

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

**UNIVERSITÉ MENTOURI CONSTANTINE  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :  
Série :

# **THÈSE**

Présentée pour obtenir le diplôme de

**DOCTORAT D'ETAT**

en

**Physique du Solide**

par

**Mohammed LEDRA**

**Simulation Monté Carlo du contraste de recombinaison  
des défauts étendus dans les semi-conducteurs**

Soutenue le 24 / 06 /2006 devant le jury d'examen:

<b>Président:</b>	<b>S. ACHOUR</b>	<b>Prof. Université de Constantine</b>
<b>Rapporteur:</b>	<b>N. TABET</b>	<b>Prof. K. F. U. P. M., Arabie Saoudite</b>
<b>Examineurs:</b>	<b>S. SAHLI</b>	<b>Prof. Université de Constantine</b>
	<b>N. SENGOUGA</b>	<b>Prof. Université de Biskra</b>
	<b>A. BELGHACHI</b>	<b>Prof. Centre Universitaire de Bechar</b>
	<b>D. E. MEKKI</b>	<b>Prof. Université de Annaba</b>

## **REMERCIEMENTS**

Je tiens à remercier tout d'abord mon encadreur le Professeur Nouar TABET qui a dirigé ce travail. Grâce à ces conseils toujours surs et son soutien amical et fraternel, il m'a beaucoup apporté et a pris une part considérable dans la réalisation de ce travail. Il m'a accordé une grande confiance dont je le remercie de tout cœur. Je tiens à le remercier aussi pour son accueil chaleureux qui m'a été réservé durant mes deux visites à l'université K.F.U.P.M. (Dhahran, Arabie Saoudite).

Je remercie K.F.U.P.M. (Dhahran, Arabie Saoudite) de m'avoir accueilli et l'université de Biskra d'avoir financé mes deux visites dans le cadre des stages de courtes durées.

Je remercie le Professeur Slimane ACHOUR d'avoir accepté de présider le jury de thèse.

Je remercie le Professeur S. SAHLI, le Professeur N. SENGOUGA, le Professeur A. BELGHACHI et le Professeur D. E. MEKKI d'avoir accepté de juger ce travail

Je tiens à remercier le Docteur A. MEGHEZZI qui a mis à ma disposition un bureau et les micro-ordinateurs qui m'ont aidé à réaliser ce travail. Je lui dois mes remerciements les plus sincères.

Et une amicale pensée à tous ceux qui ne sont pas cités.

**A la mémoire de mes parents.**

**A ma femme, mes enfants, mes  
frères et sœurs et à tous ceux qui  
me sont proches.**

# SOMMAIRE

<b><u>INTRDUCTION GENERALE</u></b>	1
<b><u>I- LA TECHNIQUE EBIC ET L'ANALYSE DE CONTRASTE DE RECOMBINAISON DES DEFAUTS ETENDUS DANS LES SEMI-CONDUCTEURS</u></b>	
I-1. INTRODUCTION	4
I-2. INTERACTION ELECTRON-MATIERE	5
I-2. 1. INTRODUCTION	5
I-2. 2. PROFONDEUR DE PENETRATION	6
I-2. 3. FONCTION DE DISSIPATION D'ENERGIE NORMALISEE	9
I-2. 3. 1. MODELE DE KANAYA ET OKAYAMA	9
I-2. 3. 2. MODELE DE EVERHART ET HOFF	13
I-2. 3. 3. MODELE DE KYSER	13
I-2. 4. GENERATION DE PAIRES ELECTRON TROU	14
I-2. 4. 1. ENERGIE DE FORMATION DE PAIRES	14
I-2. 4. 2. FONCTION DE GENERATION	15
I-3. TECHNIQUE EBIC	19
I-3. 1. PRINCIPE	19
I-3. 2. RECOMBINAISON DE PORTEURS	21
I-3. 2. 1. RECOMBINAISON SPONTANÉE	21
I-3. 2. 2. RECOMBINAISON SUR DÉFAUT	21
I-3. 3. COLLECTE DE PORTEURS	21
I-3. 3. 1. OBSERVATION EN REGIME PERMANENT	21
I-3. 3. 2. NIVEAU D'INJECTION	22
I-4. MODELISATION DU SIGNAL EBIC	23
I-4. 1. COURANT COLLECTÉ DANS UN CRISTAL PARFAIT	23
I-4. 2. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT	28

I-4. 2. 1. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT DE FORME GEOMETRIQUE QUELCONQUE	28
I-4. 2. 2. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT PONCTUEL	31
I-4. 2. 3 COURANT COLLECTÉ EN PRESENCE D'UNE DISLOCATION PERPENDICULAIRE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY	35

## **II- SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN ABSENCE DE DÉFAUT DANS UN SEMI-CONDUCTEUR**

II-1. INTRODUCTION	45
II-2. SIMULATION DE MONTE CARLO DES TRAJECTOIRES ELECTRONIQUES DANS UN SOLIDE	45
II-3. SIMULATION MONTE CARLO DE LA DISSIPATION D'ÉNERGIE	52
II-4. SIMULATION MONTE CARLO DE LA FONCTION DE GENERATION DES PAIRES ELECTRON TROU DANS LES SEMI-CONDUCTEURS	55
II-5. SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN ABSENCE DE DEFAUT DANS UN SEMI-CONDUCTEUR	56
II-6. L'INFLUENCE DES DIFFERENTS PARAMETRES DE SIMULATION SUR LE COURANT EBIC EN ABSENCE DE DEFAUT	62
II-6. 1. L'INFLUENCE DU NOMBRE D'ÉLECTRONS INCIDENTS $N_e$	62
II-6. 2. L'INFLUENCE DE LA LONGURUR D'ETAPE $\Delta S$	63
II-6. 3. L'INFLUENCE DU NOMBRE TOTAT D'ETAPES NSTT	64
II-7. CONCLUSION	68

**III SIMULATION MONTE CARLO DU CONTRASTE EBIC D'UNE DISLOCATION  
NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY**

III-1. INTRODUCTION	70
III-2. SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN PRESENCE D'UN DEFAUT QUELCONQUE DANS UN SEMI-CONDUCTEUR	70
III-3. SIMULATION MONTE CARLO DU CONTRASTE EBIC D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY	73
III-3. 1. ALGORITHME DE SIMULATION	73
III-3. 2. PROFIL DE CONTRASTE	74
III- 4. VARIATION DU CONTRASTE EBIC MAXIMUM D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY EN FONCTION DES DIFFERENTS PARAMETRES PHYSIQUES	77
III-4. 1. VARIATION EN FONCTION DE L'ENERGIE INCIDENTE	77
III-4. 2. VARIATION EN FONCTION DE LA LONGUEUR DE DIFFUSION À L'INTERIEUR DE LA DISLOCATION	83
III-4. 2. 1. LE VOLUME DE GENERATION EST À L'INTERIEUR DE LA DISLOCATION	83
III-4. 2. 1. LA DISLOCATION EST À L'INTERIEUR DU VOLUME DE GENERATION	86
III-4. 3. VARIATION EN FONCTION DU RAYON DE LA DISLOCATION	88
III-4. 3. 1. CAS $L' \neq 0$	88
III-4. 3. 2. CAS $L'=0$	93
III-5 CONCLUSION	95
CONCLUSION GENERALE	97
REFERENCES	100



## **SOMMAIRE**

## **INTRODUCTION GENERALE**

**CHAPITRE I**  
**LA TECHNIQUE EBIC ET L'ANALYSE DE CONTRASTE DE**  
**RECOMBINAISON DES DEFAUTS ETENDUS DANS LES**  
**SEMICONDUCTEURS**

**CHAPITRE II**  
**SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC**  
**EN ABSENCE DE DÉFAUT DANS UN SEMICONDUCTEUR**

**CHAPITRE III**

**SIMULATION MONTE CARLO DU CONTRASTE EBIC  
D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE  
D'UN CONTACT SCHOTTKY**

## **CONCLUSION GENERALE**

## **REFERENCES**

## **REMERCIEMENTS**

## **INTRODUCTION GENERALE**

Les défauts (joints de grains, précipités, dislocations,...) contrôlent de nombreuses propriétés électriques des matériaux semi-conducteurs. Ils contribuent en général à la diffusion des porteurs et leur recombinaison. La présence des défauts réduit la mobilité des porteurs majoritaires et la durée de vie des porteurs minoritaires. Il en résulte une limitation importante des performances des dispositifs technologiques tels que les cellules solaires, les photodétecteurs et les transistors bipolaires (Réduction de la rapidité des porteurs et abaissement du rendement)

La technique EBIC (Electron Beam Induced Current) est largement utilisée pour la mesure des paramètres phénoménologiques caractérisant la recombinaison des porteurs sur un défaut (Wilshaw et al [1], Sieber et al [2], Kittler et al [3], Yakimov [4], Pandelov et al [5], Chen et al [6], Yakimov [7],....etc.).

La recombinaison des porteurs sur les défauts conduit à un abaissement de courant. Il en résulte une formation d'un contraste sombre sur l'image EBIC. Pour analyser ce contraste, il faut résoudre l'équation de continuité qui gouverne la diffusion des porteurs dans le dispositif utilisé qui peut être une jonction p-n ou un contact Schottky. La résolution analytique de l'équation de continuité est souvent impossible à cause des difficultés mathématiques.

Pour surmonter ces difficultés, des simplifications sont souvent nécessaires. Donolato [8] a publié le premier modèle mathématique complet du contraste EBIC des défauts. Depuis, plusieurs auteurs (Donolato et al [9], Marek [10]) ont utilisé l'approche suggérée par ce modèle pour analyser le contraste des différents défauts. Cette approche consiste à calculer analytiquement la densité des porteurs minoritaires en excès pour un matériau parfait puis l'effet du défaut est traité par des méthodes de perturbation comme l'approximation de Born. Le contraste devient une fonction linéaire de la force de recombinaison. Cette approche explique bien certaines propriétés du contraste mais elle est valide seulement pour les défauts dont la force de recombinaison est suffisamment faible.

Il existe d'autres modèles où les auteurs (Zook [11], Donolato [12]) trouvent la densité des porteurs en excès par un calcul analytique exact puis traitent l'effet du défaut par des conditions de limites supplémentaires dans la solution de l'équation de continuité. La solution est obtenue par des intégrales qui sont évaluées numériquement et le contraste n'est pas une fonction linéaire de la force de recombinaison.

Dans une première approche simplifiée, certains auteurs (Donolato [13], Pasemann [14] et Marek [15]) considèrent les dislocations et les joints de grains comme des distributions unidimensionnelles et bidimensionnelles de défauts ponctuels respectivement. Par la suite Donolato [16] et Pasemann [17] considèrent la dislocation comme un cylindre de rayon fini. Donolato [16] adopte une approximation de premier ordre pour le calcul de la densité des porteurs en excès tandis que Pasemann [17] adopte un calcul exact mais il suppose une génération uniforme dont le volume de génération est une sphère tangente à la surface d'un contact Schottky ou une jonction p-n.

La simulation Monte Carlo est une alternative pour effectuer une analyse plus réaliste du contraste de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs: (Stemmer [18], Tabet et al [19], Tabet [20]). Dans la référence [20], le contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky a été étudié. Un accord a été obtenu entre les résultats simulés et ceux obtenus par les modèles théoriques en ce qui concerne la variation du contraste en fonction de l'énergie des électrons incidents et la force de recombinaison. Mais les valeurs absolues du contraste EBIC obtenues par simulation sont trois fois plus grandes que celles de la théorie. Dans cette étude nous avons développé un nouvel algorithme de simulation de Monte Carlo qui donne des valeurs simulées du contraste EBIC en accord avec celles obtenues par les modèles analytiques pour une dislocation à faible force de recombinaison.

Nous présentons dans le chapitre I 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 EBIC et les modèles analytiques permettant l'analyse quantitative de

contraste EBIC des défauts étendus dans les semi-conducteurs et en particulier le contraste EBIC d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky.

L'algorithme de la méthode de Monte Carlo que nous avons développé pour simuler les trajectoires électroniques, la dissipation d'énergie, la fonction de génération des porteurs et le courant EBIC dans un semi-conducteur en absence de défaut ainsi que l'effet des différents paramètres de simulation sur ce dernier tels que le nombre d'électrons, la longueur d'étape et le nombre d'étapes sont présentés dans le chapitre II.

Nous exposons dans le chapitre III, l'algorithme de simulation par la méthode de Monte Carlo du courant EBIC en présence d'un défaut quelconque dans un semiconducteur ensuite nous présentons et nous comparons les résultats simulés du contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky avec ceux obtenus par les approches analytiques.

# **I- LA TECHNIQUE EBIC ET L'ANALYSE DE CONTRASTE DE RECOMBINAISON DES DEFAUTS ETENDUS DANS LES SEMICONDUCTEURS**

## **I-1. INTRODUCTION**

La microscopie électronique à balayage en mode de courant induit présente l'intérêt d'offrir un grand nombre d'informations différentes, provenant de l'interaction du faisceau d'électrons avec l'échantillon. Tout d'abord utilisés pour la caractérisation géométrique des surfaces, les divers modes d'observations aujourd'hui connus (électrons secondaires, électrons rétro diffusés,...) se sont développés rapidement.

C'est en 1958 que Everhart fait la première observation en microscopie électronique à balayage en mode de courant induit sur un dispositif à semi-conducteur. Le sigle anglais EBIC (Electron Beam Induced Current ou en français courant induit par faisceau d'électrons) est alors consacré.

Initialement, cette technique était surtout mise en œuvre afin d'imager les défauts électriquement actifs et déterminer la valeur de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en volume: Wu et al [21], Akamatsu et al [22], Leamy [23],...etc. Actuellement, elle est également exploitée pour la recombinaison des porteurs sur un défaut. Les travaux théoriques sur le pouvoir de recombinaison des défauts de Donolato [8] renforcent l'intérêt de la technique en permettant une approche quantitative des phénomènes.

Plusieurs travaux ont été publiés récemment concernant le contraste EBIC des défauts étendus dans les semi-conducteurs : Pandelov et al [5] et Chen et al [6] (joints de grains), Yakimov [4, 7] (dislocations)

Dans ce chapitre, nous exposerons brièvement un rappel théorique concernant l'interaction électron matière et les différents modèles théoriques décrivant la profondeur de pénétration des électrons incidents dans les solides, la dissipation

d'énergie, la génération des paires électron trou dans les semi-conducteurs, les principes de la technique EBIC et les modèles analytiques qui nous permettent, lors de notre étude, l'analyse quantitative de contraste EBIC des défauts étendus dans les semi-conducteurs et en particulier le contraste EBIC d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky.

## **I-2. INTERACTION ELECTRON-MATIERE**

### **I-2. 1. INTRODUCTION**

Lorsqu'un électron pénètre dans un matériau solide, il subit essentiellement deux types de collisions:

Les collisions élastiques avec les noyaux atomiques provoquant des déviations successives des trajectoires électroniques. En pratique, on appelle électrons rétro diffusés, tous les électrons incidents qui par suite de collisions successives quittent le solide irradié après un certain parcours. Ce phénomène de rétro diffusion est responsable de l'élargissement latéral du faisceau électronique initialement focalisé en une sonde de quelques dizaines d'Angstrom de diamètre. Cet élargissement peut atteindre quelques microns et est une fonction croissante de l'énergie du faisceau incident et du numéro atomique du matériau. Il constitue une limitation inévitable de la résolution spatiale de technique basées sur l'excitation par faisceau électronique (EBIC, CL, microanalyse X,.....).

Les collisions inélastiques avec les électrons de cœur ou de valence des atomes du solide provoquant une dissipation d'énergie. Cette énergie dissipée donne naissance à plusieurs phénomènes: électrons secondaires d'énergie faible (<50ev), spectre des raies caractéristiques utilisé en microanalyse X, "Bremsstrahlung" mis à profit dans les tubes de rayons X, l'émission AUGER, création des paires électron trou dans les semi-conducteurs.

En résumé, les collisions élastiques avec les noyaux atomiques sont responsables de la forme en zigzag des trajectoires des électrons dans le matériau tandis que les collisions inélastiques provoquent une dissipation d'énergie.

La description des phénomènes accompagnant la pénétration des électrons dans les solides a fait l'objet de plusieurs études. On trouve dans l'article de Kanaya et Okayama [25] les références des principales publications sur le sujet. Ces travaux ont permis d'établir des expressions analytiques semi empiriques décrivant la profondeur de pénétration des électrons, la dissipation d'énergie, la rétro diffusion,... Nous exposerons dans ce qui suit les résultats essentiels.

