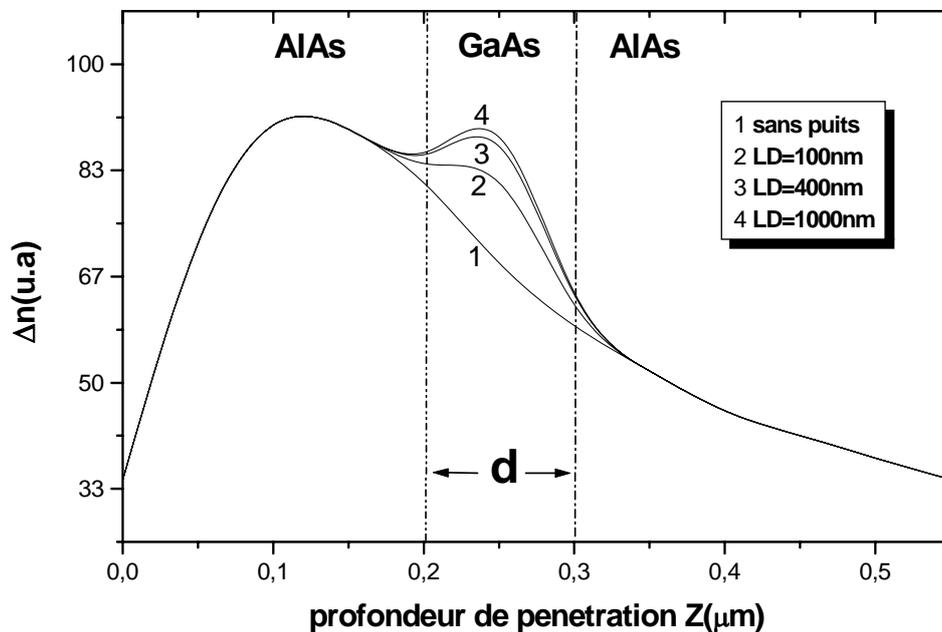
La variation des porteurs de charge minoritaire  $\Delta n(x)$  est aussi calculée et la **figure IV.6** montre la variation de  $\Delta n(x)$  en fonction de la profondeur. La forme générale de l'allure est Gaussienne et l'effet de la fraction molaire  $x$  est très claire, le taux des porteurs de charge minoritaires décroît quand le fraction molaire  $x$  augmente, puisque l'énergie de la bande interdite  $E_g$  du matériau augmente en fonction de la fraction molaire  $x$  (équation III-9).



**Figure IV.6:** Profil de distribution des porteurs en excès pour : (a) GaAs massive, (b)  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pour différentes valeurs de la fraction molaire  $x$ .  $E_0=10\text{keV}$ .

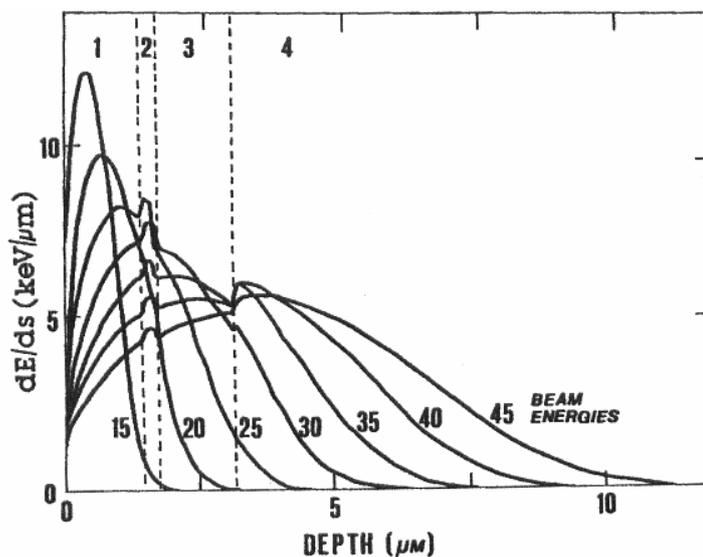
### IV.5.2 Profil de distribution des porteurs en excès pour AlAs/GaAs (Influence de la longueur de diffusion):

La **figure IV.7** montre le profil de distribution des porteurs en excès en fonction de la profondeur de pénétration pour l'hétérostructure à puits quantique *AlAs/GaAs/AlAs* ( $x=1$ ). Le calcul a été fait pour une largeur du puits quantique  $d=100$  nm, ainsi que pour quatre valeurs de longueur de diffusion  $L_D$  des porteurs en excès dans le puits quantique de GaAs. On remarque facilement qu'il y a une singularité dans la courbe de la **figure IV.7** dans la région du puits quantique de *GaAs*. Cette singularité est due au phénomène de confinement des électrons qui est traduit par une augmentation de concentration des porteurs en excès dans le puits quantique de GaAs, cette singularité augmente avec la longueur de diffusion, ce qui mène à une augmentation remarquable de la concentration des porteurs en excès ( $\Delta n$ ) dans la région du puits quantique. Les électrons diffusés sont les électrons localisés au voisinage du puits quantique parce qu'ils ont une grande probabilité de passer vers le puits, ce qui n'est pas le cas pour les électrons qui sont loin du puits quantique.



**Figure IV.7:** Profil de distribution des porteurs pour un puits quantique de 100nm et  $E_0=10$ keV.

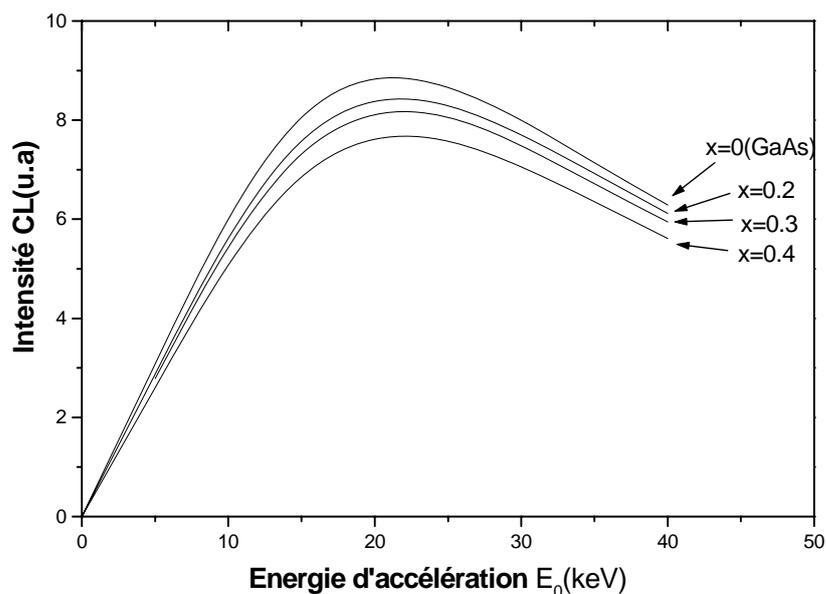
Pour justifier notre résultat, on peut présenter des travaux similaires qui ont été trouvés par [79] **figure IV.8**, On peut observer une anomalie au niveau de la cavité laser (région 2) et au niveau du substrat (région 4) à cause de l'effet du confinement électronique.



**Figure IV.8:** La dose d'énergie d'accélération ( $dE/ds$ ) en fonction de la profondeur pour une hétérostructure GaAlAs. région1-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As, région2-Ga<sub>0.95</sub>Al<sub>0.05</sub>As (cavité laser), région3-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As, region4-GaAs (substrat) [79].

## IV.6 Signal cathodoluminescence $I_{CL}$ :

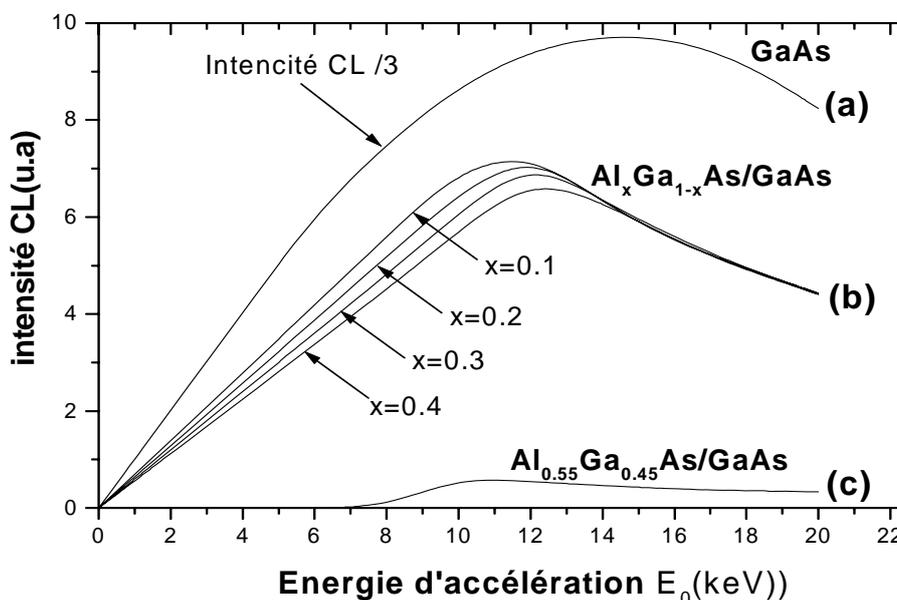
### IV.6.1 Signal cathodoluminescence $I_{CL}$ dans l' $Al_xGa_{1-x}As$ massive:



**Figure IV.9:** Signale cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération dans l' $Al_xGa_{1-x}As$  pour différentes valeurs de la fraction molaire  $x$

La **figure IV.9** montre la variation du signal CL en fonction de l'énergie d'accélération dans la structure massive d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $0 < x < 0.45$ ) dans ce cas la recombinaison des porteurs en excès est radiative dans l'échantillon. On peut remarquer que le signal décroît avec l'augmentation de  $x$  puisque la bande interdite (le Gap) du matériau devienne plus grande quand la fraction molaire  $x$  augmente, donc le nombre des paires (e-h) diminue et le  $I_{\text{CL}}$  décroît.

#### IV.6.2 Signal cathodoluminescence $I_{\text{CL}}$ dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ :



**Figure IV.10:**  $I_{\text{CL}}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  de: (a) GaAs, (b)  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  pour différentes valeurs de fraction molaire  $x$ , (c)  $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  pour un puits quantique (QW) de largeur  $d=30\text{nm}$ , barrière  $=0.5\mu\text{m}$ ,  $L_D=30\text{nm}$ .

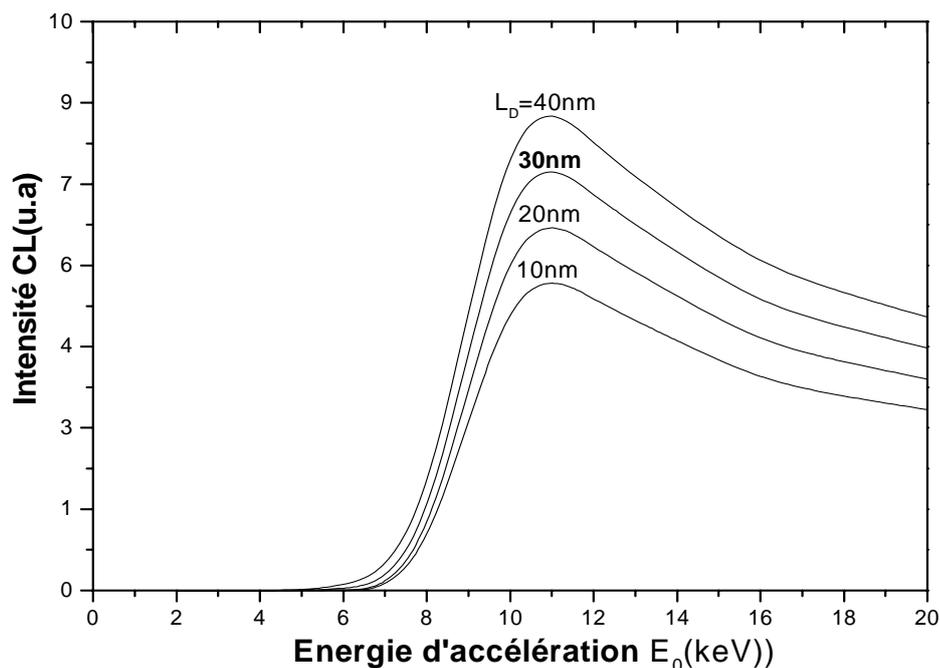
La forme générale des courbes  $I_{\text{CL}}(E_0)$  est similaire pour tous les modèles utilisés dans le cas d'un simple échantillon comme le cas de GaAs **figure IV.10.a**, l'allure présente en général un maximum, elle est déterminée par la génération et la recombinaison des porteurs à faible énergie d'accélération et par l'absorption des photons à hautes énergies d'accélération. (dans le cas de GaAs la recombinaison des porteurs en excès est toujours radiative).

Dans le cas d'une hétérostructure à puits quantique d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  où  $0 < x < 0.45$  comme il est montré dans la **figure IV.10.b** (cas où la recombinaison des porteurs en excès est radiative dans la barrière  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  comme le cas de GaAs), l'allure est presque similaire de celle de l'échantillon de GaAs massive, on peut voir l'influence de la fraction molaire  $x$  sur l'allure

dans la région de la barrière d' $Al_xGa_{1-x}As$  ( la couche1),en général l'intensité CL décroît quand la fraction molaire  $x$  croît.

Dans le cas d'une hétérostructure à puits quantique d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs$  ( dans ce cas la recombinaison des porteurs en excès sera non radiative) l'allure est différent de celle de  $GaAs$ , à cause de la recombinaison non radiative dans les deux régions d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$ ( la couche 1, en principe, on va avoir un signal cathodoluminescence dans la région de  $GaAs$  seulement, mais en réalité, il y a un signal CL à côté du puits quantique, à cause du phénomène de diffusion des porteurs de la barrière d'  $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  vers le puits de  $GaAs$ . Donc l'intensité de la cathodoluminescence sera nulle (pour  $0 < E_0 < 7$  keV) à l'exception des électrons qui sont situés près du puits quantique ces porteurs, ont une probabilité élevée pour passer vers le puits quantique de  $GaAs$  où ils se recombinaient d'une façon radiative et l'intensité CL sera considérable.

#### IV.6.3 Influence de la longueur de diffusion $L_D$ dans l' $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ :



**Figure IV.11:** CL signal en fonction de l'énergie d'accélération pour différents valeurs de la longueur de diffusion  $L_D$  pour le  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  ( $x=0.55$ , barrière= $0.5 \mu m$ ,  $QW=30$  nm).

La figure IV.11 montre qu'il n'y a pas de signal CL dans la première couche d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  qui est avant le puits quantique de  $GaAs$  pour les faibles énergies d'accélération puisque la recombinaison des électrons dans cette couche est non radiative ( $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  possède un gap indirect).

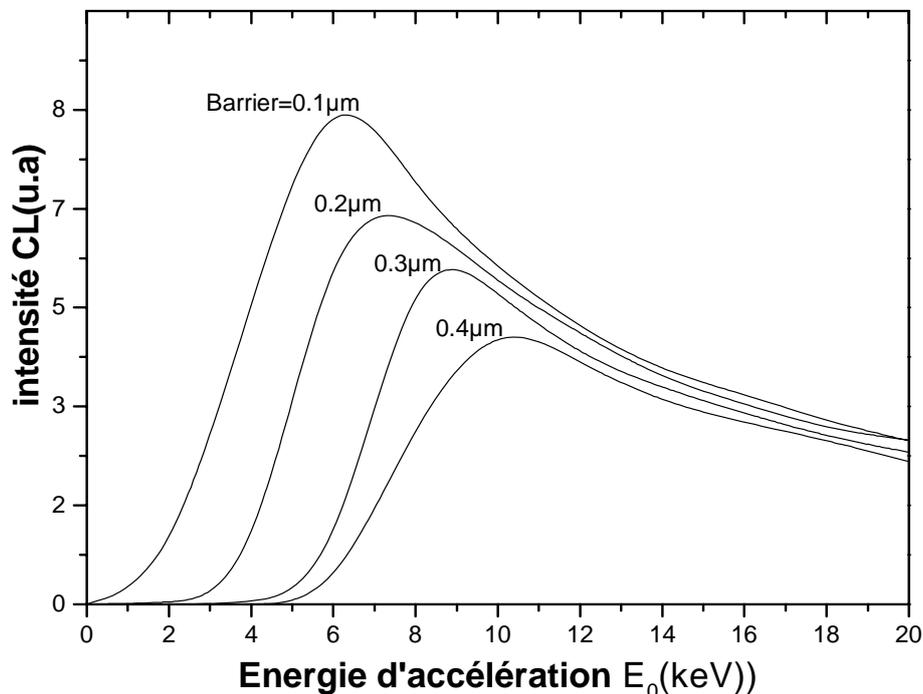
Le signal CL croit avec l'augmentation de la longueur de diffusion  $L_D$  dans les régions les plus proche du puits quantique de *GaAs* puisque les paires électrons trous générés dans ces régions ont la possibilité de diffuser vers la couche 1 d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  jusqu'au puits quantique de *GaAs* où ils se recombinent d'une façon radiative, on peut remarquer l'augmentation de l'allure du signale à partir de la valeur  $E_0=7$  keV.

Dans la région du puits quantique ( $E_0=10$  keV) l'allure représente un maximum puisque tous les pairs-électrons trous se recombinent d'une façon radiative.

Comme la dimension du puits quantique est très faible ( $d=30$ nm) par rapport à la couche 1 et la couche 3 (substrat) donc après la valeur de  $E_0=10$  keV l'allure du signal décroît puisque on est dans la couche 3 qui est de type  $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  donc la recombinaison est non radiative à l'exception des pairs électrons-trous qui sont situés près du puits quantique, ces électrons peuvent se recombiner radiativement dans le puits de *GaAs* par l'effet de diffusion électronique dans ce dernier.

La diffusion des paires électrons trous se fait selon l'équation :  $\Delta n_{(QW)} = \Delta n_{(Barrier)} e^{-\frac{x}{L_d}}$

#### IV.6.4 Influence de l'épaisseur de la barrière de potentiel dans l' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs$ :



**Figure IV.12:** Le signal CL en fonction de l'énergie d'accélération pour différents épaisseur de barrière (couche 1). ( $x=0.55$ ,  $d=40$ nm,  $L_D=30$ nm).

L'échantillon utilisé dans ce cas est toujours l'hétérostructure à un seul puits quantique  $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs / Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  (la couche1, le puits quantique et substrat) la largeur du puits quantique est  $d=40nm$ . Pour bien déterminer l'influence de la barrière d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  (la couche 1) sur l'allure du signal CL on a calculé le signal CL pour quatre valeurs différentes de l'épaisseur de la barrière (0.1, 0.2, 0.3 et  $0.4\mu m$ ).

La **figure IV.12** montre que dans les grandes valeurs de la barrière du potentiel d' $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$  (la couche1) il n'y a pas de signal CL à cause de la recombinaison non radiative dans cette région, donc les électrons générés n'ont pas la possibilité d'attendre le puits quantique par l'effet de diffusion puisque la barrière dans ce cas est un peu large et la recombinaison est toujours non radiative dans cette couche comme il est montré dans la **figure IV.12** pour la barrière de  $0.4 \mu m$ .

Dans le cas de faible épaisseur de la barrière de potentiel ( $0.1 \mu m$ ) le signal CL est considérable pour les faibles énergies d'accélération puisque la plus part des électrons générés dans la zone de la barrière peuvent atteindre le puits quantique par l'effet de diffusion électronique où ils se recombinent d'une façon radiative.

En général, la courbe représente toujours un maximum dans la région du puits quantique, et l'influence de l'épaisseur de la barrière est très claire dans les faibles énergies d'accélération, où l'allure du signal décroît avec l'augmentation de la barrière.

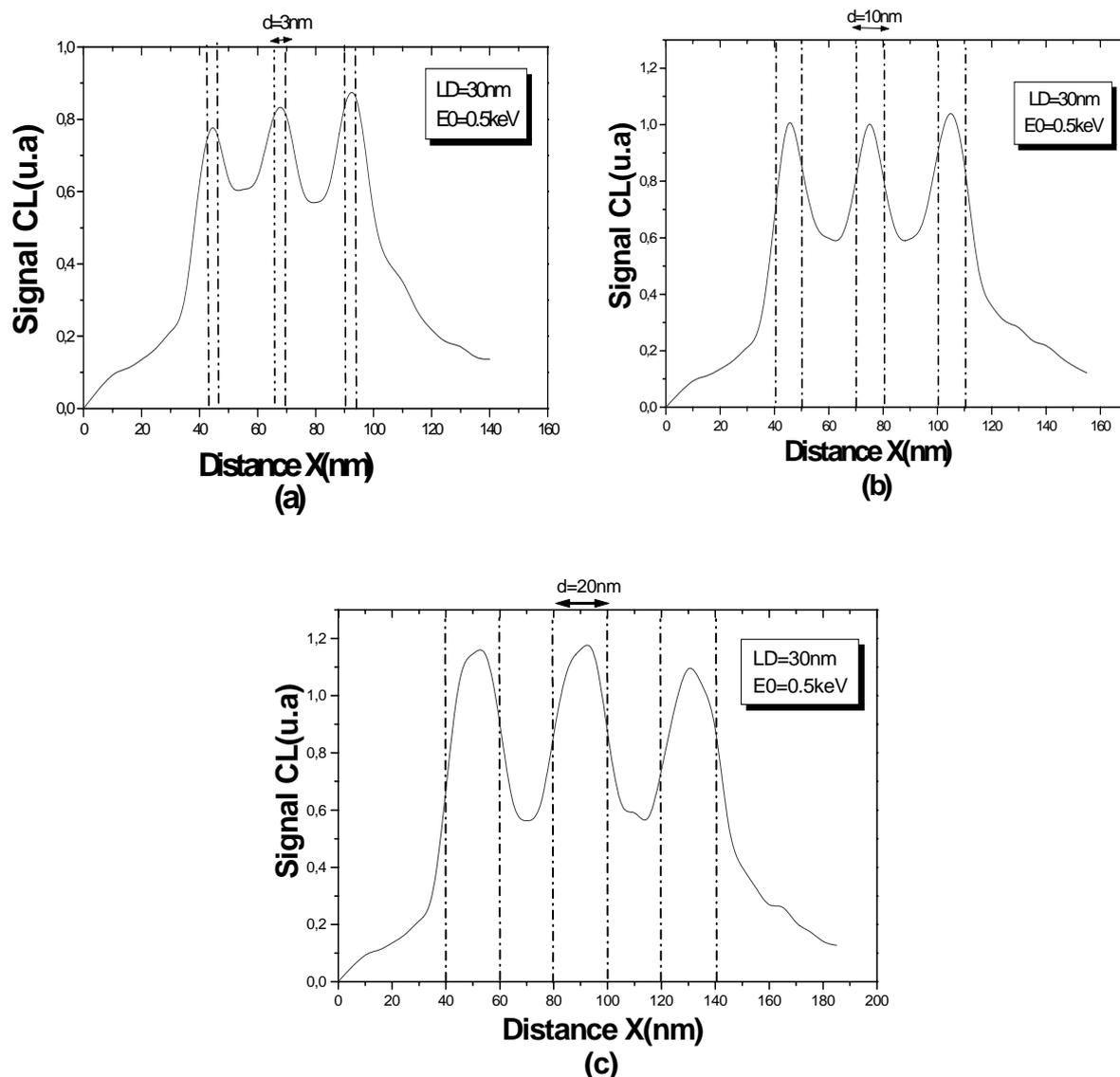
Dans le cas des hautes énergies d'accélération il n'y a pas une grande influence de la barrière (substrat) puisque la recombinaison des électrons est non radiative.

#### **IV.7 Signal CL dans une hétérostructure $Al_{0.55}Ga_{0.45}As/GaAs$ parallèle au faisceau :**

Dans la deuxième partie de ce travail on a calculé le signal CL dans une hétérostructure à multipuits quantiques d' $AlGaAs/GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs$  parallèle par rapport au faisceau électronique. Le signal CL est calculé pour différentes largeurs du puits  $d$  de GaAs et des barrières de potentiels ( $Al_{0.55}Ga_{0.45}As$ ), ainsi que pour différentes valeurs de diffusion  $L_D$  et de différentes énergies d'accélération  $E_0$ .

##### **IV.7.1 Influence de largeur du puits quantique:**

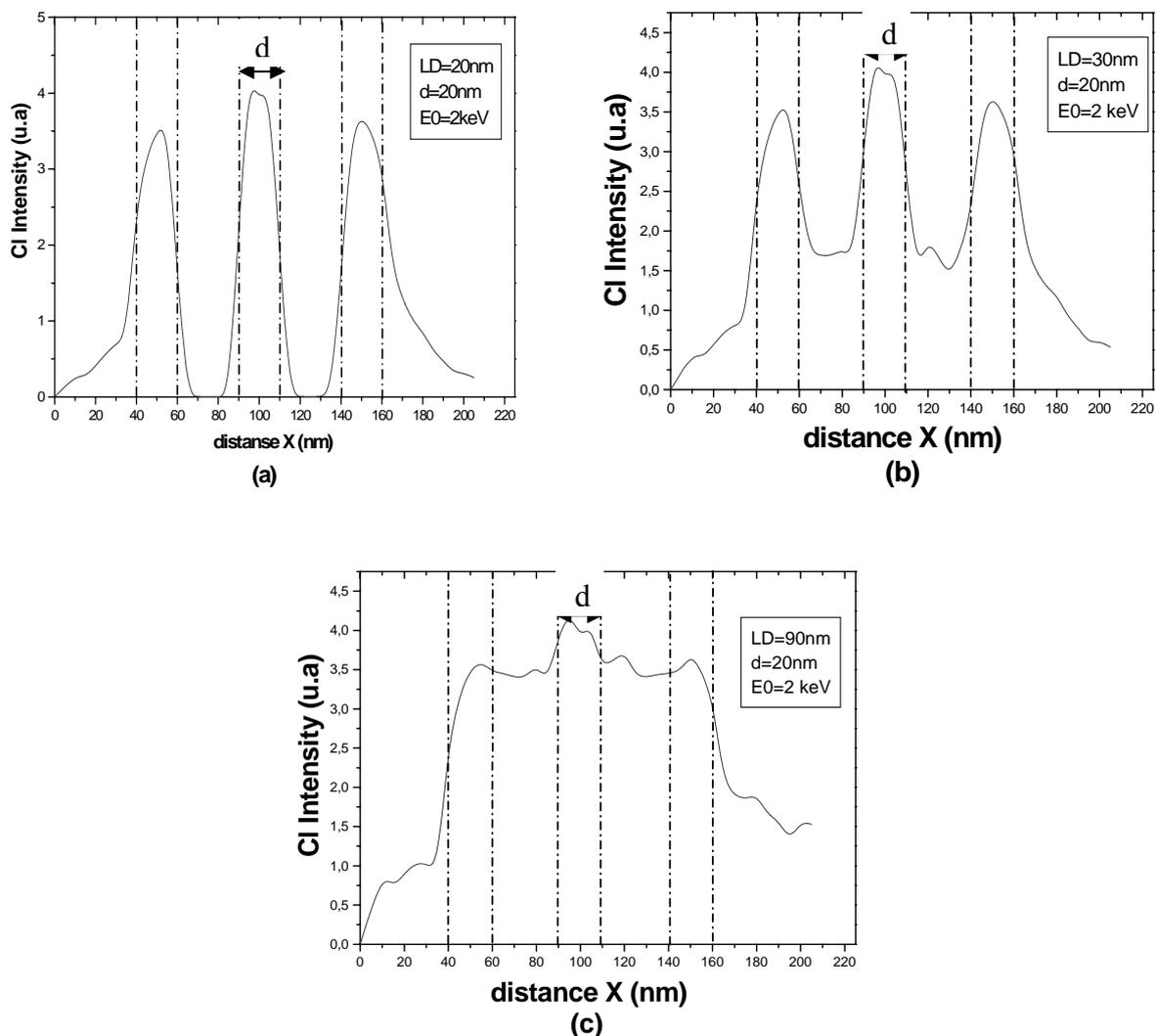
En ce qui concerne l'influence de l'épaisseur des puits quantique  $d$  sur l'allure des signaux CL (la résolution en mode image cathodoluminescence) on peut dire, malgré la faible épaisseur  $d$  des puits et des barrières, ils sont bien distingués et les trois pics des puits sont résolus, donc on a un bon contraste (en mode d'image).