## **I-2. 2. PROFONDEUR DE PENETRATION**

La profondeur de pénétration maximum R ou parcours entier peut être calculée en intégrant la perte d'énergie due aux collisions électroniques entre les valeurs limites de l'énergie  $E_0$  et 0:

$$R(\text{cm}) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{(dE/ds)} \quad (\text{I-1})$$

$dE/ds$  est exprimée par la loi de Bethe [26] (cité dans Newbury et al [27]):

$$\frac{dE}{ds} (\text{keV/cm}) = -7.85 \times 10^4 \left( \frac{\rho \cdot Z}{A \cdot E} \right) \cdot \ln \left( \frac{1.166E}{J} \right) \quad (\text{I-2})$$

Z est le nombre atomique,  $\rho(\text{g/cm}^3)$  est la densité volumique, A(g) est la masse atomique du matériau, E (keV) est l'énergie moyenne à travers la distance ds.

J est le potentiel moyen d'excitation. Il caractérise l'ensemble des interactions inélastiques. Il varie avec Z suivant une expression souvent utilisée pour  $Z > 25$  (Shimizu et al [28]):

$$J(\text{keV}) = 11.5 \cdot 10^{-3} \cdot Z \quad (\text{I-3})$$

Une autre formule semi empirique est exprimée sous la forme: (Newbury et al [27])

$$J(\text{keV}) = (9.76Z + 58.5Z^{-0.19}) \cdot 10^{-3} \quad (\text{I-4})$$

Le parcours entier est exprimé par de nombreux auteurs comme suit (Yacobi et al [29]):

$$R = \left( \frac{K}{\rho} \right) \cdot E_0^\alpha \quad (\text{I-5})$$

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

Kyser [30] a utilisé dans son étude sur l'émission X dans le cuivre une expression donnée sous la forme:

$$R(\text{cm}) = \frac{2.56 \cdot 10^{-3}}{\rho(\text{g/cm}^3)} \left( \frac{E_0(\text{keV})}{30} \right)^{1.68} \quad (\text{I-6})$$

Kanaya et Okayama [25] ont établi une relation valable pour des énergies  $E_0$  comprise entre 10 et 1000 keV exprimée sous la forme :

$$R(\text{cm}) = \frac{2.76 \cdot 10^{-6}}{\rho(\text{g/cm}^3)} \cdot \frac{A(\text{g})}{Z^{8/9}} \cdot (E_0(\text{keV}))^{5/3} \quad (\text{I-7})$$

Everhart et Hoff [31] 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:

$$R(\text{cm}) = \frac{3.98 \cdot 10^{-6}}{\rho(\text{g/cm}^3)} (E_0(\text{keV}))^{1.75} \quad (\text{I-8})$$

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.

Nous avons rapporté sur la figure I-1 les différents résultats du parcours entiers R en fonction de l'énergie incidente  $E_0$  pour quelques matériaux (Si, ZnS et GaAs), obtenus par les modèles de Kanaya et Okayama [25] et Everhart et Hoff [31]

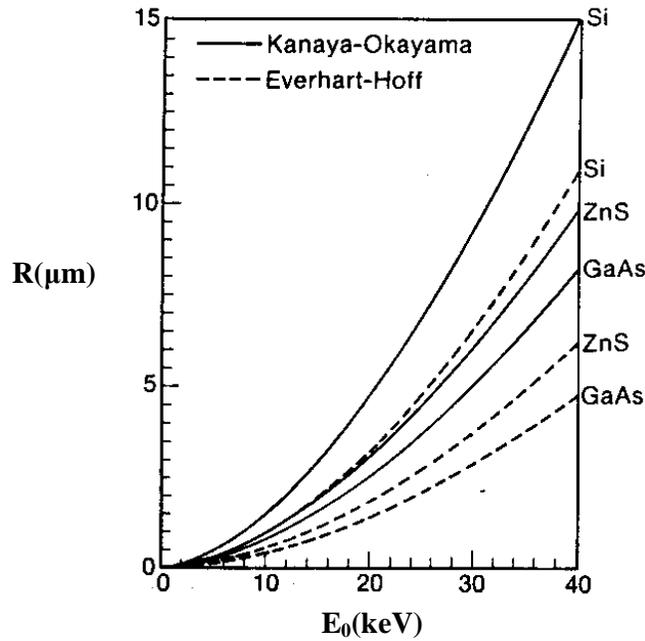


Figure I-1. Variation du parcours entier R en fonction de l'énergie du faisceau incident dans Si, GaAs et ZnS selon les modèles de Kanaya et Okayama [25] et Everhart et Hoff [31] (D'après Yacobi et al [29]).

On peut noter que les valeurs des parcours entiers obtenues par le modèle de Everhart et Hoff [31] sont inférieures à celles obtenues par le modèle de Kanaya et Okayama [25] et que l'écart entre deux courbes d'un même matériau croît avec l'énergie  $E_0$ .

Gruen [32] a été le premier à définir un parcours caractérisant la dissipation d'énergie des électrons dans l'air appelé parcours pratique. Ce parcours correspond à l'intersection avec l'axe de la profondeur de pénétration de l'extrapolation de la partie sensiblement linéaire de la dissipation d'énergie (figure I-2). Une expression valable pour des valeurs d'énergie comprise entre 5 et 25 keV est donnée comme suit:

$$R_G (\text{g/cm}^2) = 4.57 \cdot 10^{-6} \cdot (E_0 (\text{keV}))^{1.75} \quad (\text{I-9})$$

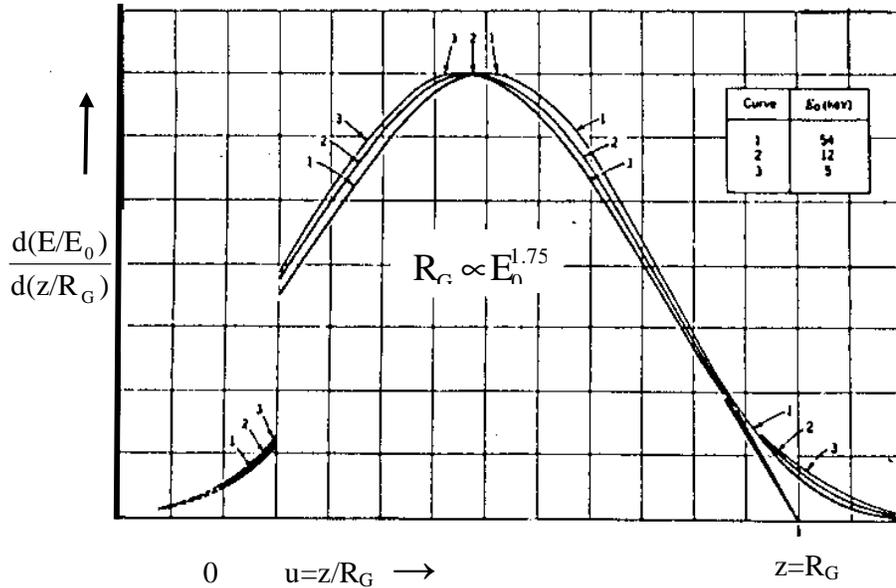


Figure I-2. Dissipation d'énergie en fonction de la pénétration d'après Gruen [32], rapportée par Everhart et Hoff [31]

On remarque sur la figure I-2 que la fonction de dissipation d'énergie en fonction de la pénétration est pratiquement invariante lorsque l'énergie d'incidence  $E_0$  varie et ceci si la profondeur est normalisée à  $R_G$  et l'énergie dissipée est normalisée à  $E_0$ . Cette conclusion de Gruen [32] peut être généralisée aux matériaux solides (D'après Everhart et Hoff [31])

Plusieurs expressions ont été proposées pour définir la fonction de dissipation d'énergie normalisée. On cite dans ce qui suit trois modèles essentiels.

### **I-2. 3. FONCTION DE DISSIPATION D'ENERGIE NORMALISEE**

#### **I-2. 3. 1. MODELE DE KANAYA ET OKAYAMA**

La fonction de dissipation d'énergie normalisée  $\Phi(z/R)$  (appelée "depth-dose function") est donnée par la relation:

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

$E_A$  est l'énergie absorbée au bout du parcours normalisée  $u = z/R$ . Elle s'exprime sous la forme : (Kanaya et Okayama [25])

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

$E_T$  et  $E_B$  sont les énergies des électrons transmis et rétro diffusés respectivement.  
 $\eta_T$  et  $\eta_B$  sont les fractions d'électrons transmis et rétro diffusés respectivement.

Des relations de  $E_T$ ,  $\eta_T$  et  $\eta_B$  exprimées en fonction de la profondeur de pénétration normalisée  $u$ , ont été établies par Kanaya et Okayama [25].

L'expression de  $E_B$  a été exprimée par Sternglass [33] sous la forme:

$$E_B = (0.45 + 2 \cdot 10^{-3} \cdot Z) \cdot E_0 \quad (\text{I-12})$$

Une autre expression a été proposée par Fitting et al [34] sous la forme:

$$E_B = 0.5 \cdot (1 + \eta_B) \cdot E_0 \quad (\text{I-13})$$

Nous avons regroupé dans le tableau I-1 quelques valeurs moyennes de  $\eta_B$  pour différents matériaux dans le domaine des énergies comprises entre 2 et 10 keV :

Eléments	Be	C	Al	Si	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	Cu	Ge	Ag	Au
$\eta_B$	0.06	0.10	0.18				0.32		0.42	0.45

Tableau I-1. Valeurs moyennes du coefficient de rétro diffusion (D'après Fitting et al [35])

La fonction de dissipation d'énergie normalisée  $\Phi(u)$  en fonction du parcours normalisée  $u = z/R$  obtenue par Kanaya et Okayama [25] s'écrit comme suit:

$$\Phi(u) = (1-u)^{-2/5} \cdot \left( \frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5} \right) \cdot \exp\left(\frac{\gamma \cdot u}{u-1}\right) + \left( \frac{E_B}{E_0} \right) \cdot \left( \frac{2.28 \cdot \gamma}{(1-u)^2} \right) \cdot (2^{-5/6} - (1-u)^{5/6}) \cdot \exp\left(\frac{1.9 \cdot \gamma \cdot u}{u-1}\right) \quad (I-14)$$

où

$$\gamma = 0.187 \cdot Z^{2/3} \quad (I-15)$$

La figure I-3 montre la variation de  $\Phi(u)$  en fonction de du parcours normalisée  $u = z/R$  pour quelques matériaux. Les pics correspondants aux maximums de  $\Phi(u)$  ont les valeurs: 0.56, 0.38, 0.24, 0.18, 0.14 et 0.12 pour le carbone, l'aluminium, le cuivre, l'argent, l'or et l'uranium respectivement.

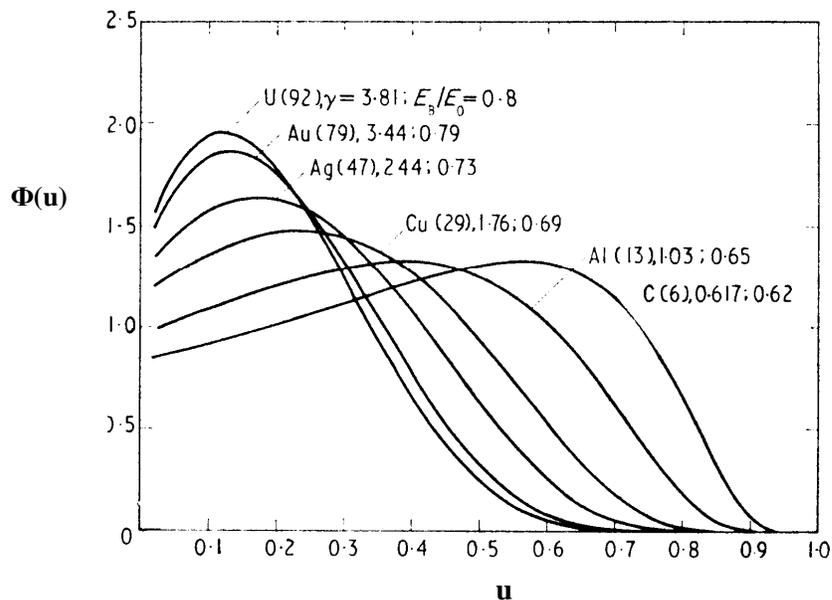


Figure I-3. La variation de la fonction de dissipation d'énergie normalisée  $\Phi(u)$  en fonction de la profondeur normalisée  $u$  (D'après Kanaya et Okayama [25])

La figure I-4 compare les résultats de la fonction de dissipation d'énergie par unité de profondeur massique  $dE_A/d(\rho z)$  en fonction de la profondeur massique  $\rho z$  pour le cuivre et l'or à différentes énergies incidentes  $E_0$  obtenus par le modèle analytique de Kanaya et Okayama [25] avec ceux obtenus expérimentalement par Cosslett et Thomas [36].

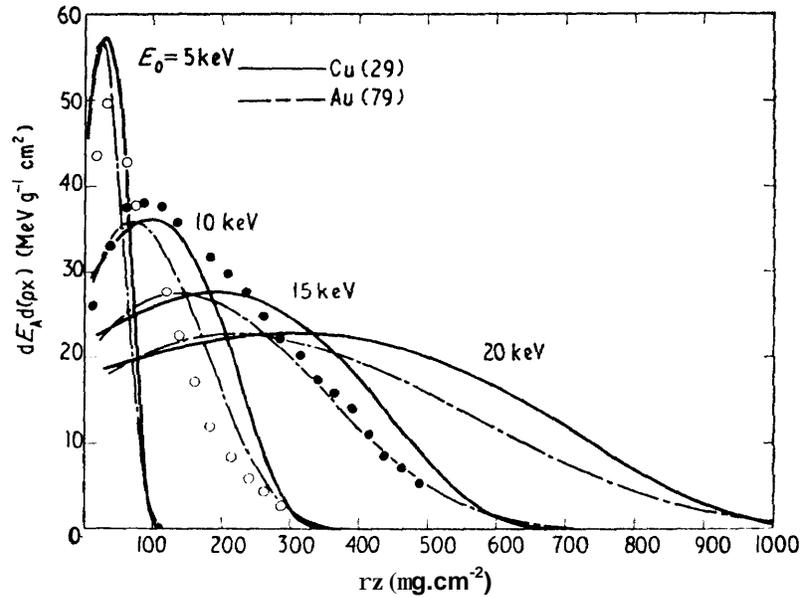


Figure I-4. Comparaison des résultats de  $dE_A/d(\rho z)$  en fonction de  $\rho z$  dans le cuivre et l'or à différentes énergies incidentes obtenus selon le modèle de Kanaya et Okayama [25] avec ceux obtenus expérimentalement par Cosslett et Thomas [36] pour le cuivre (•) à 15 keV et l'or (o) à 10 keV. (D'après Kanaya et Okayama [25])

On note que les pics des courbes se déplacent vers la droite et leurs valeurs diminuent quand l'énergie incidente augmente en plus leur valeurs expérimentales sont supérieures à celles calculées théoriquement. Par exemple la valeur expérimentale du pic du cuivre à 15 keV est approximativement égale à celle calculée théoriquement par le modèle de Kanaya et Okayama [25] à 10 keV.

### **I-2. 3. 2. MODELE DE EVERHART ET HOFF**

Everhart et Hoff [31] ont défini la fonction de dissipation d'énergie  $\Phi(u)$  en fonction de  $u$  sous la forme:

$$\Phi(u) = (1 - f) \cdot \lambda(u) \quad (\text{I-16})$$

où  $f$  est la fraction moyenne d'énergie perdue par rétro diffusion, elle est défini:

$$f = \eta_B \cdot E_B / E_0 \quad (\text{I-17})$$

Pour le cas de  $\text{SiO}_2$ , les auteurs ont obtenu  $\lambda(u)$  sous une forme polynomiale:

$$\lambda(u) = 0.6 + 6.21 \cdot u - 12.4 \cdot u^2 + 5.69 \cdot u^3 \quad (\text{I-18})$$

On remarque que  $\lambda(u)$  est sans dimension et que l'origine de l'axe des profondeurs de pénétration normalisées  $u$  est prise à la surface de la cible. D'après Napchan [37], cette expression est valable pour les matériaux ayant un numéro atomique  $Z$  compris entre 10 et 15 et pour une énergie comprise entre 5 et 25 keV.

### **I-2. 3. 3. MODELE DE KYSER**

Kyser [30] a proposé grâce à une étude de l'émission X dans le cuivre une expression de  $\Phi(u)$  sous une forme gaussienne modifiée qui s'écrit comme suit:

$$\Phi(u) = A \cdot \exp\left[-\left(\frac{u - u_0}{\Delta u}\right)^2\right] - B \cdot \exp\left(-\frac{b \cdot u}{u_0}\right) \quad (\text{I-19})$$

où les constantes ont les valeurs suivantes:  $B/A=0.4$ ,  $b=4$ ,  $\Delta u=0.35$  et  $u_0=0.125$ . Ces mêmes constantes ont été également utilisées par Wu et Wittry [21] pour le cas du GaAs, par Tabet et al [24] et Mekki et al [38] pour le cas du germanium.

## **I-2. 4. GENERATION DE PAIRES ELECTRON TROU**

La génération des paires électron trou est l'un des phénomènes physiques accompagnant la pénétration des électrons dans un semi-conducteur. Leurs collecte à l'aide d'une diode p-n ou un contact Schottky constitue le courant induit EBIC.

### **I-2. 4. 1. ENERGIE DE FORMATION DE PAIRES**

Le nombre de paires électron trou créées par électron incident ou agent ionisant (photon, particule  $\alpha$ ,....etc.) est défini comme suit : (Klein [39])

$$N_p = \frac{E_A}{E_{ch}} \quad (I-20)$$

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

$E_{ch}$  est l'énergie de formation d'une paire électron trou, elle s'écrit sous la forme : (Klein [40])

$$E_{ch} = \frac{14}{5} \cdot E_g + r \cdot \mathbf{h} \cdot \omega_R \quad (I-21)$$

où  $E_g$  correspond au gap du semi-conducteur,  $r$  est le nombre moyen de phonons optiques généré. Il correspond au rapport  $\lambda_R/\lambda_I$ .  $\lambda_R$  et  $\lambda_I$  sont les libres parcours moyens associés aux processus de génération de phonons et d'ionisation respectivement.

La figure I-5 montre la dépendance de  $E_{ch}$  en fonction de  $E_g$ . Les valeurs expérimentales sont bien ajustées à l'aide de  $r\mathbf{h}\omega_R$  ( $r\mathbf{h}\omega_R$  utilisé comme paramètre d'ajustement est quasi constant :  $0.5 \leq r\mathbf{h}\omega_R \text{ (eV)} \leq 1$ ). L'évaluation de  $E_{ch}$  dans le silicium et le germanium a fait l'objet de plusieurs travaux (Klein [39, 40], Zulliger [41] et les références incluses). A  $T=300 \text{ °K}$ , Klein [39,40] propose  $E_{ch}=2.80 \text{ eV}$  pour le germanium et  $E_{ch}= 3.6 \text{ eV}$  pour le silicium tandis que Zulliger [41] propose des

valeurs de  $E_{eh}$  comprises entre 2.38 eV et 2.81 eV pour le germanium et entre 3.26 eV et 3.85 eV pour le silicium.

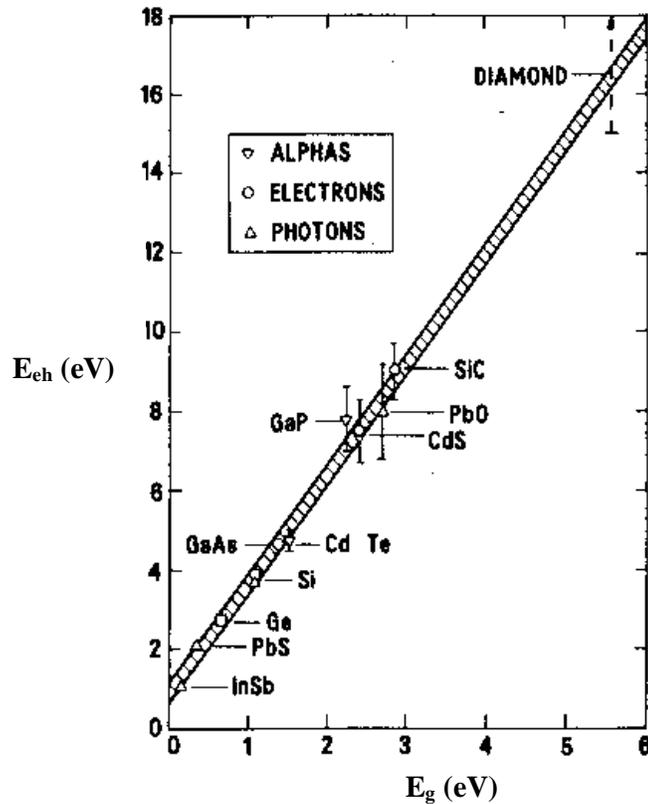


Figure I-5. Variation de l'énergie de création de paires électron trou  $E_{ch}$  en fonction de l'énergie de gap  $E_g$  pour différents semi-conducteurs et différentes sources d'excitations (D'après Klein [40])

## I-2. 4. 2. FONCTION DE GENERATION

Le système auquel nous nous sommes attachés est à trois dimensions. Quand le faisceau électronique est normal à la surface de la cible, la fonction  $g(\vec{r})$  qui décrit la distribution des paires électron trou par unité de temps et de volume ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) au point repéré par  $\vec{r}(x, y, z)$  possède une symétrie de révolution autour de la direction du faisceau électronique incident, donc  $g$  sera une fonction des variables  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  et  $z$ , soit  $g(r, z)$ .

Dans certains cas pratique on n'a pas besoin de connaître la forme explicite de  $g(r, z)$  mais seulement de sa projection  $g(z)$  sur un plan (xy par exemple). C'est le cas où on a une symétrie cylindrique autour du faisceau incident, à une profondeur  $z$  les porteurs générés sont tous collectés avec la même probabilité.  $g(z)$  s'écrit alors:

$$g(z) = \int_0^{\infty} g(r, z) \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{I-22})$$

$g(z)$  correspond au nombre de paires électron trou créées par unité de profondeur et unité de temps ( $\text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) à la profondeur  $z$  de la surface bombardée. La fonction  $g(z)$  peut être reliée à la perte d'énergie par la relation :

$$g(z) = \frac{I_p}{q \cdot E_{eh}} \cdot \frac{dE_A}{dz} \quad (\text{I-23})$$

$I_p$  est l'intensité du faisceau incident,  $q$  la charge élémentaire et  $E_A$  l'énergie absorbée. Compte tenu de la relation I-10 on obtient :

$$g(z) = \frac{I_p}{q \cdot E_{eh}} \cdot \frac{E_0}{R} \cdot \Phi(z/R) \quad (\text{I-24})$$

La figure I-6 représente la variation de la fonction de génération  $g(z)$  d'un électron moyen incident en fonction de la profondeur  $z$  à différentes énergies incidentes dans le silicium. L'expression de la fonction de dissipation d'énergie normalisée,  $\Phi(u)$ , utilisée est celle définie par Everhart et Hoff [31]. On note que les valeurs de  $g(z)$  diminuent au voisinage de la surface ( $z = 0$ ) et les pics des courbes diminuent et se déplacent vers les grandes profondeurs quand l'énergie augmente. Cette répartition en volume est la plus souvent considérée.

Par souci de simplification, Pasemann [17] a considéré une génération uniforme dans une sphère de diamètre  $R$  où  $R$  est la profondeur de pénétration maximale. L'utilisation de la fonction de génération obtenue par simulation Monte Carlo des trajectoires électroniques constitue une alternative qui a été adoptée par

certain auteurs pour le calcul du contraste EBIC des défauts étendus dans les semi-conducteurs: Tabet et al [19], Tabet [20], Napchan [37], Joy [42], .....

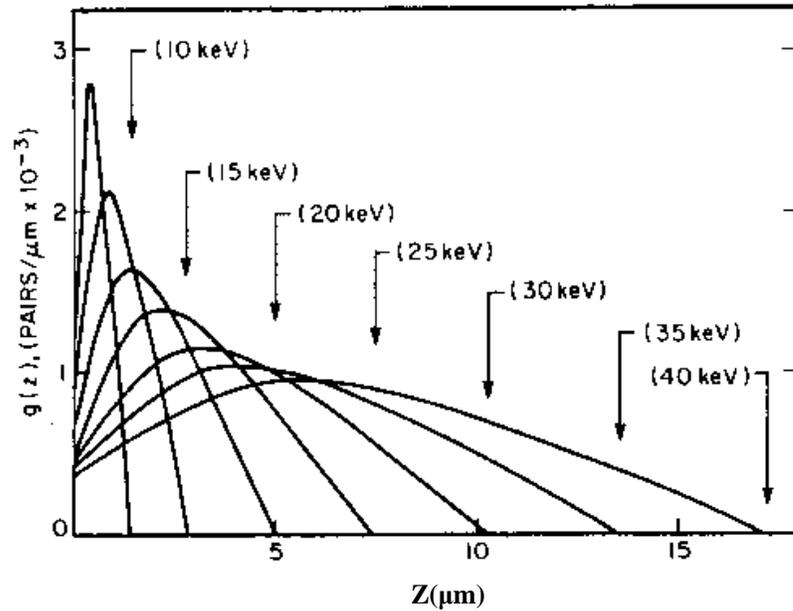


Figure I-6 La variation de la fonction de génération  $g(z)$  d'un électron moyen incident en fonction de la profondeur à différentes énergies incidentes dans le silicium (D'après Leamy [23]).

On définit le taux de génération total  $G_0$  ( $s^{-1}$ ) correspondant au nombre de paires créées par unité de temps dans le solide irradié par :

$$G_0 = \int_0^{\infty} g(z) \cdot dz \quad (I-25)$$

Soit compte tenu de la relation I-23 et la perte des électrons rétrodiffusés :

$$G_0 = \frac{I_p}{q} \cdot \frac{(1-f) \cdot E_0}{E_{eh}} \quad (I-26)$$

Typiquement, pour un faisceau d'énergie  $E_0=30$  keV et un courant de sonde  $I_p=0.1$  nA, le taux de génération total  $G_0$  pour le silicium et le germanium est de l'ordre de  $10^{12}$  paires par seconde.

La connaissance de la distribution radiale des paires électron trou dans le volume est souvent nécessaire pour l'analyse du contraste EBIC en présence de défaut. Donolato [43] propose une expression  $g(r, z, R)$  pour analyser le contraste EBIC associé aux dislocations dans les couches minces semi-conductrices sous la forme suivante:

$$g(r, z, R) = \frac{G_0}{R} \cdot \frac{\lambda(z/R)}{2 \cdot \pi \cdot \sigma^2(z/R)} \cdot \exp\left[-\frac{r^2}{2 \cdot \sigma^2(z/R)}\right] \quad (\text{I-27})$$

$G_0$  est le taux de génération total,  $R$  est la profondeur de pénétration maximale et  $\lambda(z/R)$  représente la fonction universelle indépendante de l'énergie incidente, elle est exprimée par Everhart et Hoff [31] sous une forme polynomiale (I-18).

La déviation  $\sigma(z/R)$  de cette distribution est donnée par la relation suivante :

$$\sigma(z/R) = 0.36 \cdot d^2 + 0.11 \cdot z^3/R \quad (\text{I-28})$$

$d$  est le diamètre du faisceau électronique incident.

Nous avons présenté les modèles utilisés dans l'étude de l'interaction des électrons incidents avec la matière. Le choix du modèle et la définition de la profondeur de pénétration sont importants car ils interviennent en microscopie électronique à balayage en mode de courant induit pour les calculs de contraste EBIC des défauts étendus dans les semi-conducteurs.

On va présenter dans ce qui suit les principes de la microscopie électronique à balayage en mode de courant induit qui est une technique largement utilisée pour la caractérisation de matériaux semi-conducteurs et les modèles théoriques nécessaires pour l'analyse quantitative du signal collecté.

### I-3. TECHNIQUE EBIC

Cette technique permet d'étudier le comportement des porteurs de charge dans un semi-conducteur au niveau des dispositifs et des défauts.

#### I-3. 1. 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 électron trou. Le mécanisme de cette génération de porteurs est schématisé sur la figure I-7. 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

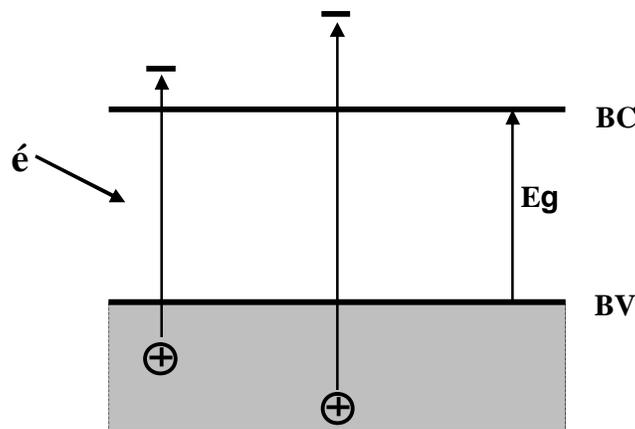


Figure I- 7. Mécanisme de génération de porteurs

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. Dans ce but on réalise une jonction p-n ou une diode Schottky qui assurera la collecte des charges. Cette collecte est obtenue par un champ électrique interne  $\vec{E}$  établi sous la surface de l'échantillon dans une zone appelée zone de charge d'espace ou zone déserte. La largeur  $Z_D$  de la zone déserte est inversement proportionnelle à la racine carrée de la concentration du dopant  $N_d$  ( $Z_D \propto 1/\sqrt{N_d}$ ). Ainsi, les paires électron trou qui sont générées dans la zone de charge d'espace ou qui atteignent grâce à leur diffusion les limites de celle-ci, seront séparées : les porteurs majoritaires seront repoussés et évacués par le contact ohmique tandis que les porteurs minoritaires seront attirés vers l'interface du contact Schottky et pourront être collectés constituant ainsi le courant EBIC (figure I-8)

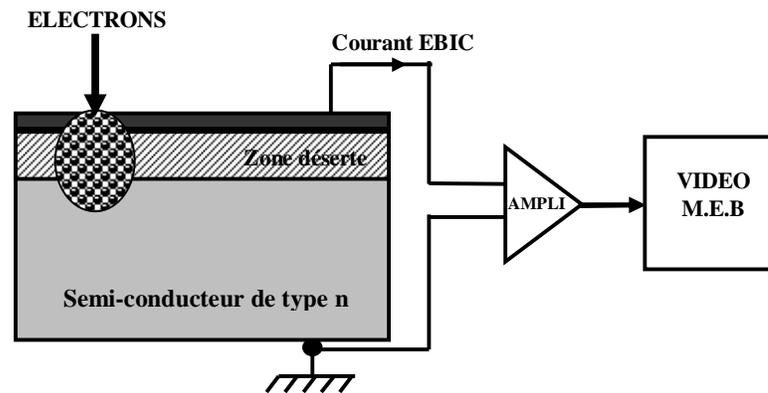


Figure I-8. Schéma de principe de la technique EBIC

Le courant EBIC est donc proportionnel au nombre de porteurs minoritaires qui traversent, sans se recombiner, la distance qui sépare l'interface du contact Schottky et le point où ils sont générés. C'est donc une caractéristique locale du processus de recombinaison des porteurs.

Un amplificateur courant tension transforme le courant EBIC en tension. Celle-ci module le wehnelt de l'écran vidéo du microscope électronique. La synchronisation du balayage du faisceau incident et de celui de l'écran permet d'obtenir des images EBIC de la surface de l'échantillon. Les zones qui sont le siège d'une forte recombinaison (dislocation, précipité, joints de grains, ..... ) correspondent à une baisse locale du courant EBIC et donnent lieu à un contraste.

## **I-3. 2. RECOMBINAISON DE PORTEURS**

### **I-3. 2. 1. RECOMBINAISON SPONTANÉE**

Si un électron de la bande de conduction descend dans la bande de valence, on dit que la recombinaison est spontanée ou bande à bande. Cette recombinaison est moins probable dans les semi-conducteurs à gap indirect (Si, Ge) que dans les semi-conducteurs à gap direct (GaAs). En effet, ce type de recombinaison, nécessite l'interaction de trois particules simultanément à cause du gap indirect.

### **I-3. 2. 2. RECOMBINAISON SUR DÉFAUT**

Certains défauts font apparaître des états d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. Les porteurs minoritaires créés par le faisceau peuvent alors se piéger sur ces états d'énergie pour s'annihiler ensuite avec des porteurs majoritaires. La recombinaison de porteurs de charges est ainsi souvent liée à l'existence de pièges électroniques associés à des défauts.

## **I-3. 3. COLLECTE DE PORTEURS**

### **I-3. 3. 1. OBSERVATION EN REGIME PERMANENT**

Les porteurs générés sous bombardement électronique diffusent et se recombinent. En régime stationnaire, la distribution de la densité de porteurs minoritaires en excès  $\Delta p(\vec{r})$  est une fonction de la position  $\vec{r}$  et elle est solution de l'équation de continuité qui dépend des conditions aux limites.