**Figure IV.13:** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance  $x$  de l'hétérostructure d' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}$  pour :  
 (a)  $d = 03\text{nm}$  de largeur de puits quantiques.  
 (b)  $d = 10\text{nm}$  de largeur des puits quantiques.  
 (c)  $d = 20\text{nm}$  de largeur des puits quantiques.

#### IV.7.2 Influence de longueur de diffusion :

Un des paramètres le plus important c'est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L_D$ , qui joue un rôle très important dans l'étude d'hétérostructures à multipuits quantiques et à l'intensité CL, dans la **figure IV.14.a.b.c** nous avons vu l'influence de ce paramètre sur l'intensité CL.



**Figure IV.14:** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance  $x$  de l'hétérostructure d' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}$  pour : (a)  $L_D=20\text{nm}$ , (b)  $L_D=30\text{nm}$ , (c)  $L_D=90\text{nm}$ .

Pour les faibles valeurs de  $L_D=20\text{nm}$  (**figure IV.14.a**) on peut remarquer que les trois pics des puits quantiques sont bien distingués. Donc on a une bonne résolution, on peut expliquer ça par la suite : quand la longueur de diffusion  $L_D$  est faible donc la diffusion des porteurs en excès est aussi faible (la diffusion des porteurs se fait de la région de  $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}$  vers les puits de GaAs où la recombinaison est radiative) donc l'intensité du signal CL sera nulle dans les régions d' $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}$  (les barrière de potentiels) et presque nulle au voisinage des puits quantiques et forte au niveau des puits, ce qui nous donne une bonne résolution en image CL des puits quantiques et des barrières de potentiels.

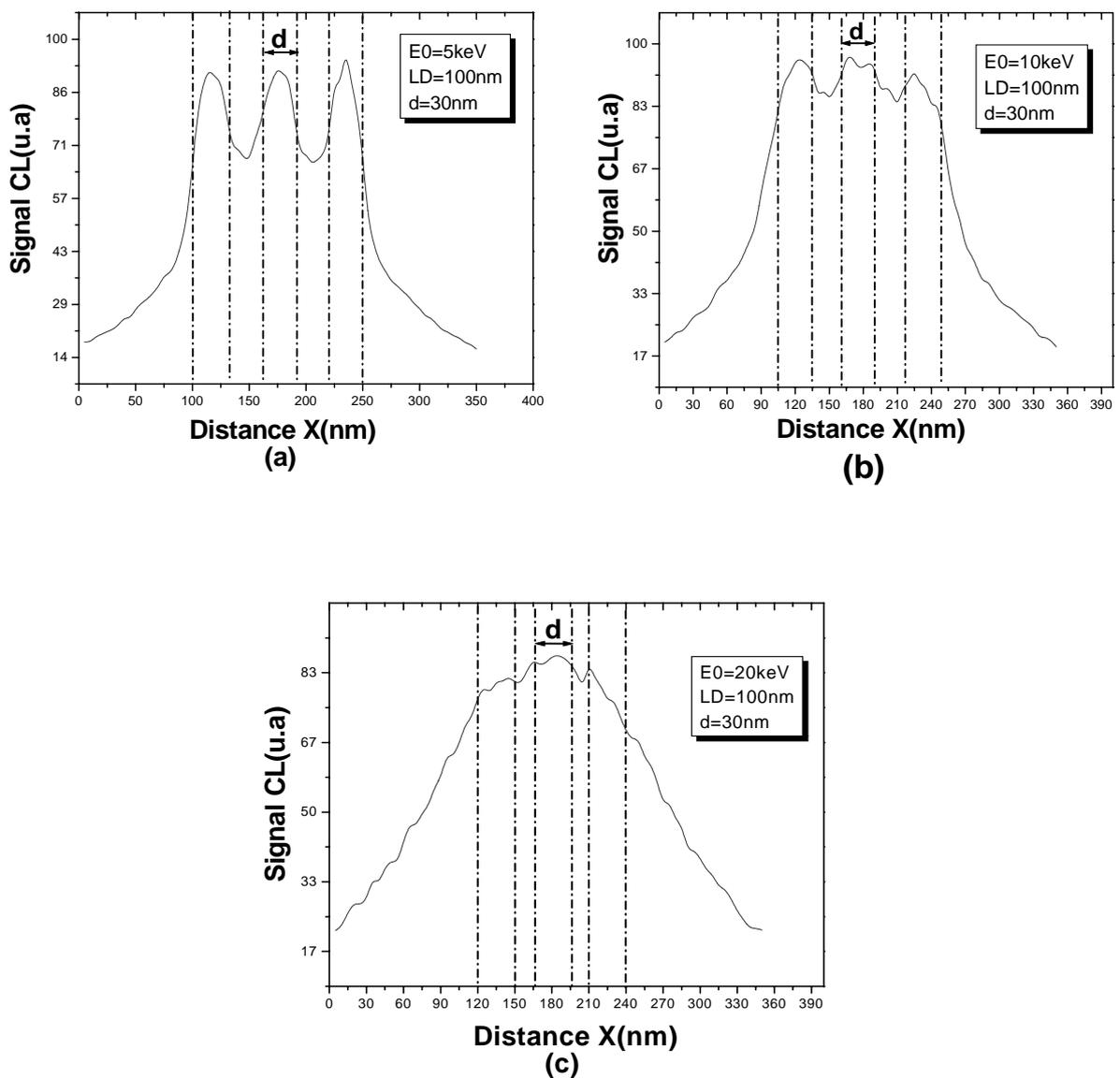
Quand  $L_D$  augmente ( $L_D=30\text{nm}$ , **figure IV.14.b**) un nombre plus grand des porteurs en excès, qui sont situés au voisinage des puits, diffusent dans ces derniers et ils sont recombinés d'une façon radiative, ce qui traduit par un signal CL quand même important dans les cotés des puits

quantiques de GaAs. Donc on a un phénomène de chevauchement des pics dus à la diffusion des porteurs minoritaires, donc le contraste de l'image est assez bien par rapport à la **figure IV.14.a**.

Quand  $L_D$  augmente encore ( $L_D=90\text{nm}$ , **figure IV.14.c**), dans ce cas, il y a un chevauchement total des raies du signal CL (image floue).

### IV.7.3 Influence de l'énergie d'accélération:

Un autre paramètre aussi important, c'est l'énergie d'accélération des électrons incidents  $E_0$ , le signal est calculé pour trois valeurs d'énergie  $E_0$ :

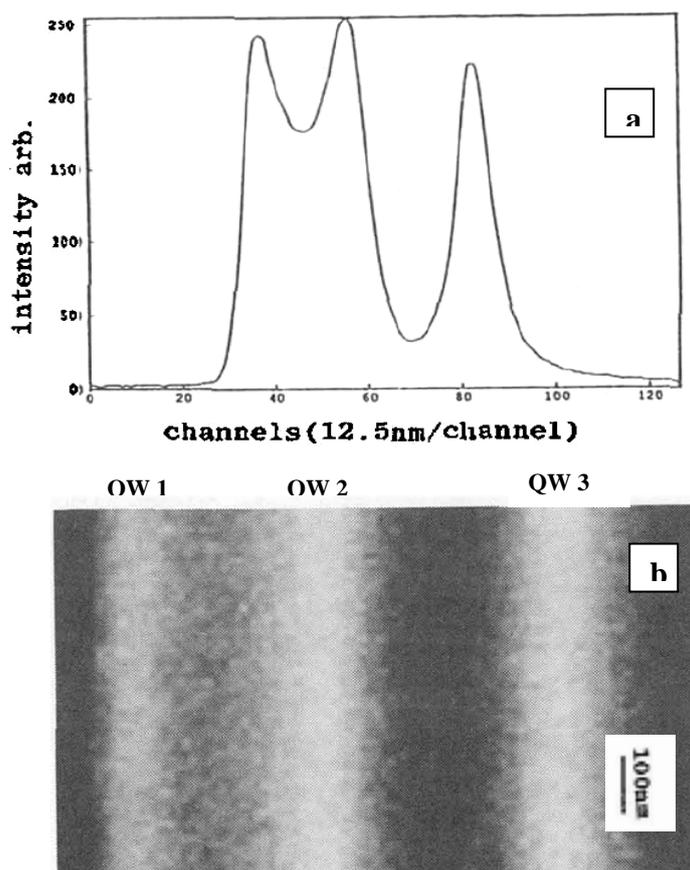


**Figure IV.15:** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de la distance  $x$  de l'échantillon pour : (a)  $E_0=5\text{keV}$ , (b)  $E_0=10\text{keV}$ , (c)  $E_0=20\text{keV}$ .

Lorsque l'énergie d'accélération est faible  $E_0=5\text{keV}$ , on peut distinguer trois pics correspondants au trois puits quantiques. La bonne correspondance est due à la faible valeur de l'énergie utilisée, **figure IV.15.a**.

Quand on utilise une énergie faible donc nous avons créé un petit volume de génération à l'intérieur de l'échantillon, et lorsque ce volume est petit (de l'ordre de l'épaisseur des dimensions des puits quantiques) donc il couvre des petites zones ce qu'il permet de bien distinguer les puits et les barrières de potentiel.

Lorsque l'énergie d'accélération augmente  $E_0= 10$  et  $20$  keV (**figure. IV.15.b,c**), le volume de génération augmente encore (il devient plus grand par rapport aux dimensions des puits quantiques) donc il couvre une large zone qui appartient à tous les puits de GaAs et les barrières d'AlGaAs, dans ce cas, on ne peut pas distinguer les pics, et on a un chevauchement total des pics de l'intensité CL dans le cas de  $E_0=20$  keV (figure. IV.15.c).

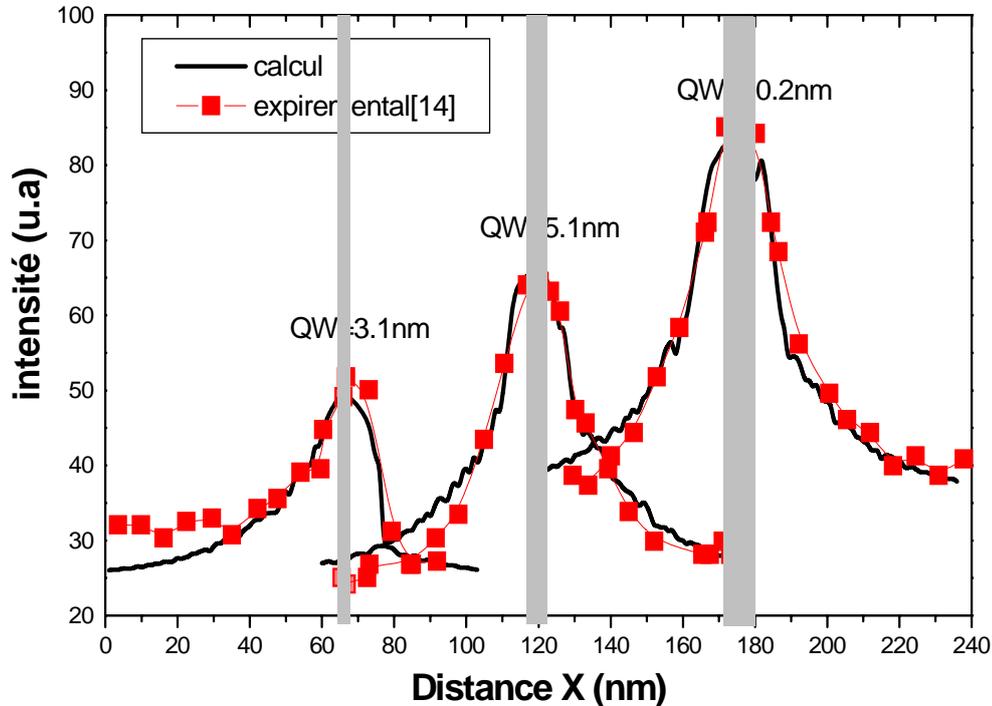


**Figure IV.16.a.b** signal cathodoluminescence d' $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}/\text{GaAs}$  à trois puits quantiques QW1,QW2 et QW3, ( $V_0=100\text{kV}$ )[83].