Si on considère une génération uniforme à l'intérieure d'une sphère de diamètre R, la densité de porteurs en excès, en régime stationnaire est donnée par :

$$\Delta p = \frac{G_0 \cdot \tau}{\left( \frac{\pi \cdot R^3}{6} \right)} \quad (\text{I-29})$$

$(\pi R^3/6)$  est le volume de la sphère de génération de diamètre R.

$G_0$  est le nombre total de porteurs minoritaires générés par seconde.

$\tau$  est la durée de vie des porteurs minoritaires dans le matériau massif.

Dans le cas d'un échantillon semi infini imposant une densité nulle de porteurs en surface, entraîne des nouvelles conditions aux limites qui modifient la distribution homogène donnée par la relation précédente. Des études (Berz et al [44] cité dans Tabet [45]) ont montrée que les porteurs se répartissent de façon inhomogène dans le volume. Ils atteignent une densité maximale  $\Delta p_{\max}$  telle que :

$$\Delta p_{\max} \cong \frac{G_0}{s \cdot \pi \cdot D \cdot R} \quad (\text{I-30})$$

$s = 1$  ou  $2$  selon que la vitesse de recombinaison en surface est nulle ou infinie respectivement.  $G_0$  est le taux de génération total ( $s^{-1}$ ),  $D$  le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires,  $R$  la profondeur de génération.

A titre indicatif, on peut donner un ordre de grandeur pour le germanium :

Pour  $E_0 = 30$  keV,  $I_p = 10^{-10}$  A,  $R \approx 5 \cdot 10^{-4}$  cm,  $E_{\text{ch}} = 2.8$  eV,  $D \approx 50$  cm<sup>2</sup>/s, on obtient une valeur de  $\Delta p_{\max} \approx 10^{14}$  cm<sup>-3</sup>.

### **I-3. 3. 2. NIVEAU D'INJECTION**

Le niveau d'injection, c'est à dire la concentration des porteurs générés par rapport à la concentration des porteurs à l'équilibre est un paramètre important dans les études en microscopie électronique à balayage en mode de courant induit car il détermine les phénomènes physiques à considérer.

Sous bombardement électronique, les concentrations des électrons et des trous, respectivement  $n$  et  $p$  dans les bandes de conduction et de valence, seront telles que :

$$n = n_0 + \Delta n, \quad p = p_0 + \Delta p, \quad n_0 \times p_0 = n_i^2$$

$n_i$  est la concentration intrinsèque des porteurs,  $n_0$  et  $p_0$  la concentration à l'équilibre des électrons et des trous respectivement,  $\Delta n$  et  $\Delta p$  la concentration des électrons et des trous excédentaires.

Pour un matériau dopé n ( $10^{14} < N_d \text{ (at/cm}^3\text{)} < 10^{18}$ ),  $n_0 = N_d$  concentration de donneurs. Les conditions de faible injection requises pour l'observation seront satisfaites si :  $\Delta n = \Delta p \ll n_0$ . Dans ces conditions seule la concentration en porteurs minoritaires est affectée.

#### **I-4. MODELISATION DU SIGNAL EBIC**

Dans cette partie nous considérons d'abord le courant collecté dans un cristal parfait (courant de volume) puis nous aborderons l'étude du contraste EBIC associé à divers types de défauts.

##### **I-4. 1. COURANT COLLECTÉ DANS UN CRISTAL PARFAIT**

Considérons la géométrie de la figure I-8. Le calcul du courant collecté nécessite la résolution de l'équation de continuité régissant le transport des porteurs générés. Celle-ci s'écrit, en régime permanent (condition réalisée par un balayage suffisamment lent de la sonde devant la durée de vie des porteurs) sous la forme :

$$\text{div} \vec{J} - g(\vec{r}, R) + U = 0 \quad (\text{I-31})$$

$\vec{J}$  est le flux des porteurs,  $g(\vec{r}, R)$  la fonction de génération ( $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

$U$  est le taux de recombinaison, c'est à dire le nombre de porteurs qui se recombinent par unité de temps dans l'unité de volume. A faible injection ( $\Delta p \ll n_0$ ), la recombinaison des paires générées est contrôlée par celle des porteurs minoritaires (trous). La théorie de Shockley et Read [46] permet d'exprimer le taux de recombinaison  $U$  sous la forme :

$$U = \frac{\Delta p}{\tau} \quad (\text{I-32})$$

$\tau$  est la durée de vie des porteurs minoritaires (trous).

L'équation I-31 peut s'écrire donc sous la forme :

$$\text{div} \mathbf{J} - g(\mathbf{r}, R) + \frac{\Delta p}{\tau} = 0 \quad (\text{I-33})$$

Les effets du champ électrique dans la zone de charge d'espace associé au contact Schottky introduisent une composante d'entraînement dans l'expression du flux  $\mathbf{J}$  en plus de la composante de diffusion :

$$\mathbf{J} = -D \cdot \text{grad} \Delta p + \mu_p \cdot \Delta p \cdot \mathbf{E} \quad (\text{I-34})$$

En négligeant la présence de la zone déserte (son influence ne se fait réellement sentir que lorsque celle-ci devient comparable à la profondeur de pénétration des électrons incidents (c'est à dire à basses tensions, pour des matériaux présentant de faible taux de dopage) ou lorsque l'on polarise en inverse la jonction, ce qui élargit cette zone), ainsi que celle de la couche métallique, l'équation de continuité à trois dimensions (I-33) s'écrit alors sous la forme :

$$D \cdot \nabla^2 \Delta p + g(\mathbf{r}, R) - \frac{\Delta p}{\tau} = 0 \quad (\text{I-35})$$

D'autre part, l'hypothèse d'une vitesse de recombinaison infinie en surface, c'est à dire que tout porteur arrivant en surface est collecté, conduit à la condition aux limites suivantes :

$$\Delta p|_{z=0} = 0 \quad (\text{I-36})$$

Le courant collecté par la jonction est calculé en intégrant la densité de courant des porteurs minoritaires à la surface  $z = 0$  de l'échantillon. Il est donné par la relation suivante :

$$I_0 = q \cdot D \cdot \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int \left. \frac{\partial \Delta p}{\partial z} \right|_{z=0} dx dy \quad (\text{I-37})$$

En se basant sur l'approximation de Born, Donolato [8] montre que cette expression après intégration sur  $x$  et  $y$  se réduit à :

$$I_0 = q \cdot \int_{\mathbf{v}} g(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{I-38})$$

où  $L$  est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires qui est reliée à  $\tau$  par la relation :

$$L = \sqrt{D \cdot \tau} \quad (\text{I-39})$$

Le terme  $\exp(-z/L)$  peut être interprété comme étant la probabilité de collecte d'un porteur généré à la profondeur  $z$ .

Donolato [8] donne l'expression du courant collecté dans un cristal parfait pour un taux de génération  $g_0$  ( $\text{cm}^{-3}$ ) constant à l'intérieur de la sphère de génération de diamètre  $R$  comme suit:

$$I_0(R) = q \cdot 4\pi \cdot L^3 g_0 \left[ \frac{R}{2L} \cdot \cosh\left(\frac{R}{2L}\right) - \sinh\left(\frac{R}{2L}\right) \right] \cdot \exp\left(-\frac{R}{2L}\right) \quad (\text{I-40})$$

On définit l'efficacité de collecte comme étant le rapport du courant collecté  $I_0$  au courant généré  $I_G$  :

$$\eta = \frac{I_0}{I_G} \quad (\text{I-41})$$

$$I_G = q \cdot \int_V g(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{I-42})$$

On peut noter que  $\eta$  dépend de deux facteurs :

- l'énergie des électrons incidents, par le biais de la fonction de génération.
- la longueur de diffusion  $L$  qui intervient explicitement dans la probabilité de collecte des porteurs.

La figure I-9 donne la variation de l'efficacité de collecte en fonction de  $R/2L$ . Cette courbe est obtenue en utilisant l'équation I-40 pour une longueur de diffusion  $L = 3.162 \mu\text{m}$ . On constate qu'elle varie très lentement pour les valeurs  $R/2L < 0.1$  et converge vers la valeur  $\eta=1$  à l'origine ( $R/2L = 0 : R=0$ ).

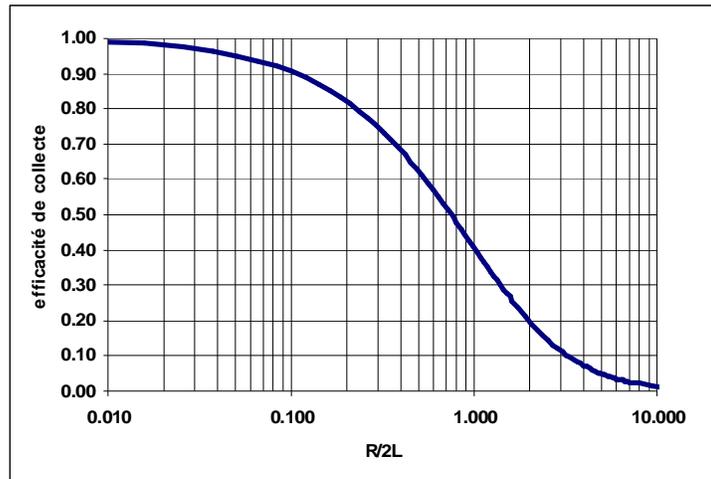


Figure I-9. Variation de l'efficacité de collecte en fonction de  $R/2L$  en utilisant l'équation I-40.

Dans le cas d'un matériau sans défaut cristallin, il est donc possible en faisant quelques hypothèses expérimentales d'évaluer le courant induit par faisceau électronique (EBIC). Ces calculs permettent d'évaluer la longueur de diffusion dans le matériau à partir du courant collecté à condition que  $0.1 < R/2L < 10$ .

La figure I-10 donne la variation de l'efficacité de collecte  $\eta$  en fonction de l'énergie du faisceau incident pour différentes valeurs de longueur de diffusion. Ces courbes ont été obtenues par Donolato [47], en utilisant la fonction de génération proposée par Everhart et Hoff [31].

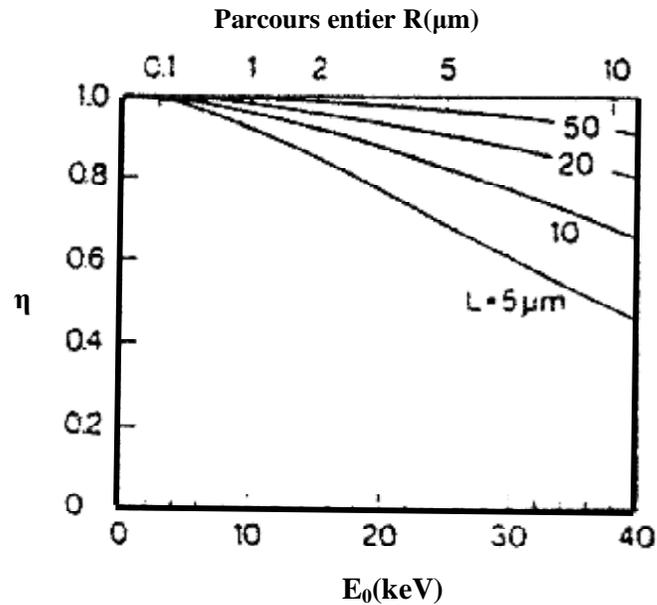


Figure I-10. Variation de l'efficacité de collecte  $\eta$  de diode Schottky en fonction de l'énergie des électrons incidents pour différentes longueurs de diffusion  $L$ . (D'après Donolato [47]).

On remarque que les courbes obtenues convergent vers la valeur de  $\eta = 1$  à l'origine ( $E_0 = 0$ ). Cela résulte essentiellement du fait que la zone déserte et les pertes dans la couche métallique ont été négligées.

Nous aborderons dans ce qui suit le calcul du courant EBIC collecté en présence d'un défaut. Cela nous permettra d'exprimer le profil de contraste EBIC, c'est à dire, la variation de l'intensité du courant collecté en fonction de la distance du défaut. En plus des informations caractérisant le matériau parfait telles que la longueur de diffusion des porteurs, le signal détecté en présence de défaut contient des informations caractérisant la recombinaison des porteurs sur le défaut.

## I-4. 2. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT

Nous considérons l'approche générale qui permet d'exprimer formellement le courant EBIC collecté en présence d'un défaut de géométrie quelconque puis nous nous intéresserons aux cas particuliers d'un défaut quasi ponctuel et d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'une diode.

### I-4. 2. 1. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT DE FORME GEOMETRIQUE QUELCONQUE

Considérons un semi-conducteur homogène semi infini de type n limité par une surface  $z = 0$  bombardé par un faisceau électronique. Les porteurs minoritaires générés (trous) ont une durée de vie  $\tau$  et un coefficient de diffusion  $D$ . Un défaut de géométrie quelconque est localisée sous la surface par un espace  $F$ . Les porteurs minoritaires à l'intérieur de  $F$  sont caractérisés par une durée de vie  $\tau'$  (figure I-11).

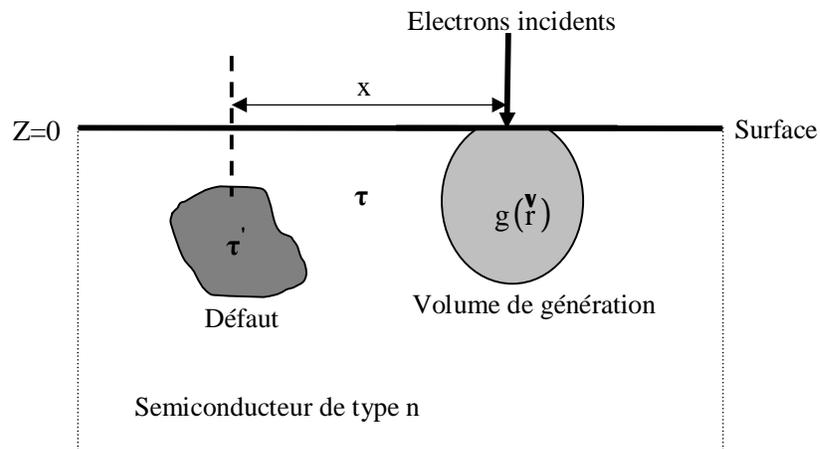


Figure I-11. Schéma illustré du modèle employé pour le calcul du courant EBIC collecté en présence d'un défaut de forme géométrique quelconque.

La présence d'un défaut de forme arbitraire augmente localement la recombinaison des porteurs. La résolution de l'équation de continuité, dans ce cas, est impossible sans faire de simplifications. Donolato [8] considère les hypothèses suivantes :

- La couche métallique et la zone déserte du contact Schottky sont négligées.
- La vitesse de recombinaison en surface est infinie. Il en découle la condition aux limites :  $\Delta p(\mathbf{r})|_{z=0} = 0$
- Le taux d'injection est faible.
- Le volume du défaut, F, est caractérisé par une durée de vie des porteurs  $\tau'$  inférieure à celle du cristal parfait  $\tau$  et un coefficient D identique à celui du matériau parfait.

Tous les modèles théoriques publiés négligent la différence entre les valeurs du coefficient D dans le défaut et le cristal parfait. Cette approximation est justifiée par la faible dépendance de la mobilité des porteurs et par conséquent du coefficient de diffusion D en fonction de la concentration de défauts ponctuels comparée à celle de la durée de vie.

Le problème consiste à calculer le courant collecté total à la surface en fonction de la distance x entre le défaut et le faisceau incident. Pour cela il faut d'abord déterminer la densité  $\Delta p(\mathbf{r})$  qui obéit à l'équation de continuité suivante (Donolato [8]):

$$D \cdot \nabla^2 \Delta p(\mathbf{r}) - \frac{\Delta p(\mathbf{r})}{\tau} = -g(\mathbf{r}) + \left[ \frac{1}{\tau(\mathbf{r})} - \frac{1}{\tau} \right] \cdot e(\mathbf{r}) \cdot \Delta p(\mathbf{r}) \quad (\text{I-43})$$

où  $e(\mathbf{r})$  est défini comme suit :

$$e(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in F \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{I-44})$$

La densité  $\Delta p(\mathbf{r})$  est obtenue par la méthode des fonctions de Green sous la forme: (Donolato [8])

$$\Delta p(\mathbf{r}) = \frac{1}{D} \cdot \int_{\mathbf{v}} g(\mathbf{r}') \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' - \int_F \gamma(\mathbf{r}') \cdot \Delta p(\mathbf{r}') \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad (\text{I-45})$$

avec

$$\gamma(\mathbf{r}') = \frac{1}{D} \cdot \left[ \frac{1}{\tau'(\mathbf{r}')} - \frac{1}{\tau} \right] \quad (\text{I-46})$$

$\gamma$  est appelé "force du défaut".  $\tau'$  et  $\tau$  sont les durées de vie à l'intérieur et à l'extérieur du défaut respectivement.

En se basant sur la méthode des images, Donolato [8] exprime la fonction de Green,  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , sous la forme:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4 \cdot \pi} \cdot \left[ \frac{\exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/L)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{\exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|/L)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \right] \quad (\text{I-47})$$

$\mathbf{r}'$  et  $\mathbf{r}''$  étant les vecteurs de position du point source et son image par rapport au plan de la surface ( $z=0$ ), respectivement.

En première approximation (approximation de Born), Donolato [8] a exprimé  $\Delta p(\mathbf{r})$  sous la forme:

$$\Delta p(\mathbf{r}) = \Delta p_0(\mathbf{r}) - \int_F \Delta p_0(\mathbf{r}') \cdot \gamma(\mathbf{r}') \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad (\text{I-48})$$

où  $\Delta p_0(\mathbf{r})$  est la valeur initiale de la densité en absence de défaut, elle est exprimée sous la forme suivante:

$$\Delta p_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{D} \cdot \int_V g(\mathbf{r}') \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad (\text{I-49})$$

Le courant total collecté à la surface ( $z=0$ ) s'écrit comme suit (Donolato [8]):

$$I_{\text{EBIC}} = q \cdot D \cdot \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int \left. \frac{\partial \Delta p(\mathbf{r})}{\partial z} \right|_{z=0} dx dy = I_0 - I^* \quad (\text{I-50})$$

$I_0$  est le courant EBIC en absence de défaut qui s'écrit sous la forme:

$$I_0 = q \cdot \int_V g(\mathbf{r}') \cdot \exp\left(-\frac{z'}{L}\right) \cdot d\mathbf{r}' \quad (\text{I-51})$$

$I^*$  est le courant perdu par recombinaison à l'intérieur du défaut et s'exprime sous la forme suivante:

$$I^* = q \cdot D \cdot \int_F \Delta p_0(\mathbf{r}') \cdot \gamma(\mathbf{r}') \cdot \exp\left(-\frac{z'}{L}\right) \cdot d\mathbf{r}' \quad (\text{I-52})$$

Il faut bien souligner que seuls les défauts à faible activité électrique, c'est à dire donnant lieu à un faible contraste EBIC peuvent être analysés dans l'approximation de Born. Cependant, il est important de noter qu'il est difficile de donner une valeur limite de contraste au delà de laquelle l'approximation de Born perd sa validité. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre consacré aux résultats de simulation. Le contraste EBIC est défini par la relation:

$$C = I^*/I_0 \quad (\text{I-53})$$

C est une fonction des coordonnées du point d'impact du faisceau électronique. Le profil du contraste contient les informations relatives au volume (longueur de diffusion L) et à la recombinaison à l'intérieur du défaut (force du défaut  $\gamma$ ).

Le cas particulier d'un défaut ponctuel localisé en  $\mathbf{r}_0(x_0, y_0, z_0)$  est intéressant à considérer puisqu'un défaut multidimensionnel peut être décrit comme une distribution de défauts ponctuels.

#### **I-4. 2. 2. COURANT COLLECTE EN PRESENCE D'UN DEFAUT PONCTUEL**

Considérons un défaut ponctuel localisé en  $P_0(0, 0, a)$ . Le volume de génération de forme sphérique possède un rayon  $R_S$  et un centre c situé dans le plan xz, dont les coordonnées sont  $(x, 0, R_S)$ , le faisceau électronique bombarde la surface de l'échantillon en  $(x, 0, 0)$ . (Figure I-12)

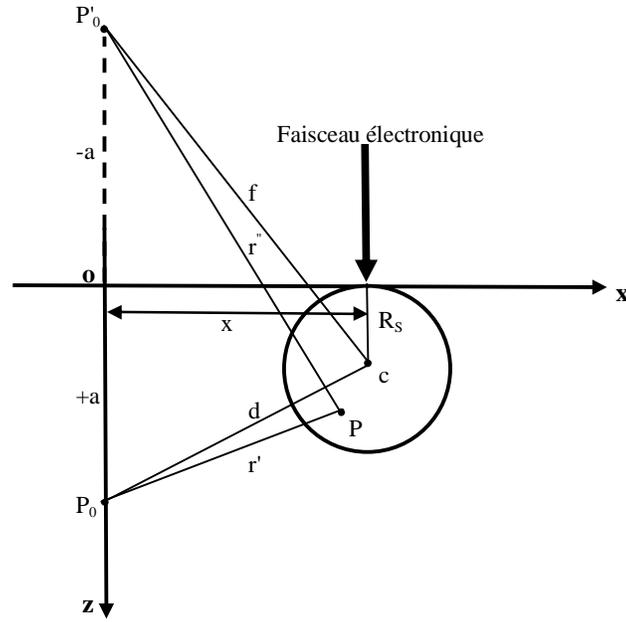


Figure I-12. Schéma illustré du modèle employé pour le calcul du courant EBIC collecté en présence d'un défaut ponctuel.

Donolato [8] pose la force du défaut sous la forme:

$$\gamma(\mathbf{r}) = \bar{\gamma} \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (\text{I-54})$$

où  $\bar{\gamma}$  a la dimension d'une longueur.

Faisant l'approximation d'une génération uniforme dans une sphère de rayon  $R_s$  ( $R_s=R/2$ ),  $R$  étant la pénétration maximum des électrons, Donolato [8] obtient:

$$C(x, R_s) = \frac{\bar{\gamma}}{4 \cdot \pi} \cdot \exp[k \cdot (R_s - a)] \cdot F \quad (\text{I-55})$$

$$F = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\exp(-k \cdot d) - \exp(-k \cdot f)}{d} & \text{si } d \geq R_s \\ \frac{k \cdot (1 + k \cdot R_s) \cdot \exp(-k \cdot R_s) \cdot (1/d) \cdot \sinh(k \cdot d) - \exp(-k \cdot f)}{k \cdot R_s \cdot \cosh(k \cdot R_s) - \sinh(k \cdot R_s)} & \text{si } d \leq R_s \end{array} \right\} \quad (\text{I-56})$$

avec:

$$k = 1/L \quad (I-57)$$

$$d = \sqrt{x^2 + (R_s - a)^2} \quad (I-58)$$

$$f = \sqrt{x^2 + (R_s + a)^2} \quad (I-59)$$

La figure I-13 montre les profils du contraste calculés pour différentes valeurs du parcours entier R (c'est à dire pour différentes tensions d'accélération  $E_0$  des électrons primaires) et une longueur de diffusion  $L=10\mu\text{m}$ , d'un défaut ponctuel situé à une profondeur  $z=a=2\mu\text{m}$ . La figure I-13 montre que les pics ( $C_{\text{max}}$ ) augmentent avec R, ils atteignent un maximum à  $R=2.4\mu\text{m}$  puis ils diminuent, tandis que les largeurs à mi-hauteurs des pics se comportent en inverse.

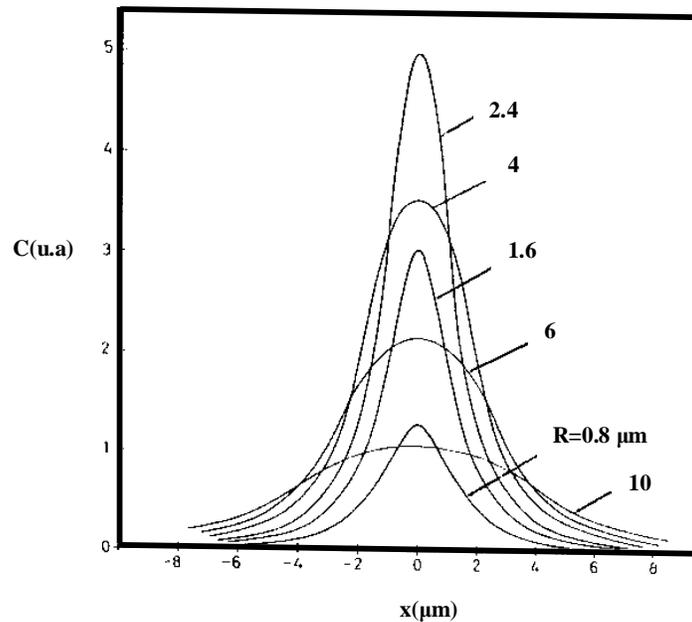


Figure I-13. Profils de contraste EBIC d'un défaut ponctuel situé à une profondeur  $z=a=2\mu\text{m}$  calculés à différents parcours entiers R pour et une longueur de diffusion  $L=10\mu\text{m}$ . (Donolato [8])

La figure I-14 illustre la variation du contraste EBIC maximum  $C_{\max} = C(x=0)$  d'un défaut ponctuel situé à une profondeur  $z=a=2\mu\text{m}$  d'un contact Schottky en fonction du parcours entier  $R$ , pour différentes longueurs de diffusion. On remarque que les courbes possèdent des maximum situés entre  $R=2.4\mu\text{m}$  et  $R=2.6\mu\text{m}$  et que  $C_{\max}$  augmente quand la longueur de diffusion augmente et se sature pour  $L \geq 10\mu\text{m}$ .

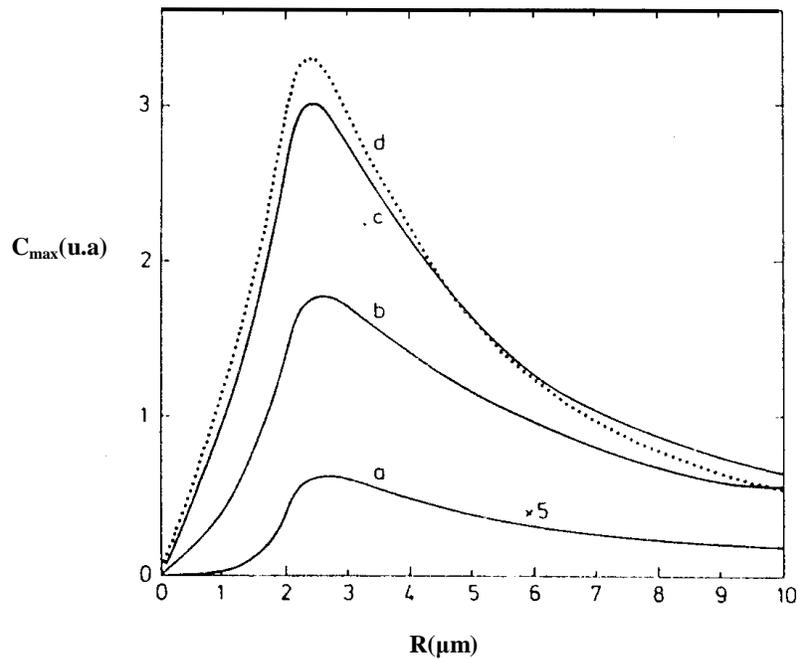


Figure I-14. Courbes de  $C_{\max}$  d'un défaut ponctuel situé à une profondeur  $z=a=2\mu\text{m}$  de la surface d'un contact Schottky en fonction du parcours entier  $R$  pour différentes valeurs de longueur de diffusion: (a)  $L=0.5\mu\text{m}$ , (b)  $L=2\mu\text{m}$ , (c)  $L=10\mu\text{m}$ , (d)  $L=\infty$ .

La figure I-15 montre la variation de la mi-largeur  $W$  (résolution de l'image) correspondante à l'abscisse pour laquelle  $C_{\max}$  diminue de la moitié en fonction du parcours entier  $R$  pour différentes longueurs de diffusion  $L$ . On note que toutes les courbes montrent une tendance similaire pour différentes longueurs de diffusion. Quand  $R$  augmente,  $W$  diminue lentement et atteint un minimum pour  $R \approx 2.1\mu\text{m}$  puis augmente régulièrement avec  $R$ . Les valeurs de  $W$  sont plus grandes pour les valeurs élevées de  $L$  puis deviennent indépendante de  $L$  quand  $L > 10\mu\text{m}$ .

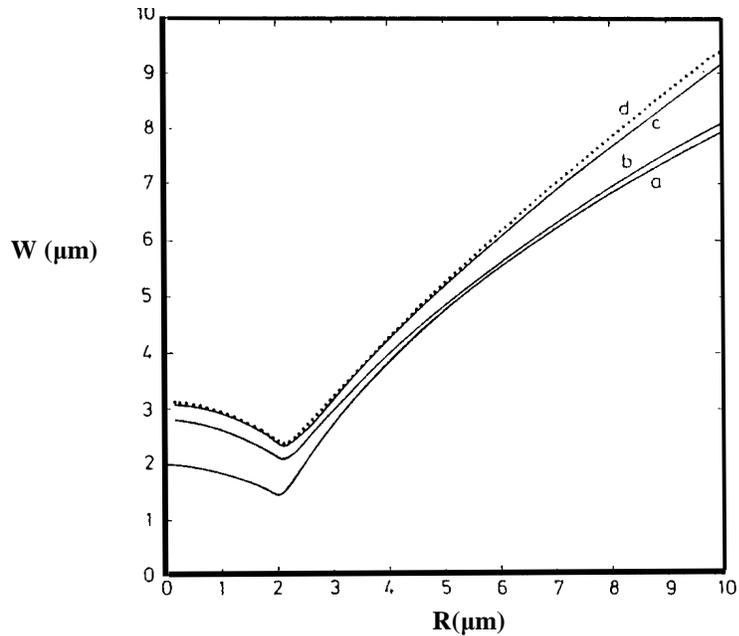


Figure I-15. Variation de la résolution de l'image EBIC d'un défaut ponctuel situé à une profondeur  $z=a=2\mu\text{m}$  d'un contact Schottky en fonction du parcours entiers  $R$  pour différentes longueur de diffusion  $L$ : (a)  $L=0.5\mu\text{m}$ , (b)  $L=2\mu\text{m}$ , (c)  $L=10\mu\text{m}$ , (d)  $L=\infty$ . (Donolato [8])

En conclusion la longueur de diffusion  $L$  influe sur  $W$  (la résolution de l'image EBIC) pour n'importe quelle valeur de  $R$ , mais son influence est plus importante pour les faibles valeurs de  $R$ . Il apparaît que la résolution de l'image EBIC est déterminée par la profondeur  $z=a$  du défaut ponctuel pour les valeurs  $R < a$  mais pour  $R > a$  elle est déterminée par  $R$  et parfaitement indépendante de  $L$ . (Donolato [8])

#### **I-4. 2. 3 COURANT COLLECTÉ EN PRESENCE D'UNE DISLOCATION PERPENDICULAIRE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY**

Nous considérons le modèle de Donolato [13] qui découle directement de son approche (Donolato [8]) exposée dans le paragraphe précédent. Il (Donolato [13]) suppose que la dislocation est une distribution continue de défauts ponctuels sur une ligne semi infinie avec une origine située à la surface. La figure I-16 montre les profils de contraste EBIC calculés pour différentes tensions d'accélération  $E_0$  des

électrons primaires et une longueur de diffusion  $L=10\mu\text{m}$ , d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky dans le silicium.

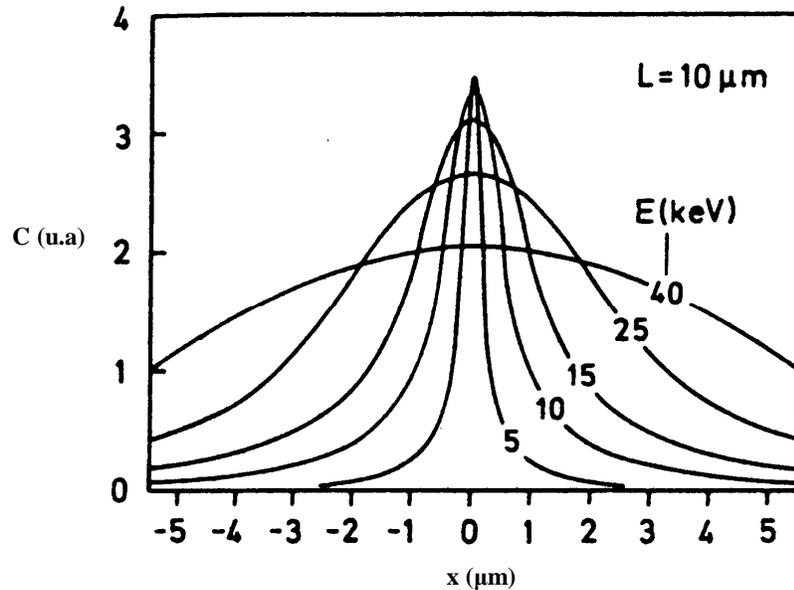


Figure I-16. Profils de contraste EBIC calculés pour différentes énergies du faisceau incident  $E_0$  d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky dans le silicium; la longueur de diffusion  $L=10\mu\text{m}$ . (Donolato [13])

La figure I-16 montre que les pics ( $C_{\text{max}}$ ) des courbes diminuent quand l'énergie du faisceau incident  $E_0$  augmente, tandis que les largeurs à mi-hauteur des pics des profils augmentent avec  $E_0$ .