La **figure IV.16.a.b** montre des résultats expérimentaux similaire à celles de nos résultats de calculs d'une hétérostructure d' $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}/\text{GaAs}$  à trois puits quantiques de GaAs.

#### IV.7.4 Comparaison avec l'expérimental:

##### IV.7.4.1 Simulation de l'intensité d' $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ à puits quantique:



**Figure IV.17:** l'intensité de signal en fonction de la distance X : comparaison des résultats de simulation avec ceux de l'expérience pour une hétérostructure d' $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  à trois puits quantiques.  $E_0=2.1\text{kV}$ ,  $L_D=60\text{nm}$ .

La **figure IV.17** montre une comparaison entre notre modèle de calcul et les résultats expérimentaux des courbes d'intensité des trois puits quantiques de type  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  pour différentes largeurs de puits quantiques ( $d=3.1, 5.1, 10.2\text{ nm}$ ) en fonction de la distance X. Nous pouvons observer que nos calculs sont en accord avec les résultats expérimentaux. On peut calculer la valeur expérimentale de  $L_D$ , en utilisant la diffusion des porteurs minoritaires vers le puits quantique où l'intensité du signal CL au voisinage du puits est donnée par la relation [82]:

$$I_{QW} \propto I_{\max} \exp(-x/L_D)$$

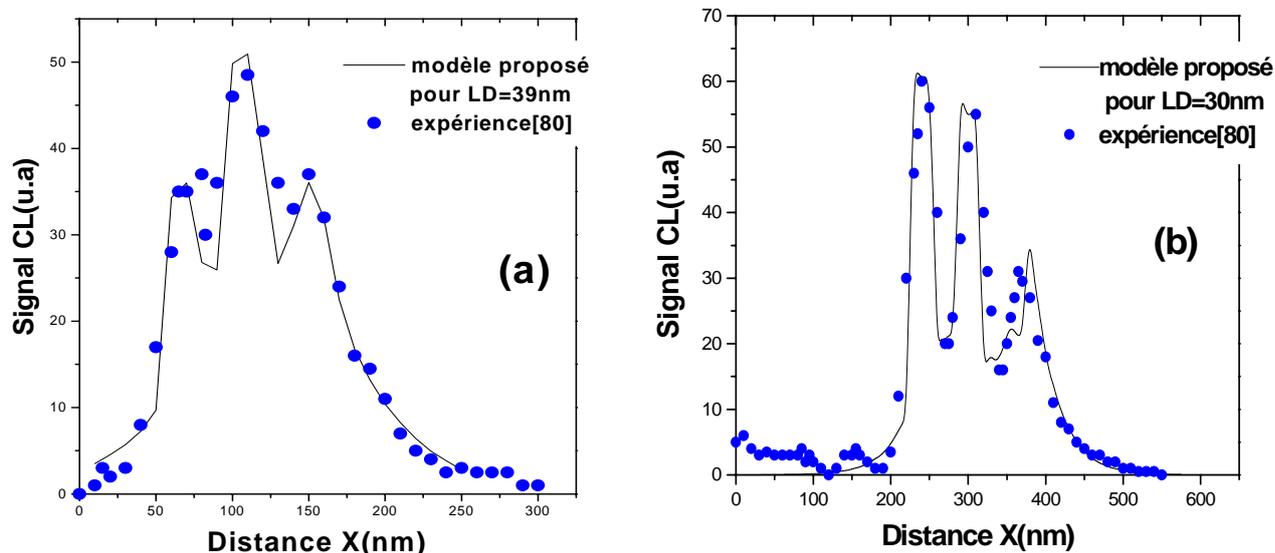
$I_{QW}$ : l'intensité du signal dans le puits quantique

On a donc:

$$\log(I_{QW}) = -\frac{1}{L_D}x + \log(I_{\max}) \quad (\text{IV-1})$$

(IV.1) est une équation simple d'une droite, à partir de la pente on peut déduire la valeur expérimentale de longueur de diffusion  $L_D$ , pour la **figure IV.17**,  $L_D = 58$  nm. Cette valeur est comparable avec celle obtenue par notre modèle de simulation:  $L_D = 60$  nm.

#### IV.7.4.2 Simulation de l'intensité de AlAs/GaAs/GaAlAs multipuits quantiques:



**Figure IV.18 :** L'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de distance X : Comparaison des résultats obtenus par simulation avec ceux de l'expérience pour une hétérostructure de AlAs/GaAs/ GaAlAs à trois puits quantiques. (a)  $E_0 = 1.5$  keV et  $d = 20$  nm, (b)  $E_0 = 1.5$  kV et  $d = 30$  nm.

La **figure IV.18** montre une deuxième comparaison entre notre modèle de calcul et les résultats expérimentaux des pics d'intensité des puits quantiques de type AlAs/GaAs/AlGaAs [80] ( $d = 20$  pour la **figure IV.18 (a)** et  $d = 30$  nm pour la **figure IV.18 (b)** en fonction de la distance X.

Pour la **figure IV.18 (a)**  $L_D = 46$  nm, et pour la **figure IV.18 (b)**.  $L_D = 40$  nm. Ces valeurs sont comparables avec celles obtenues par notre modèle de simulation:  $L_D = 39$  nm et  $L_D = 30$  nm respectivement.

Concernent la hauteur des pics du signal dans les deux **figures IV.18 (a)** et **(b)** On peut remarquer que les pics n'ont pas la même valeur de signal CL. Cet effet peut être dû au phénomène de l'interdiffusion des atomes au sein d'hétérostructure [81].

## IV.8 Conclusion :

Dans ce chapitre:

- La profondeur de pénétration des électrons et la trajectoire des électrons ont été calculées dans le *GaAs* et *GaAlAs* massive et aussi pour l'*AlGaAs/GaAs* à puits quantiques avec une comparaison aux autres modèles.
- La distribution des porteurs en excès est aussi calculée pour le *GaAs* massive et pour l'hétérostructure *AlAs/GaAs*, pour trois valeurs de longueurs de diffusion  $L_D$ . L'allure générale prend la forme gaussienne avec une singularité due au phénomène de confinement des porteurs en excès dans le puits quantique de *GaAs*.
- Le signal CL a été calculé dans une hétérostructure à puits quantique et dans une hétérostructure à multipuits quantiques d' $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  dans le but est de déterminer les paramètres physiques responsables de la résolution de l'imagerie en mode cathodoluminescence tels que la longueur de diffusion  $L_D$  l'épaisseur de la barrière et des puits quantiques  $d$  et l'énergie d'accélération  $E_0$ .
- Enfin, une comparaison des résultats du signal CL a été faite avec l'expérience ce qui nous a permis de déterminer la longueur de diffusion  $L_D$ .

## **Conclusion générale**

## Conclusion générale

Les problèmes posés dans la caractérisation des nanostructures sont divisés en deux axes, le premier concerne les outils expérimentaux, tandis que le deuxième s'intéresse à la simulation et les approches théoriques proposées pour comprendre les résultats expérimentaux d'une part, et de chercher les paramètres qui rentrent en jeu d'autre part. Les modèles analytiques existants jusqu'à présent ne peuvent pas traiter les cas des multicouches, parce que les structures et les propriétés physiques changent au fur et à mesure de la diffusion des électrons dans le matériau. Donc, il ne reste que les modèles numériques pour traiter les hétérostructures.

Ce travail a été consacré à modéliser l'hétérostructures de la famille III-V comme par exemple  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), qui est utilisée dans le domaine d'optoélectronique (la diode laser), lors de sa caractérisation par des méthodes basées sur l'interaction électron-matière telle que la technique cathodoluminescence. Comme la diffusion des électrons dans le solide est stochastique, la méthode de calcul proposée a été Monte Carlo. Le problème posé dans la microscopie cathodoluminescence est la mauvaise résolution de l'image lors de l'étude des nanostructures (puits quantique, point quantique, nano agrégat...). Dans ce travail on a étudié les paramètres responsables de la variation de signal CL et même la résolution de l'image.

Le modèle qui a été réalisé, en utilisant le langage Fortran, est détaillé dans le troisième chapitre, le principe physique est simple : l'électron incident pénètre dans le matériau avec une énergie d'accélération  $E_0$ , et il va perdre son énergie par des collisions aléatoires avec les atomes du matériau, après chaque collision une paire électron-trou est créée. A la fin du trajet on calcule la profondeur de pénétration, la distribution des porteurs en excès et le signal CL des porteurs minoritaire après la recombinaison radiative dans les couches de GaAs.

Le quatrième chapitre résume les résultats de calcul obtenus par notre modèle.

La trajectoire électronique, le volume de génération, ainsi que la profondeur de pénétration est calculée par notre modèle pour le GaAs massif et l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  à puits quantique ainsi que l'influence de la fraction molaire  $x$  qui a été étudiée.

Concernant la distribution des porteurs en excès (le profil de distribution) a été calculé dans le cas de GaAs/AlAs et le  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , l'effet de la fraction molaire  $x$  est bien claire, le calcul est fait pour quatre valeurs de la fraction molaire  $x$ . L'allure générale est similaire à la

forme gaussienne dans la région de puits quantique due au phénomène de confinement des électrons dans le puits quantique de GaAs.

Le signal cathodoluminescence (CL) a été calculé pour le cas d'une hétérostructure d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  à un seul puits quantique perpendiculaire au faisceau électronique, ainsi que pour une hétérostructure à multipuits trois puits quantiques parallèles d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , le signal a été calculé en fonction des paramètres qui sont responsables de la variation du signal CL et de la résolution de l'image CL, comme la longueur de diffusion  $L_D$ , l'énergie d'accélération  $E_0$ , la largeur des multicouches nanométriques  $d$  et la fraction molaire  $x$ .

La bonne accord de ce modèle avec les résultats expérimentaux montre la fiabilité de ce calcul et permet de déterminer quelques paramètres, tels que la longueur de diffusion, et les dimensions des couches, et par conséquent, l'optimisation de ces paramètres pour avoir une bonne résolution des images en mode cathodoluminescence, ce modèle numérique proposé peut être utilisé avec succès pour étudier des nanostructures en simulant les techniques de caractérisation basées sur l'interaction électron-matière telle que la technique cathodoluminescence.

# Références

## Références:

- [1] R.Castagne, J.P .Duchemin, M.Gloannec, Ch .Rumelhard , Circuits Intégrés en Arseniure de Gallium, Collection technique et scientifique des télécommunications, Masson, 1989.
- [2] J.L, Pankove, Optical processes in semiconductors, Dover publications Inc, 1971.
- [3] O. Krebs and P. Voisin, Phys. Rev. Lett. 77, 1829 ,1996.
- [4] T.N.QUANG, Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport, thèse de doctorat, l'Ecole polytechnique(France), p8, 2006.
- [5] S. Rumyantsev, M. Shur ,Semiconductor parameters, Volume II Ternary and quaternary III-V compounds, Édité : M Levinshtein, (Ioffe Institute) ,1998.
- [6] R. KHLIL, Étude d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans des hétérostructures AlGaAs/GaAs par des mesures courant-tension et bruit basses fréquences en température,thèse de doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne,France, p46,2005
- [7] D. E. Aspnes, GaAs lower conduction-band minima: Ordering and properties. Phys. Rev. B. 14, pp. 5331–5343, 1976.
- [8] R. L. Anderson, Experiments on Ge-GaAs heterojunctions,Solid-State Electronics. 5 (5), pp. 341-344, 1962.
- [9] A. Lanacer, Etude des propriétés optiques de puits quantiques contraints ultra-minces d'InAs/InP, thèse de doctorat, p5-8, Université de Montréal, 2006.
- [10] C.et H. Ngô, Introduction à la physique des semi-conducteurs, P215, Dunod, 1998.
- [11] L. Esaki et R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61 ,1970 .
- [12] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard et W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett.33, 655,1978.
- [13] B. Mombelli, Processus optique dans les solides, p.62-65, MASSON, 1995.
- [14] M. D.Ventra, S. Evoy, J. R. Heflin, Jr, Introduction to Nanoscale Science and Technology, eddition : KLUWER ACADEMIC PUBLISHERS Boston, p201, 2004.
- [15] P. Bhattacharya, Propreties of III-V Quantum Wells and, Superlattices, p.3.26.38.66, London, 1996.
- [16] Q.T. Nguyen, Rapport de stage du DEA Physique des Solides, Ecole Polytechnique Palaiseau, 2003.
- [17] S. Cortez, Thèse de doctorat de l'Université Paris VI ,2001.
- [18] E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and U. Rössler, Phys. Rev. B 54, 5852 ,1996.
- [19] E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and P. Voisin, Phys. Solid. State 40, 1748,1998.