Les figures I-17 a, b montrent la variation de  $C_{\text{max}}$  et  $W$  des profils de contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $R$ , celui-ci est calculé à l'aide de l'expression de Everhart et Hoff [31]:

$$R(\mu\text{m}) = 0.0171 \cdot E_0^{1.75} (\text{keV}) \quad (\text{I-60})$$

D'après Donolato[13], les résultats de  $W$  et  $C_{\text{max}}$  du contraste EBIC présentés sur la figure I-17 sont valides pour n'importe quel semi-conducteur si la lecture s'effectue en fonction de  $R$ , l'échelle correspondant à l'énergie spécifique le silicium.

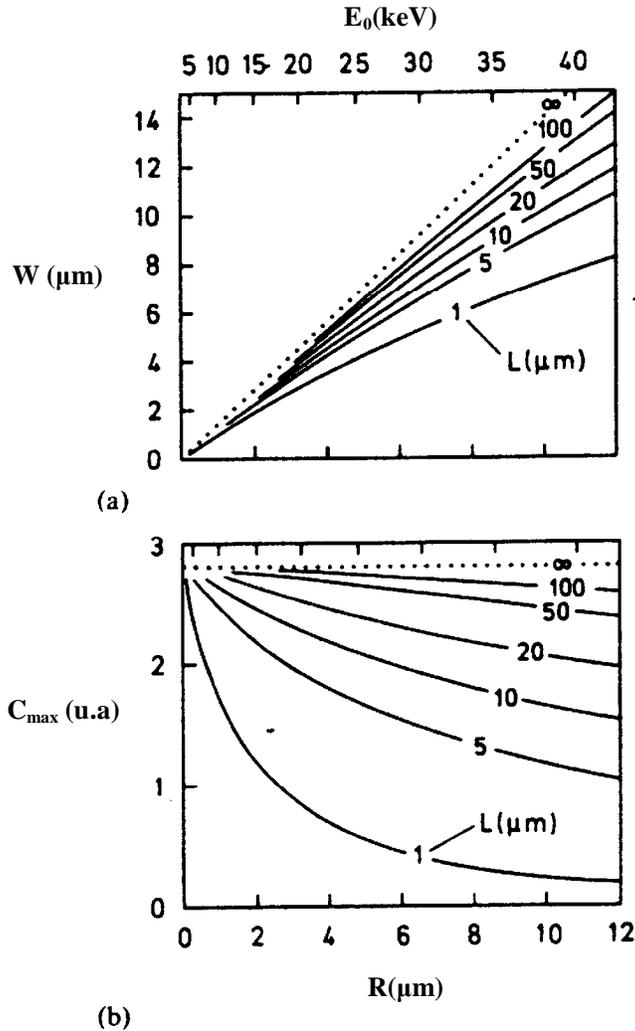


Figure I-17. (a) Résolution de l'image et (b) contraste EBIC maximum d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky en fonction du parcours entier  $R$  pour différentes valeurs de longueurs de diffusions  $L$ . Les axes horizontaux supérieurs donnent les énergies correspondantes pour le silicium. (Donolato [13])

La figure I-17a montre que  $W$  augmente régulièrement avec le parcours entier  $R$  et celui-ci est d'autant plus grande que la longueur de diffusion  $L$  est grande (à  $E_0$  fixe), contrairement au cas du contraste obtenu pour un défaut ponctuel. Dans ce dernier cas, la résolution déduite est quasi indépendante de la longueur de diffusion et est exclusivement déterminée par  $R$ . Dans le cas limite où  $L \rightarrow \infty$ , la résolution de l'image EBIC de la dislocation reste bonne: la valeur asymptotique correspondante est  $W(L \rightarrow \infty, R) \approx 1.40 R$ .

La figure I-17b montre que  $C_{\max}$  diminue quand le parcours entier  $R$  augmente. La diminution devient lente pour les grandes valeurs de la longueur de diffusion  $L$ . Quand  $L \rightarrow \infty$ , le contraste EBIC maximum devient indépendant du parcours entier  $R$ . La figure I-17b montre aussi que pour une valeur donnée de  $R$ , le contraste est d'autant plus grand que la longueur de diffusion est grande.

La supposition de la dislocation comme une ligne c'est à dire un cylindre de rayon nul est commode pour décrire son image EBIC dans des conditions expérimentales usuelles où le parcours entier  $R$  est plus large que le rayon de la dislocation, mais quand le parcours entier  $R$  devient petit par rapport au rayon de la dislocation, par conséquent le volume de génération se trouve à l'intérieur de la dislocation, cette supposition n'est pas valide. Dans ce cas la dislocation doit être traitée autrement.

Donolato [16] se base sur son modèle original (Donolato [8]) en utilisant l'approximation de premier ordre, il considère la dislocation comme un cylindre de rayon fini (figure I-18).

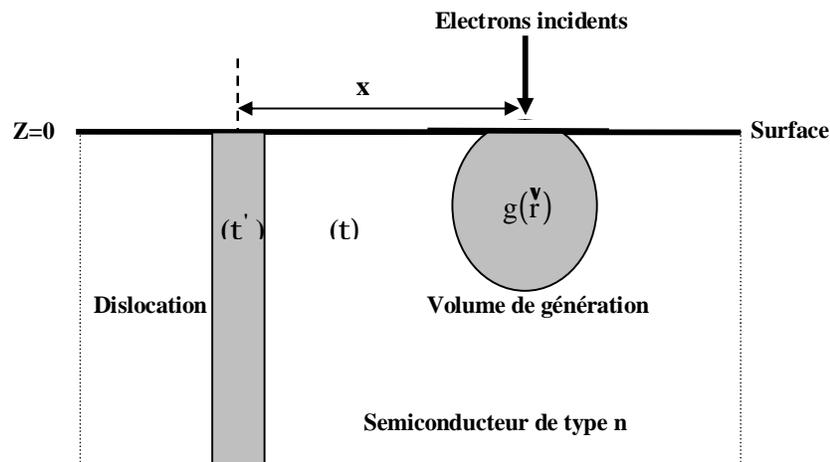


Figure I-18. Schéma illustré du modèle de Donolato[16] employé pour le calcul du courant EBIC collecté en présence d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky.

Le modèle considéré pose les hypothèses suivantes:

- La couche métallique et la zone déserte du contact Schottky sont négligées.
- La dislocation est considérée comme un cylindre de rayon  $r_d$  et de volume  $F$ ; son axe de révolution est dirigé suivant l'axe  $z$ .
- La durée de vie des porteurs à l'intérieur de la dislocation  $\tau'$  est inférieure à celle dans le reste du semi-conducteur ( $\tau$ ).
- La vitesse de recombinaison en surface est infinie, il en découle la condition aux limites :  $\Delta p(z=0) = 0$

Le courant collecté est calculé à l'aide de l'expression I-50, c'est à dire:

$$I_{EBIC} = q \cdot D \cdot \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \left. \frac{\partial \Delta p(\mathbf{r})}{\partial z} \right|_{z=0} dx dy = I_0 - I^* \quad (I-61)$$

Le contraste  $C = I^*/I_0$  du défaut de volume  $F$  dans l'approximation de Born (approximation premier ordre) est donné par Donolato [16] sous la forme:

$$C = \frac{1}{I_0} \cdot \left( \frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right) \cdot \int_F \Delta p_0(\mathbf{r}) \cdot \exp(-z/L) \cdot d\mathbf{r} \quad (I-62)$$

Pour une dislocation perpendiculaire à la surface, le contraste maximum  $C_{max}$  est obtenu quand le faisceau électronique est à l'aplomb de la dislocation. En utilisant les coordonnées cylindriques, l'équation I-62 devient comme suit.

$$C_{max} = \frac{1}{I_0} \cdot \left( \frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right) \cdot \int_0^{r_d} dr \cdot 2\pi \cdot r \cdot \int_0^{\infty} \Delta p_0(r, z) \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \cdot dz \quad (I-63)$$

Le courant  $I_0$  est donné par Donolato [16] sous la forme:

$$I_0 = \int_0^{\infty} dr \cdot 2\pi \cdot dr \cdot \int g(r, z) \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \cdot dz \quad (I-64)$$

Où  $g(r,z)$  est la fonction de génération du faisceau électronique et  $\Delta p_0(r,z)$  obéit à l'équation de diffusion suivante:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( r \cdot \frac{\partial \Delta p_0}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \Delta p_0}{\partial z^2} - \frac{\Delta p_0}{L^2} = -\frac{g(r,z)}{D} \quad (\text{I-65})$$

En utilisant l'approximation d'une fonction de génération de forme Gaussienne de symétrie sphérique, Donolato [16] donne l'expression de  $g(r,z)$  et  $C_{\max}$  sous la forme:

$$g(r,z) = A \cdot \exp\left\{-\left[r^2 + (z-a)^2\right]/b^2\right\} \quad (\text{I-66})$$

$$C_{\max} = \frac{\gamma}{\pi} \cdot \int_0^{\infty} r_d^{-1} \cdot J_1(k \cdot r_d) \cdot \exp\left(-\frac{b^2 \cdot k^2}{4}\right) \cdot \left(1 - \frac{F(b \cdot \mu)}{F(b \cdot \lambda)}\right) \cdot k^{-2} \cdot dk \quad (\text{I-67})$$

Où  $a = 0.3R$ ,  $b^2 = R^2 / 7.5$ ,  $\lambda = 1 / L$ ,  $\mu = (k^2 + \lambda^2)^{1/2}$

$\gamma$  est la force de recombinaison de la dislocation divisée par  $D$ . Elle est donnée par:

$$\gamma = \frac{\pi \cdot r_d^2}{D} \cdot \left(\frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau}\right) \quad (\text{I-68})$$

$J_1$  est la fonction de Bessel du premier ordre, la fonction  $F$  est donnée sous la forme:

$$F(t) = \exp\left[\left(\frac{t}{2} - p\right)^2\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{t}{2} - p\right) \quad (\text{I-69})$$

Où  $p = 0.3 \cdot \sqrt{7.5}$  et  $\operatorname{erfc}$  est le complémentaire de la fonction erreur.

Il est intéressant d'examiner la forme de  $C_{\max}$  quand le rayon de la dislocation tends vers zéro ( $r_d \rightarrow 0$ ), en assumant que  $\tau' \rightarrow 0$  en même temps que la force de recombinaison de la dislocation  $\gamma$  (expression I-68) reste constante. Donolato [16] donne  $C_{\max}(r_d \rightarrow 0)$  sous la forme:

$$C_{\max}^{(0)} = C_{\max} (r_d \rightarrow 0) = \frac{\gamma}{2 \cdot \pi} \int_0^{\infty} \left( 1 - \frac{F(b \cdot \mu)}{F(b \cdot \lambda)} \right) \cdot k^{-1} \cdot dk \cdot \exp\left(-\frac{b^2 \cdot k^2}{4}\right) \quad (\text{I-70})$$

A titre de comparaison, il est utile de calculer  $C_{\max}^{(0)}$  dans le cas d'une génération uniforme où le volume de génération est une sphère tangente à la surface. Donolato [16] considère la dislocation comme une colonne homogène de défauts ponctuels. Il calcule le contraste maximum  $C_{\max}^{(0)}(\alpha)$  d'une dislocation où sa ligne coïncide avec l'axe z en intégrant sur z de 0 à  $\infty$  l'expression du contraste d'un défaut ponctuel situé à une profondeur z de la surface. Il obtient l'expression suivante:

$$C_{\max}^{(0)}(\alpha) = \frac{\gamma}{4 \cdot \pi} \left[ \frac{2 \cdot \text{sh}(\alpha) - (1 + \alpha) \cdot \text{Shi}(2 \cdot \alpha) \cdot \exp(-\alpha)}{\alpha \cdot \text{ch}(\alpha) - \text{sh}(\alpha)} + E_1(2 \cdot \alpha) \cdot [1 - \exp(2 \cdot \alpha)] \right] \quad (\text{I-71})$$

Où  $\alpha = \lambda \cdot R/2$ , Shi(t): sinus hyperbolique intégral et  $E_1(t)$  est l'exponentiel intégrale.

La figure I-19 montre la variation de  $C_{\max}$  en fonction du parcours entier R. La force de recombinaison de la dislocation est prise constante  $\gamma = 0.1\pi$ , la longueur de diffusion  $L = 1 \mu\text{m}$  et différentes valeurs de rayons de dislocation  $r_d$  qui correspondre à différentes valeurs de durée de vies à l'intérieur de la dislocation  $\tau'$  (équation I-68).

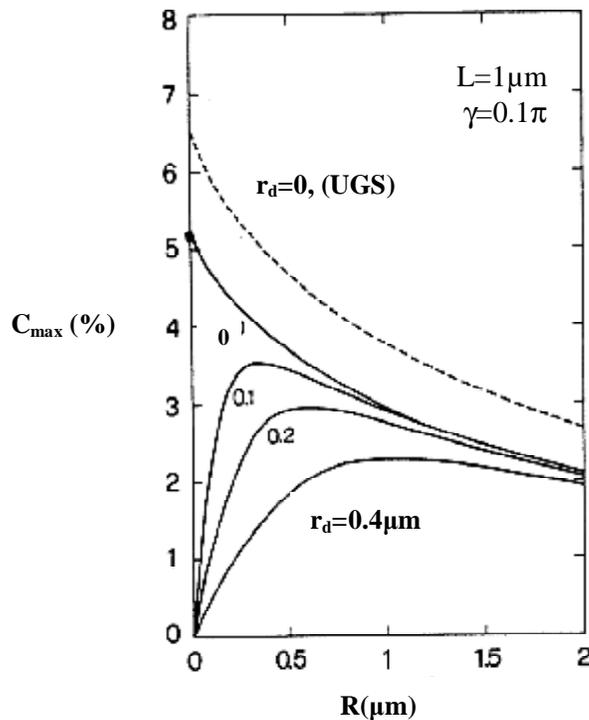


Figure I-19. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du parcours entiers  $R$  pour différents rayons d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky. (Donolato [16])

Les courbes en lignes pleines sont calculées pour différentes valeurs du rayon de dislocation en utilisant l'approximation d'une fonction de génération de forme Gaussienne de symétrie sphérique. La courbe en tiret est calculée pour un rayon de dislocation égal à zéro en utilisant une génération uniforme où la fonction de génération a une forme sphérique (UGS). Les valeurs limites quand  $R \rightarrow 0$  des courbes pour  $r_d = 0$  sont 0.0526 (génération Gaussienne) et 0.0666 (UGS). Les courbes du contraste maximum calculées pour des rayons de dislocation différents de zéro possèdent des maximums et tendent vers zéro quand  $R \rightarrow 0$  tandis que les courbes pour  $r_d = 0$  décroît d'une manière monotone quand  $R$  croit.

Cette analyse adoptée par Donolato [8, 13 et 16] suppose que la dislocation introduit une perturbation négligeable dans la distribution des porteurs en excès (approximation de premier ordre; expression I-52:  $\Delta p = \Delta p_0$ ,  $\Delta p_0$  étant la densité de porteurs en excès en absence de dislocation). En réalité  $\Delta p$  est différent de  $\Delta p_0$ .