- [20] J.M.Bonard, étude par microscopie électronique des propriétés structurales et optiques de laser à semiconducteur, thèse de doctorat, école polytechnique fédérale de Lausanne, 1996.
- [21] L.Becerra, Thèse de doctorat, Hétérostructures et Dispositifs Microélectroniques à Base d'Oxydes High-k Préparés sur Silicium par EJM, L'Ecole Central de Lyon, France, p31, 2008.
- [22] M.Kostrzewa, Thèse de doctorat, Ecole Central de Lyon, France, 2003.
- [23] J.H. Van Der Werve, J. Woltersdorf et W.A. Jesser, "Low energy dislocation structures in epitaxy", Mat. Sci. Eng. 81, 1, 1986.
- [24] D.K. Ferry, S.M. Goodnick. Transport in Nanostructures. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [25] R. Dingle, H.L. Stormer, A.C. Gossard, W. Weigmann, Appl. Phys. Lett. 33, 665 1978.
- [26] S. SASSINE, Transport électronique contrôlé par micro-ondes dans des microstructures asymétriques : Effet ratchet mésoscopique, Thèse de doctorat, Université de Toulouse, p125-127, 2007.
- [27] I.Noirt, Contribution à la réalisation de microrésonateurs sur fibre optique de silice par faisceau d'électrons piloté en vue d'une application au multiplexage en longueur d'onde, Université de Limoges, p43, 2003.
- [28] J.P. Eberhart, "Analyse structurale et chimique des matériaux", Editions Dunod, 1997.
- [29] C. Le Gressus, "Microscopie électronique à balayage", Techniques de l'ingénieur, p1, p. 865 (1-18), 1985.
- [30] P. Trebbia, "Microanalyse quantitative par spectroscopie des pertes d'énergie", Microscopie électronique en Sciences des matériaux. Ecole d'été du CNRS, Bombanes, 1981.
- [31] M. Inokuti, Rev. Mod. Phys., 43, p. 297, 1971.
- [32] P. Mazières, "The theory of quantum liquids", Benjamin, 1966.
- [33] D. Pines, "Elementary excitations in solids", Benjamin, 1964.
- [34] N. Boisset, "La formation de l'image dans un microscope électronique", Cours de DEA, Universités Paris 6 et 7, Laboratoire de Minéralogie Cristallographie Paris.
- [35] E. Viccario, "Pratique de la microscopie électronique à balayage", Les éditions de la physique, Al, 1985.
- [36] J. Shakya, "Scanning Electron Microscope (SEM) and Energy Dispersive X-ray Spectrometer (EDX)", a project of " Learning Technology " for " Nano Science and Technology " class, Spring, KSU, 2001.
- [37] G. B. Hocker, "Modes in diffused optical waveguides of arbitrary index profile", IEEE Journal of quantum electronics, QE-11, 6, p. 270-276, 1975.

- [38] P.J. Potts, "A Handbook of Silicate Rock Analysis", Blackie : Glasgow, 1987.
- [39] M. Troyon, "Canon à électrons et illumination de l'échantillon", Microscopie électronique en sciences des matériaux, Ecole d'été du CNRS, Bombanes, 1981.
- [40] S.Fakhfakh, Etude des phénomènes de charge des matériaux diélectriques soumis à une irradiation électronique permanente, Thèse de Doctorat de l'Université de Reims Champagne-Ardenne, France, p12, 2004.
- [41] P. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, edited by M. Cardona and G. Guntherodt (Springer), 1996.
- [42] B. G. Yacobi and D. B. Holt, J. Appl. Phys., Vol. 59, No. 4, R1, 1986
- [43] D. F. Kyser, Proc. 6th Int. Conf. On X-ray Optics and Microanalysis, 147, 1971.
- [44] K. Kanaya and S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 5, 43, 1972.
- [45] T. E. Everhart and P. H. Hoff, J. Appl. Phys., Vol. 42, No. 13, 5837, 1971
- [46] B.G. Yacobi and D.B. Holt, Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids, Edition Plenum Press, New York and London, 1992.
- [47] H.E. Bishop, Brit. J. Appl. Phys., Vol 18, 1967.
- [48] T.E. Everhart and P.H. Hoff, J. Appl. Phys. 42(13), 1971.
- [49] G. Fontaine « Emission Electronique et contrastes », Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 123, 1969
- [50] C. A. Klein, Phys. Lett. Vol. 24A, No. 10, 513, 1967
- [51] R. C. Aling and S. Bloom, *Phy. Rev. Lett.* 35, 1522, 1975.
- [52] B. G. Yacobi et D. B. Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids" (Plenum Press, New York), 1990.
- [53] L. Pavesi et M. Guzzi, "Photoluminescence of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As alloys", J. Appl. Phys. 75, 4779, 1995.
- [54] S.M. Sze, "Physics of semiconductor devices" (John Wiley, New York, 1981)
- [55] B. G. Yacobi et D. B. Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids" (Plenum Press, New York), 1990.
- [56] H.J. Leamy, "Charge collection scanning electron microscopy", J. Appl. Phys. 53, R51, 1982.
- [57] B. Sieber, Mat. Sci. Eng. B 24, 35, 1994.
- [58] M. Ledra, Simulation Monte Carlo du contraste de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs, Thèse de doctorat, université Mentouri Constantine, p20, 2006.
- [59] R.A. Oliver, Advances in AFM for the electrical characterization of semiconductors, Rep. Prog. Phys. 71, 076501, 2008.

- [60] Y. Naitou, H. Ogiso, S. Kamohara, F. Yano, A. Nishida, Study on channel depletion in metal-oxide-semiconductor field effect transistor using top-view imaging through scanning capacitance microscopy, *Surface and Interface Analysis* 41, 34, 2009.
- [61] K. Kimura, K. Kobayashi, K. Matsushige, K. Usuda, H. Yamada, Noncontact-mode scanning capacitance force microscopy towards quantitative two-dimensional carrier profiling on semiconductor devices, *Applied Physics Letters* 90, 083101, 2007.
- [62] O. Ligor, B. Gautier, A. Descamps-Mandine, D. Albertini, N. Baboux, L. Militaru, Interpretation of scanning capacitance microscopy for thin oxides characterization, *Thin Solid Films* 517, 6721, 2009.
- [63] N. Matsuki, R. Ishihara, A. Baiano, K. Beenakker, Investigation of local electrical properties of coincidence-site-lattice boundaries in location-controlled silicon islands using scanning capacitance microscopy, *Applied Physics Letters*, 93, 062102, 2008.
- [64] O. Douhéret, K. Maknys, S. Anand, Scanning capacitance microscopy investigations of InGaAs<sub>y</sub>/InP quantum wells, *Thin Solid Films* 459, 67–70, 2004.
- [65] D. Pastré, Cathodoluminescence en champs proche optique, thèse de doctorat, université de Reims, France, 1999.
- [66] D.J.As, S. Potthast, U. Kohler, A. Khartohonko and K. Lischka, Cathodoluminescence of MBE-grown Cubic AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> Multi-quantum Wells on GaAs(001) Substrates, *Mat.Res.Soc*, L5.4.4, 2003.
- [67] B. Koiller and A. S. Martins, Optical Effets of Interdiffusion in GaAs/AlAs eterostructures : Atomic Scale calculations, *App.Phys.lett*, 69, Issue16, pp.2423-2425 ,1996.
- [68] Z. Elataeche, Mémoire de Magister, Université Batna, 2006.
- [69] G. Fort, Méthodes de Monte Carlo et Chaînes de Markov pour la simulation, Mémoire présenté pour l'obtention de l'Habilitation à Diriger les Recherches, 2009.
- [70] K. Binder, monte Carlo Methods in Statistical Physics, Springer-Verlag, 1986.
- [71] J.P. Nougier. Méthode de calcul numérique, Masson, Paris, 1987
- [72] Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for scientists and Engineers, 2003.
- [73] B. Lapeyer, E. Pardoux, R. Sentis. « Méthode de Monte-Carlo pour les Equations de Transport et de Diffusion », Springer, Berlin, 1998.
- [74] B. G. Yacobi and D. B. Holt, *J. Appl. Phys.* 59, 4, R1, 1986.
- [74] N, Belabed, Mémoire de Magister, Université Mentouri, Constantine, 2006
- [75] A. Nouiri, S. Chaguetmi, and N. Belabed, *Surf. Inter. Analy*, 2006.
- [76] D.B. Wittry and D.F. Keyser, *J.Appl.Phys.*, 38, 375, 1967.
- [77] S. Adachi., *J.Appl.Phys*, 58, 3, 1. R1-R2, 1985.

- [78] Y. Ayant E. Beloriwky, Cours de mécanique quantique, P.98.100.BORDAS, 2<sup>ème</sup> édition, Paris ,1974.
- [79] W. Geral, R. A. Carlos, Monte Carlo simulation methode a Applied to the study of EBIC in a semiconductor LASER, p.261,Brazil.
- [80] Site web: [www.gatan.com](http://www.gatan.com)
- [81] B. Koiller and A. S. Martins, Optical Effets of Interdiffusion in GaAs/AlAs Heterostructures : Atomic Scale calculations, App.Phys.lett, 69 , Issue16,pp.2423-2425 ,1996.
- [82] D.J.As, S. Potthast, U. Kohler, A. Khartohonko and K. Lischka, Cathodoluminescence of MBE-grown Cubic AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> Multi-quantum Wells on GaAs(001) Substrates, Mat.Res.Soc, L5.4.4, 2003.
- [83] J. Wang, J.W. Steeds,M. Henini, High resolution tem-CL form the cross-sectional specimens of AlGaAs/GaAs, Journal de Physique III, Vol. 1,1991.
- [84] R.Aouati, A. Nour, Monte Carlo calculation for cathodoluminescence of AlGaAs/GaAs Nanostructure, International Journal of Nanoscience, Vol. 10, No. 1, PP. 1-7, 2011.
- [85]S. Ushioda, T. Tsuruoka, Y. Ohizumiy, and H. Hashimoto, Brazilian Journal of Physics, vol. 34, no. 2B, P. 548, 2004.

# **Annexe**

# Monte Carlo model of cathodoluminescence characterization of AlAs/GaAs/AlAs laser diode

A. Nouri\*, R. Aouati

*Department of Physics, University of Constantine, 25000 Constantine, Algeria*

Available online 4 November 2007

## Abstract

In the present paper, a Monte Carlo calculation model of AlAs/GaAs/AlAs nanostructure is presented in order to describe the influence of different parameters such as the thickness of quantum well and barrier as well as the diffusion length. The carrier excess generated during the collision of the incident electron with the atoms of the material (random walk) is calculated as a function of depth taking into account the confinement phenomenon within the quantum well. The radiative recombination of electron–hole pairs is collected as a light (CL signal). Numerical results obtained for two quantum wells (30 and 20 nm) are compared with experimental data. © 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

*PACS:* 85.30.De; 42.55.Px; 78.60.Hk

*Keywords:* Cathodoluminescence; Monte Carlo; Quantum well; Laser diode

## 1. Introduction

The low-dimensional semiconductor structures become an important domain because their electronic, optical, and transport properties [1]. The applications of semiconductor nanostructure are numerous, like semiconductor lasers, mesoscopic devices, and high-speed heterostructure devices [1]. The cathodoluminescence technique (CL) performed in the scanning electron microscope (SEM) offers optoelectronic characterization of some nanostructures [2] and it is a powerful tool for studying the compositional variation or band structure of three-dimensional microscale or nanoscale construction [3]. The spatial resolution is determined principally by the size of the generation volume. Other influences are associated with specimen characteristics, e.g. specimen configuration, diffusion length, emission and absorption characteristics, surface effects, and structure dimensions. Concerning the simulation of GaAs/AlAs nanostructure, there are no sufficient numerical works about the characterization, but the majority of contribution is about the structure it self and its properties, like memory twitching in AlAs/GaAs

tunnelling diodes [4]. In this paper, a simple Monte Carlo calculation model is proposed to describe the interaction of electron beam with AlAs/GaAs/AlAs nanostructure.

## 2. Model

### 2.1. Random diffusion

In the present calculation, the incident electron is followed from its arrival at the surface until the end of its path inside the material, and during this trajectory the program calculates the backscattered electrons, the electron–hole pairs generated. The sample is divided into several quantum wells (QWs). At each zone (QW or barrier) a number of electron–hole pairs ( $\Delta n$ ) are generated. This carrier excess  $\Delta n$  will be transformed into light by radiative recombination (CL signal) inside the QW, but inside the barriers the recombination is nonradiative. We are interested in the minority carrier excess  $\Delta n$  (p-type sample) generated during the collision of the incident electron with the atoms of the material (random walk) [6]. After each step  $S$  we ask a question about the angle  $\theta_c$  calculated [5] and the angle  $\theta_r$  given randomly between  $0^\circ$  and  $180^\circ$ , if the  $\theta_r$  is inferior to  $\theta_c$ , so there is an elastic

\*Corresponding author. Tel.: +213 31818833; fax: +213 31818872.

E-mail address: [nouiria@yahoo.fr](mailto:nouiria@yahoo.fr) (A. Nouri).

scattering, the electron makes another step (S) without loss of energy. If the  $\theta_r$  is superior to  $\theta_c$ , so there is an inelastic scattering with loss of energy ( $E_{e-h}$ ) to generate an electron–hole pair.

The electron travelling in a solid loses its energy by random successive collisions until the end of its trajectory (Fig. 1a).

2.2. Quantum diffusion through barriers

The barrier height is

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for } b < x < a \\ 0 & \text{for } b > x > a, \end{cases} \quad (1)$$

where  $a$  is the barrier width,  $(b-a)$  is the QW width and  $V_0$  is the barrier height.

For energies greater than the barrier height,  $E > V_0$  the probability for the particle to be transmitted through the

barrier is written as

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2((a/\hbar)\sqrt{2m(E - V_0)}}. \quad (2)$$

For energies less than the barrier height,  $E < V_0$  there is a non-zero probability for the particle to be transmitted through the barrier which is written as

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sin^2 h^2((a/\hbar)\sqrt{2m(V_0 - E)}}. \quad (3)$$

This effect which differs from the classical case is called quantum tunnelling. The transmission depends on the barrier width ( $a$ ) and the wave vector  $k$ .

For energies equal to barrier height,  $E = V_0$  the transmission probability evaluates to

$$T = \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + 2ma^2V_0}. \quad (4)$$

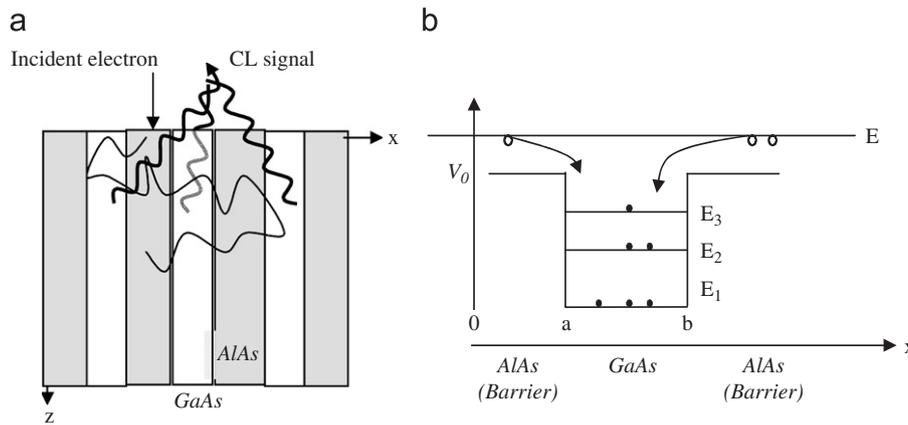


Fig. 1. Schematic representation of AlAs/GaAs/AlAs nanostructure. (a) Laser diode under an electron beam used in cathodoluminescence microscopy (a). (b) Quantum diffusion of carriers generated through barriers. ( $\circ$ ) Are minority carriers generated by the electron beam and diffused through barriers. ( $\bullet$ ) Are minority carriers confined in quantum well (GaAs layer).

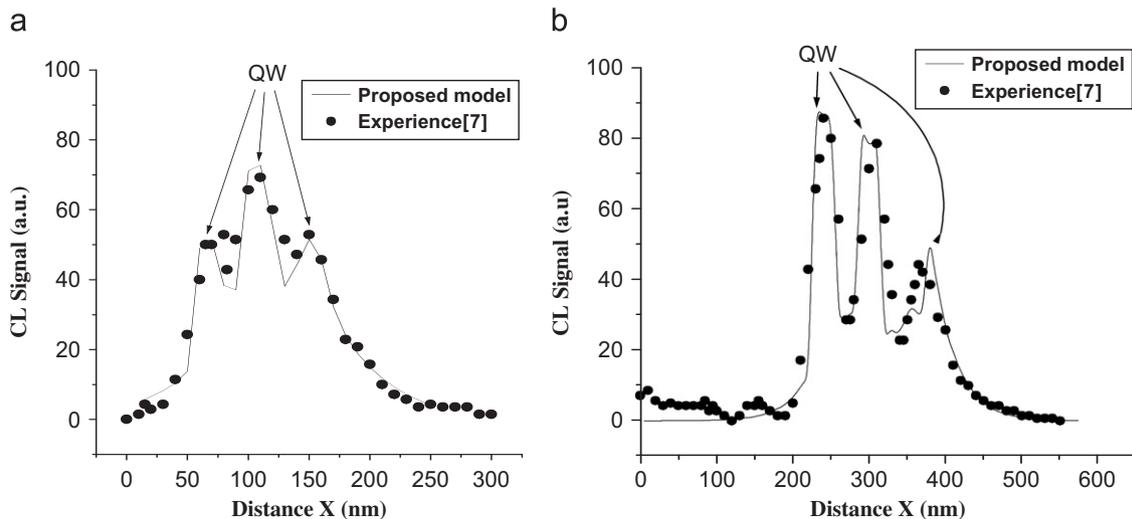


Fig. 2. CL signal for three GaAs quantum wells. QW = 20 nm (a), QW = 30 nm (b).

### 2.3. Cathodoluminescence signal ( $I_{CL}$ )

The CL signal ( $I_{CL}$ ) is given by

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \Delta n(z) \exp(-\alpha z) dz, \quad (5)$$

where  $\alpha$  is the absorption coefficient.

At each zone, a quantity of electron–hole pairs ( $\Delta n_i$  or  $\Delta p_i$ ) is generated. This carrier excess will be transformed into light (CL signal ( $I_{CL}$ )).

Therefore, the relation in Eq. (5) becomes [7]:

$$I_{CL} = \sum_{i=1}^n \Delta n_i \exp(-\alpha z_i), \quad (6)$$

where  $n$  is the number of zones and  $z_i$  is the depth of generation volume.

### 3. Results and conclusion

Fig. 2 shows that there is no CL signal before the QWs because the AlAs layer has an indirect band gap. On the other hand, the spatial CL resolution increases with increasing of QW thickness.

A new Monte Carlo model is proposed to describe the interaction of electron beam with the multi-QWs AlAs/GaAs. According to the proposed model, the CL signal is produced by the radiative recombination of the minority carrier confined inside the QW (GaAs layer). Some physical parameters like diffusion length and size of the QW can influence on CL curves and CL intensity.

### References

- [1] B. Keith, D.V. Dimitri, *Low-Dimensional Semiconductor Structures: Fundamentals and Device Applications*, Cambridge University Press, 2001.
- [2] F. Bertram, M. Lipinski, T. Riemann, D. Rudloff, J. Christen, P. Veit, R. Clos, K. Eberl, *Physica E* 7 (2000) 363.
- [3] T. Sekiguchi, Y. Sakuma, T. Takebe, *J. Electron Microsc. (Tokyo)* 52 (4) (2003) 383.
- [4] K.G. Kiran, *Heterostructure device simulation using the Wigner function*, Thesis, The University of Texas at Austin, 1994.
- [5] A. Nouri, S. Chaguetmi, N. Belabed, *Surf. Interface Anal.* 38 (2006) 1153.
- [6] B.G. Yacobi, D.B. Holt, *Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids*, Edition Plenum Press, New York, 1990.
- [7] R. Aouati, Thesis, University of Constantine, Algeria, 2007.

# MONTE CARLO CALCULATION FOR CATHODOLUMINESCENCE OF AlGaAs/GaAs NANOSTRUCTURE

REDHA AOUATI\*

*Physics Department, University of Constantine  
Constantine, 25000, Algeria  
aouati.redha@gmail.com*

ABDELKADER NOURI

*Physics Department, University of Oum-El-Bouaghi  
Oum-El-Bouaghi, 04000, Algeria  
nouiri\_kader@yahoo.fr*

Received 11 May 2010

Accepted 7 July 2010

The cathodoluminescence technique (CL) performed in the Scanning Electron Microscope (SEM) offers opto-electronic characterization of some nanostructures and it is a powerful tool for studying the compositional variation or band structure of three-dimensional microscale or nanoscale structures. The major problem of the CL technique is the difficulty of high spatial resolution of the low-dimensional structure. In the present paper we propose a simple Monte Carlo calculation model to describe the interaction of electron beam with  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$  nanostructure. This model takes into account the confinement phenomenon in the quantum well by an easy method. The influence of different parameters such as the thickness of barriers, Al mole fraction ( $x$ ), and the diffusion length are studied. The carrier excess generated during the collision of the incident electron with the atoms of the material (random walk) is calculated taking into account the confinement phenomenon within the quantum well. The radiative recombination of electron–hole pairs is collected as a light (CL signal).

*Keywords:* Cathodoluminescence; Monte Carlo; nanostructure; quantum well.

## 1. Introduction

The  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As/GaAs}$  heterostructure system is a potentially useful material for high-speed digital, high-frequency microwave, and electro-optic device applications.<sup>1</sup> Low-dimensional semiconductor structures have become an important field of research because of their novel electronic, optical, and transport properties.<sup>2</sup> The applications of semiconductor nanostructure are numerous, like semiconductor lasers, mesoscopic devices, and high-speed heterostructure

devices.<sup>2</sup> The cathodoluminescence technique (CL) performed in the Scanning Electron Microscope (SEM) offers opto-electronic characterization of some nanostructures<sup>3</sup> and it is a powerful tool for studying the compositional variation or band structure of three-dimensional microscale or nanoscale structures.<sup>4</sup> The spatial resolution is determined principally by the size of the volume of excitation. Other influences are associated with specimen characteristics, e.g.,

\*Corresponding author.

specimen configuration, diffusion length, emission and absorption characteristics, surface effects, and structure dimensions. For best results using low injection conditions, optimal collection and detection apparatus are equally important as specimen characteristic and good simulation. The use of electron beam energies less than 5 kV in semiconductor specimens can yield spatial resolutions better than 100 nm. The use of very low energies, topography, or other specimen enhancements can reduce this figure to approximately 30 nm. However, it is important to remember that although the spatial resolution may not reach quantum dimensions, spectrally resolved cathodoluminescence can detect variations down to atomic dimensions. For example, in quantum wells, a slight change in alloy composition or well thickness by one monolayer can be detected due to quantum confinement effects. In addition, electrically active impurities can be detected at concentrations many orders of magnitude beneath that which can be detected using X-ray techniques. Concerning the simulation of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  nanostructure, there are insufficient numerical works about the characterization, but the majority of contribution is about the structure itself and its properties, like memory switching in  $\text{AlAs}/\text{GaAs}$  tunneling diodes.<sup>5</sup> In this paper a simple Monte Carlo calculation model is proposed to describe the interaction of electron beam with  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  nanostructure. This model takes into account the confinement phenomenon in the quantum well by an easy method. The carrier excess generated during the collision of the incident electron with the atoms of the material (random walk) is calculated as a function of depth taking into account the confinement phenomenon within the quantum well. The radiative recombination of electron–hole pairs is collected as a light (CL signal).

## 2. Electron–Matter Interaction

When a sample is bombarded by an electron beam (with primary beam energy  $E_0$ ), it produces elastic and inelastic scattering. The elastically scattered electrons (which include backscattered electrons) are scattered (with the same energy) through larger angles than the inelastically scattered electrons. Inelastic scattering occurs by several mechanisms inside the material as follows<sup>6</sup>:

- Plasmon excitation occurs with the free electron gas (metallic thin film). Typical plasmon excitation involves transfer of around 15 eV to the solid.

- Conduction band excitation ejects electrons as secondary electrons. Most of the secondary electrons leave the surface with 0 to 50 eV kinetic energies.
- Bremsstrahlung occurs when a primary electron undergoes deceleration in the coulombic field of an atom. Bremsstrahlung consists of X-ray photons (continuum radiation).
- Excitation of lattice oscillations (phonons) transfers a substantial portion of beam energy to the sample as heat.
- Inner-shell ionization ejects an electron from an inner shell (characteristic X-ray).
- When an electron from the L shell drops to fill a vacancy formed by K-shell ionization, the resulting X-ray photon may not be emitted from the atom but may strike a lower energy electron, and this outer electron may be ejected as a low-energy Auger electron.
- Electron–hole pairs are created in semiconductors.
- CL is the emission of visible light (emission of UV and IR is also possible) from a sample during electron bombardment due to the radiative recombination of the electron–hole pairs.

## 3. Model

### 3.1. Random diffusion

In this model we study semiconductor materials ( $\text{GaAs}$  and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ) (Fig. 1); so, there are three principal processes:

- Backscattered electrons (elastic scattering)

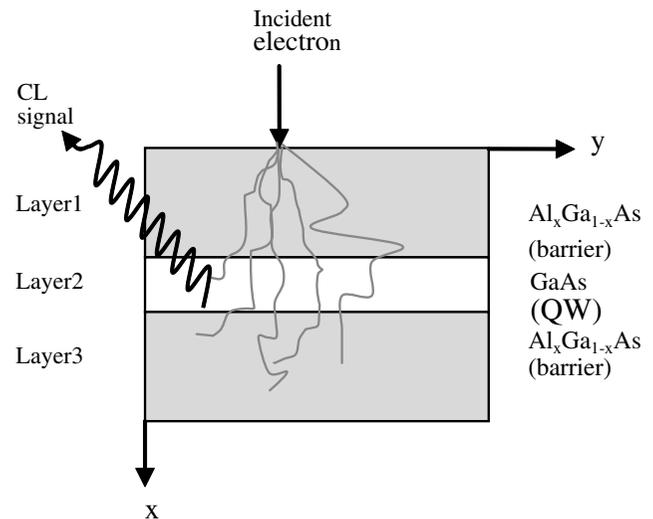


Fig. 1. Schematic representation of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  nanostructure under an electron beam used in cathodoluminescence microscopy.