Pasemann [17] a adopté un calcul exact pour obtenir le contraste EBIC d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky. Il traite le problème en se basant sur les mêmes hypothèses que Donolato [16] (figure I-18), sauf qu'il utilise une génération uniforme dont le volume est une sphère de rayon  $R_s = R/2$  tangente à la surface. La figure I-20 illustre les résultats obtenus

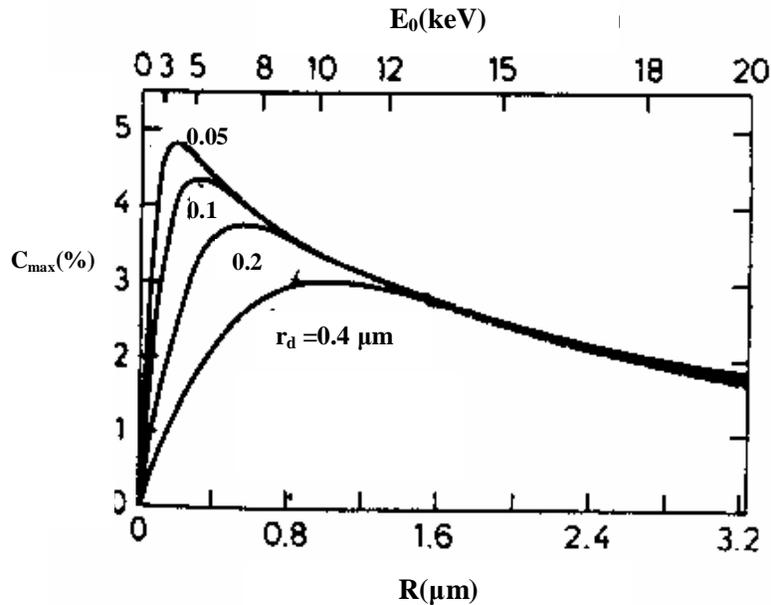


Figure I-20. Variation de  $C_{max}$  en fonction du parcours entier  $R$  pour différents rayons d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky. (Pasemann [17])

Les courbes de la figure I-20 sont caractérisées par des maxima, la position de chaque maximum est déterminée approximativement par le diamètre de la dislocation de forme cylindrique ( $\max-C_{max}$  est situé approximativement à  $R=2r_d$ )

En comparant les courbes des figures I-19 et I-20 dans le cas d'une dislocation de forme cylindrique de rayon fini  $r_d$ , on remarque qu'elles ont la même forme mais les valeurs de Pasemann [17] obtenues par un calcul exacte sont supérieures de 20% à 30% à celles de Donolato [16] calculées par l'approximation de premier ordre. Cette différence est due probablement à l'utilisation de deux fonctions de générations différentes: Pasemann [17] a utilisé une génération uniforme de volume sphérique tandis que Donolato [16] a utilisé une fonction de génération de forme Gaussienne de symétrie sphérique. Il apparaît de la figure I-20 que Pasemann [17] n'a pas traité le cas de la dislocation de rayon nul.

Malgré que les deux modèles de Donolato et Pasemann ont donné des résultats similaires pour le cas d'une dislocation de rayon fini différent de zéro, on doit rappeler que certaines simplifications physiques ne sont pas toujours justifiées:

1. La couche métallique et la zone déserte du contact Schottky ont été négligées. La zone déserte d'épaisseur  $Z_D$  est d'autant plus large que le dopage est faible ( $Z_D \propto 1/\sqrt{N_D}$ ). La présence du champ électrique minimise la recombinaison des porteurs sur la partie de la dislocation située dans la zone déserte. Il en résulte que les deux modèles surestiment le contraste associé à la dislocation.
2. L'approximation de premier ordre (expression I-52:  $\Delta p = \Delta p_0$ ) adoptée par Donolato n'est pas réaliste car  $\Delta p$  en présence de la dislocation est différente de  $\Delta p_0$  en absence de la dislocation. En plus dans le cas où la dislocation est très active ( $\tau' \rightarrow 0$ ) on a  $\gamma \rightarrow \infty$ .
3. L'approximation d'une génération uniforme dont le volume est une sphère tangente à la surface adoptée par Pasemann [17] n'est pas réaliste car des résultats publiés dans la littérature (Leamy [23], Joy [42], Murata et al [48], ...etc.) ont montré que la fonction de génération a une forme Gaussienne modifiée. En plus, le cas d'une dislocation de rayon nul n'a pas été traité dans l'analyse de Pasemann [17]
4. Des courbes de contrastes sont tracées pour des valeurs de la force de défaut données par le paramètre  $\gamma$ . La définition de  $\gamma$  inclue à la fois les durées de vie  $\tau$ ,  $\tau'$  et le rayon de la dislocation  $r_d$ , le cas limite d'une dislocation de rayon donné (nul ou pas) et  $\tau'=0$  ne peut être obtenu à partir de ces équations.

La simulation Monte Carlo est une alternative à la modélisation théorique pour accomplir une analyse plus réaliste du contraste de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs. Dans le chapitre suivant, nous exposerons l'algorithme de la simulation Monte Carlo que nous avons développé pour simuler les trajectoires électroniques, la dissipation d'énergie, la distribution des sources quasi-ponctuelles, le courant EBIC en absence de défauts dans les semi-conducteurs et l'effet des différents paramètres de simulation sur ce dernier.

## II- SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN ABSENCE DE DÉFAUT DANS UN SEMICONDUCTEUR

### II-1. INTRODUCTION

La création des paires électron trou s'effectue tout au long du parcours en zig zag des électrons incidents dans les semiconducteurs, leur collecte à l'aide d'une jonction p-n ou un contact Schottky constitue le courant EBIC. Nous exposons dans ce chapitre l'algorithme de la simulation Monte Carlo pour décrire les trajectoires électroniques, la dissipation d'énergie, la distribution des sources quasi-ponctuelles, le courant EBIC en absence de défauts dans les semi-conducteurs et l'effet des différents paramètres de simulation sur ce dernier.

### II-2. SIMULATION DE MONTE CARLO DES TRAJECTOIRES ELECTRONIQUES DANS UN SOLIDE

Les trajectoires électroniques dans un solide ont un caractère fortement aléatoire; c'est pour cette raison que la simulation de Monté Carlo est généralement utilisée. Elle consiste à décomposer la trajectoire de chaque électron en un grand nombre de séquences. Nous avons utilisé une approche similaire à celle de Murata[48,49]. La figure II-1 montre une étape de la trajectoire d'un électron.

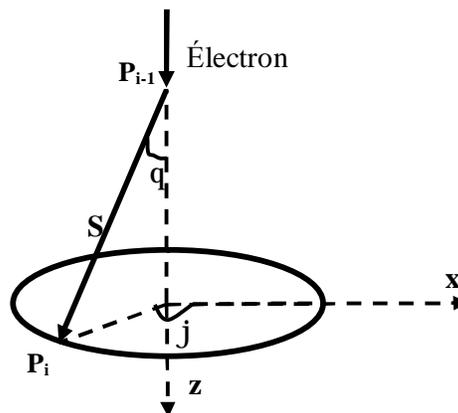


Figure II-1. Représentation d'une étape d'une trajectoire électronique dans un solide

L'angle de diffusion azimutal  $\varphi$  est sélectionné aléatoirement, il est distribué uniformément entre 0 et  $2\pi$ . Ce qui signifie que l'électron diffuse à un autre point situé dans le plan normal à la direction précédente de l'incidence avec une équiprobabilité suivant toutes les directions. Il est exprimé par: (Joy [42], Newbury et al. [27])

$$\varphi = 2\pi \cdot R_1 \quad (\text{II-1})$$

Où  $R_1$  est un nombre pseudo aléatoire distribué uniformément sur l'intervalle [0,1]

En pénétrant dans le solide, l'électron va être dévié de sa direction initiale d'un angle  $\theta$  aléatoire. On admet que cet angle de déviation résulte de la diffusion élastique seulement car les déviations résultantes de la diffusion inélastique sont très petites. Pour compenser cette approximation, on doit avoir dans la simulation un coefficient de rétro diffusion égal à celui obtenu expérimentalement. L'angle  $\theta$  peut être évalué en utilisant l'expression originale de la section efficace différentielle de Rutherford. Il est exprimée par: (Newbury et al. [27])

$$\cos\theta = 1 - \frac{2 \cdot \alpha \cdot R_2}{1 + \alpha - R_2} \quad (\text{II-2})$$

Où  $R_2$  est un deuxième nombre aléatoire distribué uniformément entre 0 et 1,  $\alpha$  est le paramètre d'écran de la diffusion simple donné sous la forme: (Newbury et al. [27])

$$\alpha = \frac{0.0034 \cdot Z^{\frac{2}{3}}}{E(\text{keV})} \quad (\text{II-3})$$

La longueur d'étape  $S$  de la trajectoire électronique séparant deux événements de diffusion est déterminée à partir du libre parcours moyen total  $\lambda_{\text{Tot}}$  en utilisant l'équation suivante: (Adesida et al. [50], Kang-Yoon et al. [51])

$$S = -\lambda_{\text{Tot}} \cdot \ln(R_3) \quad (\text{II-4})$$

Où  $R_3$  est un troisième nombre aléatoire distribué uniformément entre 0 et 1.

$\lambda_{Tot}$  est donné par l'expression suivante: (Adesida et al. [50], Kang-Yoon et al. [51])

$$\frac{1}{\lambda_{Tot}} = \frac{1}{\lambda_{el}} + \frac{1}{\lambda_{in}} \quad (II-5)$$

$\lambda_{el}$  est le libre parcours moyen élastique exprimé comme suit: (Newbury et al. [27])

$$\lambda_{el} = \frac{A}{\sigma_{el} \cdot N_A \cdot \rho} \quad (\text{Cm / événement}) \quad (II-6)$$

où  $N_A$  est le nombre d'Avogadro,  $\rho$  la densité volumique,  $A$  la masse atomique de la cible et  $\sigma_{el}$  la section efficace élastique totale exprimée (Newbury et al. [27]) par:

$$\sigma_{el} = \frac{Z^2 \cdot e^4}{4 \cdot E^2} \cdot \frac{\pi}{\alpha \cdot (1 + \alpha)} \quad (II-7)$$

$\lambda_{in}$  est le libre parcours moyen inélastique exprimé: (Newbury et al. [27])

$$\lambda_{in} = \frac{A}{\sigma_{in} \cdot N_A \cdot \rho} \quad (II-8)$$

Où  $\sigma_{in}$  est la section efficace inélastique totale donnée par: (Wall et al. [52] cité dans Fontaine [53])

$$\frac{\sigma_{in}}{\sigma_{el}} \cong \frac{20}{Z} \quad (II-9)$$

En introduisant les relations II-6 et II-8 dans II-9 on peut trouver une relation entre les libres parcours moyens élastiques et inélastiques:

$$\frac{\lambda_{el}}{\lambda_{in}} \cong \frac{20}{Z} \quad (II-10)$$

D'après la relation II-10, on note que dans un matériau léger comme le carbone ( $Z=6$ ) par exemple, les électrons subissent au cours de leur parcours trois fois plus de chocs inélastiques que de chocs élastiques. Comme les diffusions inélastiques régies par la loi de Bethe ne dévient pratiquement pas les électrons, alors l'extension latérale du volume de pénétration des électrons est réduite comparée à la profondeur de pénétration. Contrairement au cas des éléments lourds comme l'or ( $Z=79$ ) par exemple où les électrons subissent quatre fois plus de chocs élastiques que de chocs inélastiques. Comme les angles de diffusions élastiques régis par la diffusion de Rutherford sont grands alors l'extension latérale est élargie.

Des travaux de simulation par la méthode de Monté Carlo (Murata et al. [48], Ledra [54]) ont montré que la pénétration des électrons dans un échantillon se fait d'avantage en profondeur pour un élément léger (carbone), alors qu'elle est rapidement élargie dans un échantillon lourd (l'or) par diffusion élastique ( $\theta_{el} \gg \theta_{in}$ )

L'énergie  $E_i$  au point  $P_i$  (Figure II-1) est donnée par la relation suivante: (Newbury et al. [27], Shimizu et al [28])

$$\frac{E_i - E_{i-1}}{S} = - \left| \frac{dE}{dS} \right|_{E_{i-1}} \quad (\text{II-11})$$

Où  $dE/dS$  est la dissipation d'énergie par unité de distance parcourue  $S$ . Elle est exprimée par la relation de Bethe [26] sous la forme:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \cdot 10^4 \left( \frac{\rho \cdot Z}{A \cdot E} \right) \cdot \ln \left( \frac{1.166 \cdot E}{J} \right) \quad (\text{keV/cm}) \quad (\text{II-12})$$

Où  $J$  est le potentiel moyen d'ionisation donnée par: (Newbury et al. [27])

$$J(\text{keV}) = (9.76 \cdot Z + 58.5 \cdot Z^{-0.19}) \cdot 10^{-3} \quad (\text{II-13})$$

Connaissant les angles de diffusion  $\theta$  et  $\varphi$ , on peut déduire les expressions des cosinus directeurs qui nous permettent de connaître la position de l'électron à la fin de l'étape  $i$  (figure II-1 : point  $P_i$ ) c'est à dire le début l'étape  $i+1$ . On répète cette séquence un grand nombre de fois afin d'avoir la trajectoire électronique complète. Une trajectoire électronique est terminée quand l'énergie  $E$  atteint une valeur où le terme  $\ln(1.166 \cdot E / J)$  de l'équation II-12 devient négatif ou lorsque l'électron est rétrodiffusé vers l'extérieur de la cible.

Nous avons représenté sur la figure II-2 les trajectoires électroniques dans le germanium sous incidence normale à différentes énergies incidentes. Ces trajectoires sont obtenues par la simulation de Monté Carlo avec un programme informatique que nous avons élaboré. Le diamètre du faisceau électronique est considéré nul. On note que l'énergie des électrons incidents  $E_0$  influe d'une manière remarquable sur l'allure des trajectoires électroniques. Le volume de pénétration des électrons incidents augmente avec l'énergie incidente  $E_0$ . Ce résultat est parfaitement en accord avec l'expression générale (I-5) qui donne la dépendance du parcours entier  $R$  avec l'énergie  $E_0$ .

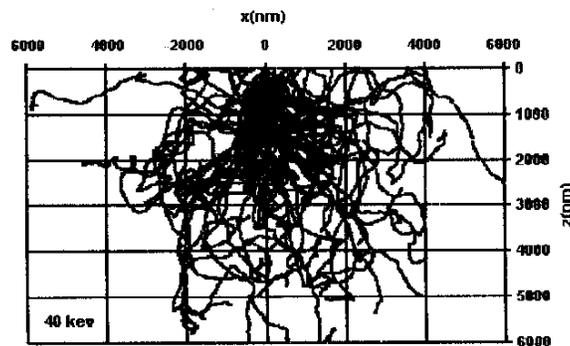
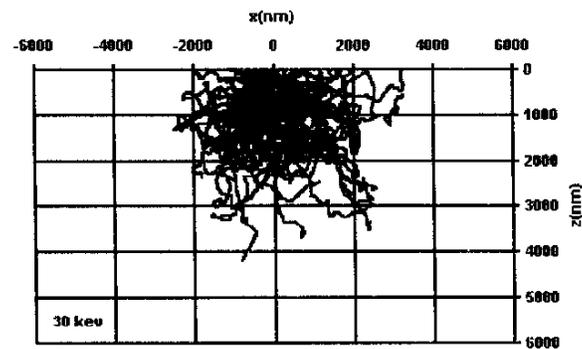
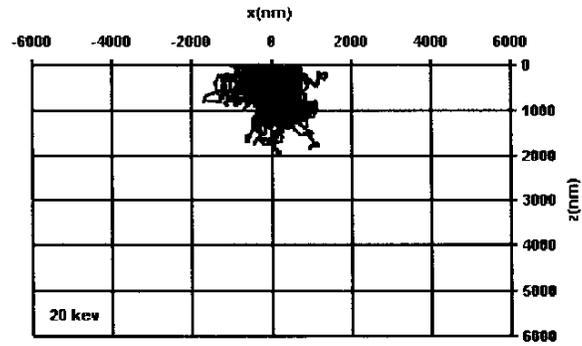


Figure II-2. Simulation Monté Carlo des trajectoires électroniques dans le germanium à différentes énergies

L'un des phénomènes important accompagnant la pénétration des électrons incidents dans un solide est la rétrodiffusion. Le coefficient de rétrodiffusion  $\eta_B$  est le rapport entre les électrons rétrodiffusés à l'extérieur de la cible et les électrons incidents. Il est fonction de l'énergie incidente  $E_0$  et le numéro atomique  $Z$  du matériau. Il est exprimé par: (Neubert et al. [55])

$$\eta_B(Z, E_0) = F_1(Z) \cdot \left[ 1 + F_2(Z) \cdot \ln\left(\frac{E_0}{20}\right) \right] \quad (\text{II-14})$$

où

$$F_1(Z) = (-272.5 + 168.6 \cdot Z - 1.925 \cdot Z^2 + 0.008225 \cdot Z^3) \cdot 10^{-4} \quad (\text{II-15})$$

et

$$F_2(Z) = 0.2043 - 0.6543 \cdot Z^{-0.3} \quad (\text{II-16})$$

La figure II-3 montre la variation du coefficient de rétrodiffusion  $\eta_B$  en fonction de l'énergie incidente  $E_0$  pour une cible de germanium. On remarque une faible dépendance de  $\eta_B$  avec  $E_0$  ( $\eta_B$  décroît légèrement avec  $E_0$ ) et que nos résultats obtenus par simulation de Monté Carlo sont en accords avec ceux calculés en utilisant l'expression (II-14).