- Generation of electron–hole pairs (inelastic scattering)
- Excitation of lattice oscillations (phonons) (inelastic scattering).

In the present calculation, the incident electron is followed from its arrival at the surface until the end of its path inside the material (or until its exit on the other side of the material in the case of thin films), and during this trajectory the program calculates the backscattered electrons, the electron–hole pairs generated, and the phonons. The sample is divided into several hemispherical zones. At each zone a number of electron–hole pairs ( $\Delta n$ ) and phonons ( $\Delta ph$ ) are generated. This carrier excess  $\Delta n$  will be transformed into light by radiative recombination (CL signal), but the phonon excess  $\Delta ph$  will appear as a temperature rise.

In the present calculation we are interested in the carrier excess  $\Delta n$  (minority carriers) generated during the collision of the incident electron with the atoms of the material (random walk). After each collision the electron loses energy  $E_{e-h}$  to generate one pair (in addition to one phonon). In the CL mode of SEM the energy of an incident electron  $E_0$  is essentially larger than the average energy  $E_{e-h}$  (4.27 eV for GaAs) and (between 4.27 and 6.50 eV for  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ) for the production of an electron–hole pair, and so one incident electron (with energy  $E_0$  of 10–20 keV, for example) can generate several thousands of electron–hole ( $e-h$ ) pairs along its trajectory in the excitation volume. The electron–hole pair creation energy is given by<sup>6</sup>:

$$E_{e-h} \approx 3E_g, \quad (1)$$

where  $E_g$  is the energy band gap.

In the case of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , the energy band gap is given by<sup>1</sup>

$$E_g = \begin{cases} 1.424 + 1.247x & \text{for } (0 \leq x \leq 0.45) \\ 1.900 + 1.25x + 0.143x^2 & \text{for } (0.45 < x \leq 1.00) \end{cases} \quad (2)$$

The total number of  $e-h$  pairs is given by a generation factor<sup>7</sup> as

$$G = \frac{E_0(N_{el} - \gamma N_{el})}{E_{e-h}}, \quad (3)$$

where  $\gamma$  is the backscattered energy rate ( $\gamma$  is 25% for GaAs and between 25% and 30% for

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ).  $N_{el}$  is the incident electron number;  $\gamma N_{el}$  is the backscattered electron number.

The electron traveling in a solid loses its energy  $E_e = E_0(1 - \gamma)$  by random successive collisions until the end of its trajectory.

The step distance  $S$  is written as<sup>8</sup>

$$S = -\lambda \ln(R), \quad (4)$$

where  $R$  is a random number between 0 and 1 (random walk).

The mean free path  $\lambda$  can be obtained from the total scattering cross section as<sup>8</sup>

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma}, \quad (5)$$

where  $A$  is the atomic weight (144.64 g for GaAs),  $N_A$  is the Avogadro's number,  $\rho$  is the density of the material (5.32 g/cm<sup>3</sup>), and  $\sigma$  is the total scattering cross section.

Scattering mechanisms can be divided into elastic and inelastic. The elastic scattering of electrons by the nuclei of the atoms, which are partially screened by the bound electrons, can be analyzed by using the Rutherford model. The total relativistic Rutherford scattering cross section is given by<sup>8</sup>

$$\sigma = (5.21 \cdot 10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E^e} \right]^2 \left[ \frac{E_e + m_0 c^2}{E_e + 2m_0 c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta + 1)}, \quad (6)$$

where  $Z$  is the atomic number of the scattering atom (64 for GaAs which is assumed as an element, so  $Z = (Z_{\text{Ga}} + Z_{\text{As}})$ ,  $E_e$  is the energy of electron in keV,  $C$  is the speed of light,  $m_0$  is the mass of electron, and  $\delta$  is a screening parameter.

The screening parameter  $\delta$  is given by<sup>8</sup>

$$\sigma = (3.4 \cdot 10^{-3}) \frac{Z^{0.67}}{E^e}. \quad (7)$$

The angle for a particular scattering event can be obtained from the probability distribution<sup>8</sup>:

$$\cos \theta = 1 - \frac{2\delta R}{1 + \delta - R}. \quad (8)$$

$R$  is a random number between 0 and 1.

The elastic or inelastic scattering depends on  $\theta$ .<sup>7</sup>

### 3.2. Temperature rise

Concerning the temperature rise, we assumed that after each collision the electron products both  $e-h$  pair and phonon.<sup>7</sup> The energy loss as a phonon is

calculated from the thermal average energy of atom which is written as

$$E_{\text{moy}} = \left(\frac{3}{2}\right)K_B T, \quad (9)$$

where  $K_B$  is Boltzmann constant, for  $T = 300$  K and  $E_{\text{moy}} = 38.8$  meV.

After each step  $S$  we ask a question about the angle  $\theta_c$  calculated from the formula (6) and the angle  $\theta_r$  given randomly between  $0^\circ$  and  $180^\circ$ ; if and  $\theta_r$  is inferior to  $\theta_c$ , then there is an elastic scattering, the electron makes another step ( $S$ ) without loss of energy. If  $\theta_r$  is superior to  $\theta_c$ , then there is an inelastic scattering with loss of energy ( $E_{e-h}$ ) to generate an electron–hole pair and loss of energy ( $E_{\text{moy}}$ ) to generate a phonon.<sup>7</sup>

### 3.3. Quantum diffusion through barriers (Fig. 2)

The time-independent Schrödinger equation for the wave function  $\psi(x)$  reads

$$H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2 d^2}{2mdx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x), \quad (10)$$

where  $H$  is the Hamiltonian,  $\hbar$  is the (reduced) Planck constant,  $m$  is the mass,  $E$  is the energy of the particle (electron generated), and

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for } 0 < x < a \\ 0 & \text{for } 0 > x > a \end{cases}, \quad (11)$$

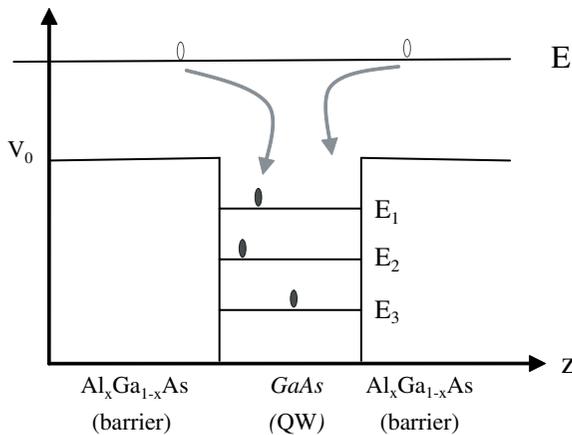


Fig. 2. Quantum diffusion of carriers generated through barriers.<sup>10</sup> (o) are minority carriers generated by the electron beam and diffused through barriers. (•) are minority carriers confined in quantum well (GaAs layer).

where  $a$  is the barrier width and  $V_0$  is the barrier height.

For energies greater than the barrier height,  $E > V_0$  the probability for the particle to be transmitted through the barrier is written as

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}\right)}. \quad (12)$$

For energies less than the barrier height,  $E < V_0$  there is a nonzero probability for the particle to be transmitted through the barrier which is written as

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)}. \quad (13)$$

This effect which differs from the classical case is called quantum tunneling. The transmission depends on the barrier width ( $a$ ) and the wave vector  $k$ .

For energies equal to the barrier height,  $E = V_0$  the transmission probability evaluates to

$$T = \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + 2ma^2V_0}. \quad (14)$$

**Remark.** If the barrier is thick (in micrometer) an exponential law is used to describe the carrier diffusion toward quantum well:

$$\Delta n(\text{QW}) = \Delta n_{(\text{Barrier})} e^{-\frac{x}{L_d}}, \quad (15)$$

where  $\Delta n_{(\text{Barrier})}$  is the excess carrier generated in the barrier ( $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  layer),  $\Delta n$  (QW) is the excess carrier arrived to quantum well ( $\text{GaAs}$  layer),  $L_d$  is the diffusion length (in this paper we consider a  $p$ -type material, so  $L_d$  becomes  $L_n$  the diffusion length of minority carrier), and  $x$  is the distance between the place of carrier birth and quantum well.

### 3.4. Calculation

To calculate the penetration depth, the sample is divided into several hemispherical zones,  $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_n$  ( $n$  equals 10 to 100 which depends on sample thickness) (see also Table 1).

In our calculation we are interested by the electron–hole pairs generated during the collision of incident electron by the atoms of material (random walk). After each collision, the electron loses an energy  $E_{e-h}$  to generate one pair electron–hole.

Table 1. Some bulk material parameters for GaAs and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  used in our calculation.<sup>1</sup>

Parameter	GaAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
Lattice constant $a(\text{\AA})$	5.6533	$5.6533 + 0.0078x$
Crystal density $g(\text{g/cm}^3)$	5.360	$5.36 - 1.6x$
Energy band gap $E_g(\text{eV})$	1.424	$1.424 + 1.247x$ ( $0 \leq x \leq 0.45$ ) $1.900 + 0.125x + 0.143x^2$ ( $0.45 < x \leq 1.00$ )

At the end of electron trajectory the number of electron–hole pairs  $\Delta n$  and  $\Delta p$  are calculated at each zone. To simplify the calculation, two dimensions,  $x$  and  $y$  are considered.

### 3.4.1. Penetration depth

The penetration depth is calculated according to the formula<sup>9</sup>

$$\text{Re} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} r_{\max}(i)}{n_{el}}, \quad (16)$$

where  $n_{el}$  is the number of incident electrons,  $r_{\max}(i)$  is the maximum distance traversed by the electron “ $i$ ”.

$$r_{\max}(i) = \sqrt{x_{(i)}^2 + y_{(i)}^2}, \quad (17)$$

$$x_{(i)} = x_1 + x_2 + \cdots + x_{\text{fin}}, \quad (18)$$

$$y_{(i)} = y_1 + y_2 + \cdots + y_{\text{fin}}. \quad (19)$$

$x_{\text{fin}}$  and  $y_{\text{fin}}$  are the final coordinates of incident electron inside the material.

### 3.4.2. Cathodoluminescence signal ( $I_{\text{CL}}$ )

In any applications, knowledge of the carrier generation distribution is important.

The collected pairs are given by an exponential law. Hence, the CL signal ( $I_{\text{CL}}$ ) is given by

$$I_{\text{CL}} \propto \int_0^{\infty} \Delta n(x) \exp(-\alpha x) dx, \quad (20)$$

where  $\alpha$  is the absorption coefficient.

To calculate the CL signal ( $I_{\text{CL}}$ ), the sample is divided into several horizontal zones; at each zone, a quantity of electron–hole pairs ( $\Delta n$  or  $\Delta p$ ) is generated. This carrier excess will be transformed into light (CL signal ( $I_{\text{CL}}$ )).

Therefore, the relation in Eq. (20) becomes

$$I_{\text{CL}} = \sum_{i=1}^n \Delta x \exp(-\alpha x). \quad (21)$$

## 4. Results

The penetration depth is calculated as a function of accelerating energy  $E_0$  (Fig. 3) for AlAs/GaAs/AlAs device ( $x = 1$ ). The calculation is compared with the penetration depth of both GaAs and AlAs separately.

It is noticed that the penetration depth and the interaction volume depend on accelerating energy

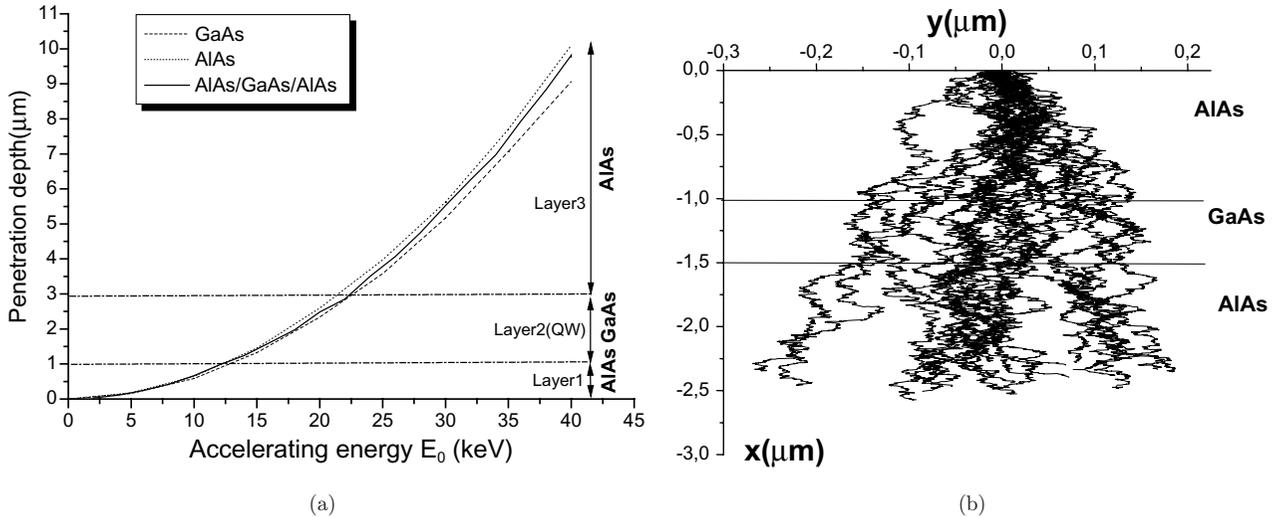


Fig. 3. Penetration depth of electrons in AlAs/GaAs/AlAs ( $x = 1$ ) as a function of accelerating energy for QW = 2000 nm (a) and trajectories of twenty electrons using 20 keV as an accelerating energy for QW = 500 nm (b).

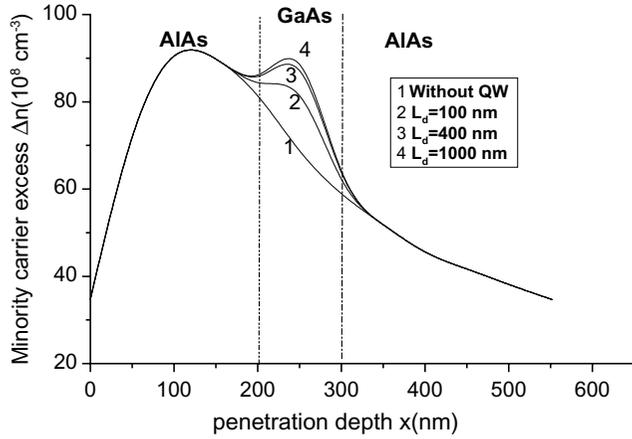


Fig. 4. Minority carrier excess as a function of depth in AlAs/GaAs/AlAs nanostructure with 100 nm as a quantum well, for an accelerating energy equal to 10 keV and for different values of diffusion length.

and they are independent on the number of incident electrons (equivalent to absorbed current). The penetration depth of AlAs/GaAs/AlAs device is shifted to that of GaAs because of the second layer (quantum well), but if the quantum well is very small (in nanometer) the penetration depth of AlAs/GaAs/AlAs device is coincided practically with that of AlAs (substrate).

The variation of minority carrier excess  $\Delta n(x)$  is calculated taking into account the confinement phenomena inside the quantum well. Figure 4 shows the variation of  $\Delta n(x)$  as a function of depth. The general form of the curve is Gaussian with an anomaly at the quantum well (GaAs layer) because of the confinement of electrons. The effect of diffusion length  $L_d$  is very clear; the carrier excess increases of quantum well with increasing  $L_d$ , which is due to the increasing of probability of transmission toward the quantum well (see Eq. (15)).

#### 4.1. Influence of the diffusion length

Figure 5 shows that there is no CL signal before the quantum well (for low accelerating energies) because the first layer ( $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}$ ) has an indirect band gap. On the other hand, the CL signal increases with increasing diffusion length because the generated carriers have the possibility to attend the quantum well (GaAs layer) according to Eq. (15) and make a radiative recombination. Using this calculation, we can obtain the value of diffusion length by fitting the experimental data.

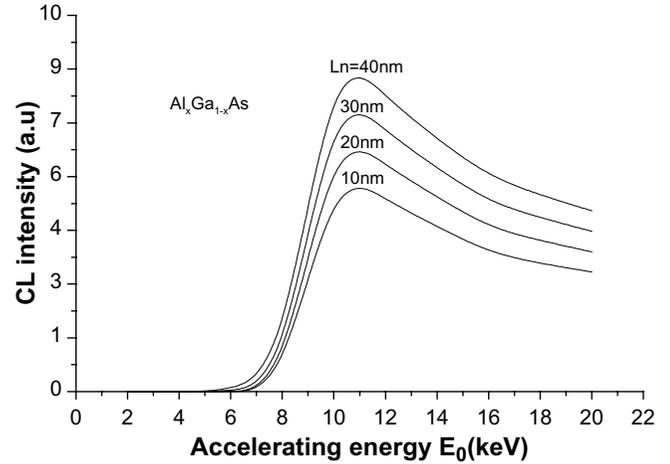


Fig. 5. Cathodoluminescence signal as a function of accelerating energy for different values of diffusion length ( $x = 0.55$ , barrier =  $0.5 \mu\text{m}$ , QW = 30 nm).

#### 4.2. Influence of barrier thickness

Figure 6 shows that for the great values of barrier (layer 1), there is no CL signal for the low accelerating energies because the penetrated electrons do not have the possibility to attend the quantum well (GaAs layer). Nevertheless, we remark a great influence of barrier in low accelerating energies range for the low values of barrier (layer 1), because in this case the volume of excitation can attend the quantum well. In the case of the high accelerating energies, there is no important influence of barrier because the volume of excitation will be in layer 3 (substrate).

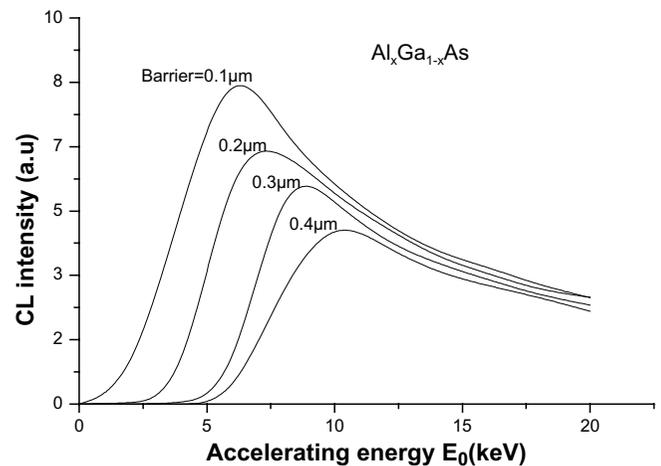


Fig. 6. Cathodoluminescence signal as a function of accelerating energy for different values of barrier (layer 1) ( $x = 0.55$ , QW = 40 nm,  $L_n = 30$  nm).

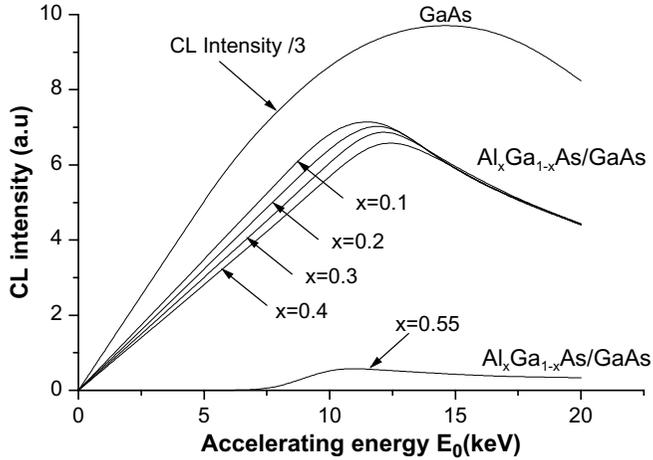


Fig. 7. Cathodoluminescence signal as a function of accelerating energy for different values of content  $x$ . (QW = 30 nm, barrier =  $0.5 \mu\text{m}$ ,  $L_n = 30 \text{ nm}$ ).

### 4.3. Influence of Al mole fraction ( $x$ )

Figure 7 shows the influence of the Al mole fraction ( $x$ ) on CL signal. This figure is more detailed than Fig. 4. For the low accelerating energies case and for  $0.45 < x < 1$ , there is no CL signal because we are in the first layer (“nonradiative recombination”); the same is the case for the high accelerating energies because we are in the third layer (substrate). In the middle range of accelerating energies we observe that the CL signal is important because of the existence of GaAs layer (quantum well). In the case of  $0 < x < 0.45$  the CL signal increases with decreasing Al mole fraction ( $x$ ) because the first layer has a direct band gap. For the high accelerating energies, the CL signal decreases with  $E_0$  (without the influence of  $x$ ), because of the influence of absorption coefficient.

## 5. Conclusions

In this study, we developed a Monte Carlo model to simulate the interaction of electron with quantum well used in cathodoluminescence technique. This model describes the investigation of the nanostructure devices such as  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . According to this model, some parameters like barrier thickness, diffusion length, and Al mole fraction ( $x$ ) can influence the CL curves. In future, the CL curves will be compared with experimental data in order to determine the physical parameters of semiconductor nanostructures.

## References

1. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, 3,1. R1–R2 (1985).
2. B. Keith and D. V. Dimitri, *Low-Dimensional Semiconductor Structures and Fundamentals and Device Applications* (Cambridge University Press, 2001).
3. F. Bertram, M. Lipinski, T. Riemann, D. Rudloff, J. Christen, P. Veit, R. Clos and K. Eberl, *Physica E* **7**, 363 (2000).
4. T. Sekiguchi, Y. Sakuma and T. Takebe, *J. Electron Microsc.* **52**, 383 (2003).
5. K. G. Kiran, Heterostructure device simulation using the Wigner function, Thesis, The University of Texas at Austin (1994).
6. R. C. Aling and S. Bloom, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1522 (1975).
7. A. Nouri, S. Chaguetmi and N. Belabed, *Surf. Interf. Anal.* **38**, 1153 (2006).
8. B. G. Yacobi and D. B. Holt, *Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids* (Plenum Press, 1990).
9. Z. Elateche and A. Nouri, *J. Eng. Appl. Sci.* **2**, 788 (2007).
10. A. Nouri and R. Aouati, *Physica E* **40**, 1751 (2007).

## دراسة التفاعل إلكترون-مادة للبنى النانوية لمادة زرنيخ الغاليوم

### ملخص:

في هذا العمل قمنا بدراسة ظاهرة التفاعل إلكترون-مادة عن طريق إنجاز نموذج حسابي يعتمد على طريقة مونتني كارلو و تقنية التلق المهبطي (CL)، من أجل دراسة مركب غير متجانس من نوع  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  يتضمن بئر كمي (كوانتي) من رتبة النانومتر.

طريقة الحساب المستعملة في هذه النمذجة تأخذ بعين الاعتبار السير العشوائي للإلكترونات داخل المادة، وتأثير معاملات الحزمة الإلكترونية (عدد الإلكترونات  $N_{el}$  وطاقة التسريع  $E_0$ )، كما تأخذ أيضا بعين الاعتبار المعاملات الفيزيائية للمادة المدروسة (طول الانتشار  $L_D$  عرض البئر الكمي و الحاجز الكمي  $d$  وكذلك النسبة المولية  $x$ )، و ظاهرة الحصر الإلكتروني، وكذلك تأثيرها على شدة التلق المهبطي و وضوح الصورة.

بمقارنة النتائج التي تحصلنا عليها مع بعض النتائج التجريبية الموجودة في المراجع وأخرى نظرية تبين وجود توافق جيد، الأمر الذي سح لنا باستنتاج أنه رغم بساطة النموذج الحسابي إلا أنه قادر على وصف ودراسة مركبات وبنى من رتبة النانومتر ذات بئر كمي، وبإمكانه حتى تحديد المعاملات الفيزيائية المسؤولة عن وضوح الصورة في تقنية التلق المهبطي.

**كلمات مفتاحية:** تفاعل إلكترون - مادة، التلق المهبطي، محاكاة مونتني كارلو، مركب غير متجانس،  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ ، بئر كمي، ظاهرة الحصر الإلكتروني، طول الانتشار.

Title:

## **Study of the electron-matter interaction of the Gallium arsenide nanostructure**

### **Abstract:**

In this present work, we studied the electron-matter interaction phenomena by elaboration a numerical model based on Monte Carlo Method, and the cathodoluminescence (CL) technique, to study a  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  heterstructure with quantum well in the nanometer scale.

The procedure of calculation used in this modelling takes into account the random walk of the electrons within the matter and the influence of the electron beam parameters (electron numbers  $N_{el}$  and the acceleration energy  $E_0$ ) and the physical parameters of material (diffusion length  $L_D$ , The thickness of quantum well and potential barrier  $d$  and the x mole fraction ) and confinement phenomenon, and also its influence on the CL signal.

Our results are compared with those obtained by the experiment in the literature, as well as other theoretical results and they are in concord. This comparison leads to deduce that in spite of the simplicity of the numerical model, it is capable to characterize the nanostructures with quantum wells, and also determine the responsible parameters for resolution image.

**Keywords :** electron-matter Interaction, Cathodoluminescence, Monte Carlo simulation, Heterostructure,  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , quantum well, Confinement, Diffusion length.

# Etude de l'interaction électron-matière des nanostructures de l'arséniure de gallium

## Résumé:

Dans ce présent travail, nous avons étudié le phénomène de l'interaction électron-matière, en élaborant un modèle numérique basé sur la méthode Monte Carlo et la technique Cathodoluminescence (CL), pour étudier une hétérostructure de la famille d' $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  à un seul puits quantique et à plusieurs puits quantiques à l'échelle de nanomètre.

La procédure de calcul utilisée dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons dans la matière, et l'influence des paramètres du faisceau électronique (le nombre des électrons  $N_{el}$  et l'énergie d'accélération  $E_0$ ), ainsi que des paramètres physiques du matériau (la longueur de diffusion  $L_D$ , la largeur du puits quantique et la barrière de potentiel  $d$  et la fraction molaire  $x$ ), et le phénomène de confinement électronique, et aussi leur influence sur l'intensité du signal CL.

Nos résultats sont comparés avec ceux de l'expérience trouvés dans la littérature, ainsi que d'autres résultats théoriques, et ils sont en bon accord, ce qui nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique, il est capable de bien caractériser les nanostructures à puits quantiques, et même déterminer les paramètres responsables à la résolution de l'image CL.

**Mots Clés :** Interaction électron-matière, Cathodoluminescence, Simulation Monte Carlo, Hétérostructure,  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , Puits quantique, confinement, Longueur de diffusion.