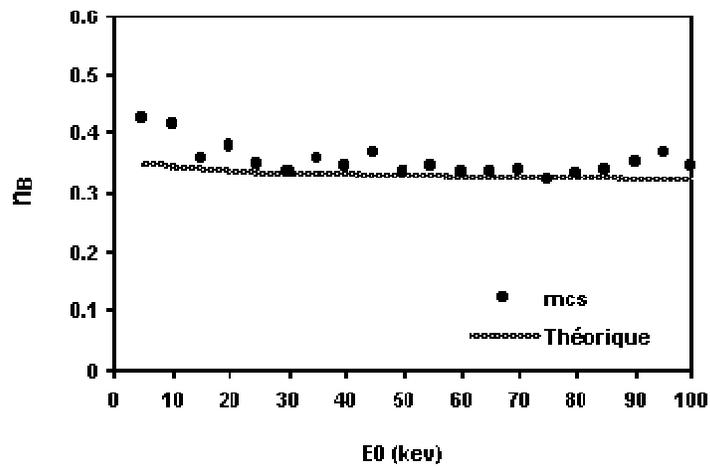


Figure II-3. Variation du coefficient de rétrodiffusion  $\eta_B$  en fonction de l'énergie  $E_0$  dans le germanium

Des travaux (Murata et al. [48], Ledra [54]) sur la simulation de Monte Carlo ont montré que  $\eta_B$  augmente de manière sensible avec le numéro atomique. D'après Murata et al. [48],  $\eta_B$  varie de  $0.0315 \pm 0.004$  pour le carbone ( $Z=6$ ) à  $0.527 \pm 0.026$  pour l'or ( $Z=79$ ) à 30 keV.

### **II-3. SIMULATION MONTE CARLO DE LA DISSIPATION D'ÉNERGIE**

La dissipation d'énergie est l'un des phénomènes important résultant de l'interaction d'un faisceau électronique avec un solide. Elle est le premier responsable de la génération des différents signaux (EBIC, CL, RX,...) utilisés pour la caractérisation de l'échantillon étudié. Certains modèles analytiques décrivant la dissipation d'énergie sont valides dans des cas de conditions expérimentales particulières. Par exemple le modèle d'Everhart et Hoff [31] est valide pour les éléments dont le numéro atomique  $Z$  varie entre 10 et 15. D'autres considèrent une forme particulière de volume de diffusion, Kanaya et Okayama [25] ont par exemple utilisé un modèle de diffusion représenté par une sphère dont le centre est localisé à la profondeur où la dissipation d'énergie atteint son maximum.

L'utilisation de la technique de simulation des trajectoires électroniques par la méthode de Monté Carlo pour calculer la dissipation d'énergie dans un solide constitue une alternative pour mieux décrire ce phénomène: Tabet et al. [19], Tabet [20], Napchan [37], Joy [42], Murata et al. [48], Kang-Yoon et al. [51], Ledra [54], Bishop [56].

La dissipation d'énergie  $\Delta E_i$  le long du parcours  $S$  (figure II-1) est exprimée en tenant compte de la relation II-11 comme suit: (Joy [42])

$$\Delta E_i = E_{i-1} - E_i \quad (\text{II-17})$$

Pour calculer le profil de l'énergie dissipée  $\Delta E(z)$  dans un solide, nous avons divisé la cible en plusieurs tranches égales d'épaisseurs  $\Delta z \geq S$  (figure II-4) où  $S$  est la longueur du parcours entre deux collisions successives. Le parcours  $S$  est choisi constant et égal à une fraction du parcours entier  $R$  (Napchan [37], Oelgart et al. [57], Werner et al. [58],). Il est donné comme suit:

$$S = \frac{R}{n_{stp}} \quad (\text{II-18})$$

où nstp est le nombre d'étapes, il est considéré comme un paramètre d'ajustement pour avoir un coefficient de rétrodiffusion  $\eta_B$  égal à la valeur expérimentale.

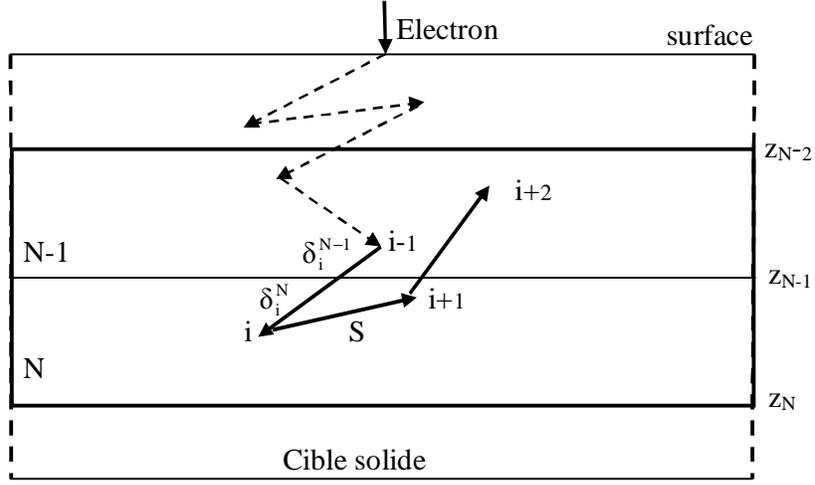


Figure II-4. Principe pour calculer le profil de la dissipation d'énergie dans un solide par la simulation de Monté Carlo.

Durant l'étape  $i$ , la dissipation d'énergie  $\delta E_i^{N-1}$  et  $\delta E_i^N$  dans les tranches N-1 et N respectivement, d'épaisseur  $\Delta z$ , est calculée par :

$$\delta E_i^{N-1} = \frac{\Delta E_i}{S} \cdot \delta_i^{N-1} \quad (\text{II-19})$$

$$\delta E_i^N = \frac{\Delta E_i}{S} \cdot \delta_i^N \quad (\text{II-20})$$

où  $\delta_i^{N-1}$  et  $\delta_i^N$  sont les distances parcourues par l'électron durant l'étape  $i$  dans les tranches N-1 et N respectivement, elles sont liées à  $S$  par l'expression suivante :

$$S = \delta_i^{N-1} + \delta_i^N \quad (\text{II-21})$$

Tenant compte de ces trois dernières expressions on peut déduire directement  $\Delta E_i$  :

$$\Delta E_i = \delta E_i^{N-1} + \delta E_i^N \quad (\text{II-22})$$

En calculant la dissipation d'énergie totale dans chaque tranche et pour tous les électrons de la même manière (d'après la figure II-4, la dissipation d'énergie totale dans la tranche N pour un électron est  $\Delta E^N = \delta E_i^N + \Delta E_{i+1}^N + \delta E_{i+2}^N$ ) on peut obtenir le profil de la dissipation d'énergie par unité de profondeur,  $\Delta E/\Delta z$ .

Nous avons représenté sur la figure II-5 le profil de la dissipation d'énergie par unité de profondeur,  $\Delta E/\Delta z$ , d'un électron moyen incident dans le germanium pour trois différentes énergies incidentes. On remarque que toutes les courbes ne commencent pas par l'origine et possèdent des maximums. Quand l'énergie incidente augmente, les valeurs de  $\Delta E/\Delta z$  au voisinage de la surface et les maximums diminuent, en plus la position de chaque maximum est décalée vers les grandes profondeurs. Ces résultats que nous avons obtenu par la simulation de Monté Carlo sont en accords avec ceux publiés dans la littérature (Everhart et Hoff [31], Kanaya et Okayama [25])

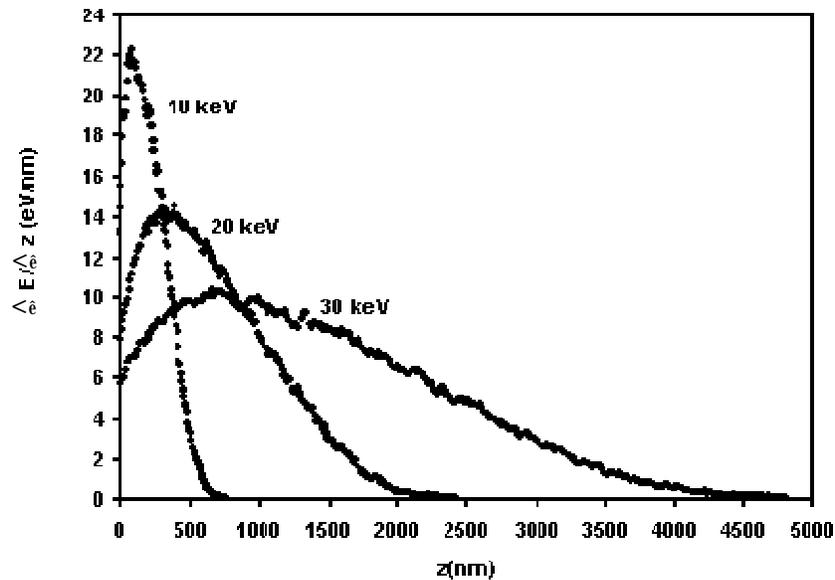


Figure II-5 le profil de la dissipation d'énergie par unité de profondeur,  $\Delta E/\Delta z$ , d'un électron moyen incident dans le germanium pour trois différentes énergies incidentes

## **II-4. SIMULATION MONTE CARLO DE LA FONCTION DE GENERATION DES PAIRES ELECTRON TROU DANS LES SEMICONDUCTEURS**

La dissipation d'énergie est le premier responsable de la création des paires électron trou dans les semi-conducteurs. Le nombre des paires électron trou  $N_i^{\text{gén}}$  générées pendant l'étape  $i$  (figure II-1) est donné par: ( Joy [42])

$$N_i^{\text{gén}} = \frac{\Delta E_i}{E_{\text{eh}}} \quad (\text{II-23})$$

où  $E_{\text{eh}}$  est l'énergie nécessaire pour créer une paire électron trou ( $E_{\text{eh}}=2.8$  eV pour le germanium et 3.6 eV pour le silicium).

Si on tient compte de la définition de la fonction de génération  $g(z)$  (expression I-23), on peut déduire directement son profil à partir du profil de dissipation d'énergie par unité de profondeur qui est représenté sur la figure II-5.

La figure II-6 montre le profil de la fonction de génération  $g(z)$  obtenue par simulation Monté Carlo d'un électron moyen dans une cible de germanium à 20 keV. Nous avons également rapporté sur la même figure, la fonction  $g(z)$  calculée par l'expression I-24 en utilisant les expressions I-6 et I-19 de  $R$  et  $\Phi(u)$  respectivement (modèle analytique de Kyser [30]). Nous remarquons que les deux courbes sont en accord. Nous notons que Kyser [30] a étudié l'émission X dans une cible de cuivre ( $Z=29$ ) et ce modèle analytique a été également utilisé par Wu et al. [21] dans une étude sur l'efficacité de collecte dans les semi-conducteurs et en particulier dans GaAs dont le numéro atomique moyen ( $Z=32$ ) est égal à celui du germanium.

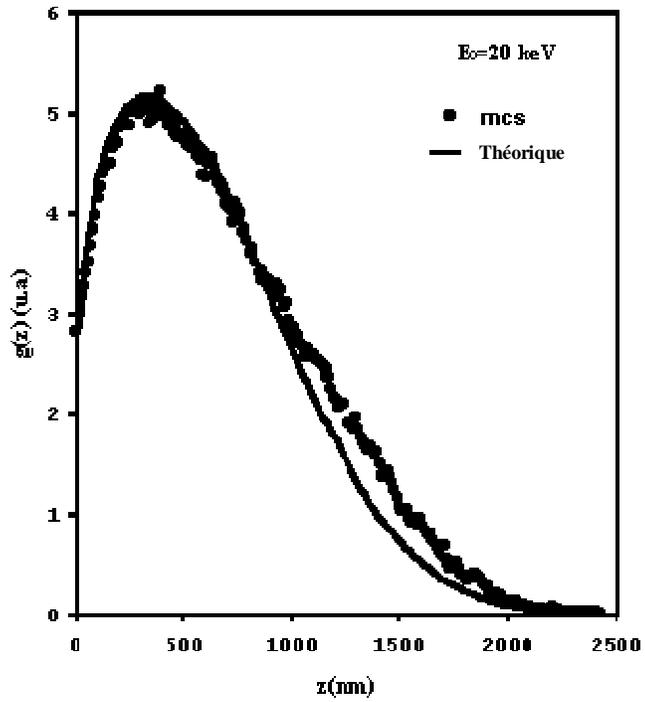


Figure II-6. Profil de la fonction de génération  $g(z)$  dans Ge à 20 keV

## II-5. SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN ABSENCE DE DEFAUT DANS UN SEMICONDUCTEUR

Considérons la géométrie décrite par la figure II-7.

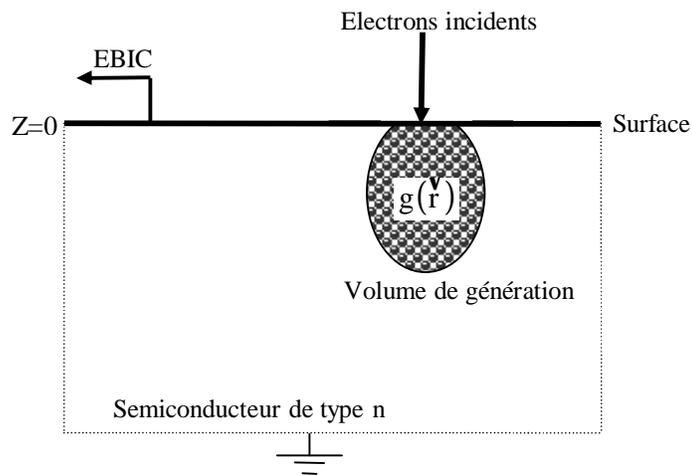


Figure II-7. Schéma illustré du modèle employé pour le calcul du courant EBIC collecté en absence de défaut.

Nous considérons les hypothèses suivantes :

- La couche métallique et la zone déserte du contact Schottky sont négligées.
- La vitesse de recombinaison en surface est infinie.
- Le taux d'injection est faible.
- $\tau$  est la durée de vie des porteurs minoritaire dans le semi-conducteur.

Le problème consiste à calculer le courant total collecté à la surface. Pour cela nous avons trouvé la fonction de génération  $g(\mathbf{r})$  sous une forme de distribution tridimensionnelle de sources quasi ponctuelles,  $S_i$ , de coordonnées  $(x_i, y_i, z_i)$  situées au milieu du parcours  $S$  entre deux collisions successives (figure II-8). Le nombre  $N_i^{\text{gén}}$  des paires électron trou générées au point  $S_i$  est donnée par la relation II-23.

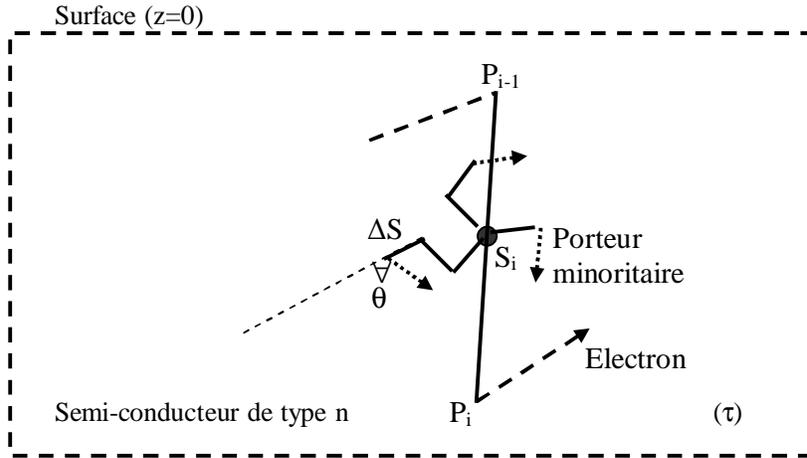


Figure II-8. Schéma descriptif de la diffusion aléatoire des porteurs minoritaires en absence de défaut dans un semi-conducteur

La diffusion aléatoire des porteurs minoritaires générés par différentes sources quasi ponctuelles  $S_i$  est étudiée. On calcule la trajectoire de chaque porteur par la simulation de Monté Carlo jusqu'à sa collection ou sa recombinaison. Le parcours de chaque porteur minoritaire est égal à  $\Delta S$  (figure II-8):

$$\Delta S = \sqrt{D \cdot \Delta t} \quad (\text{II-24})$$

où  $D$  est la constante de diffusion des porteurs minoritaires.  $\Delta t$  est la durée de chaque étape, nous l'avons pris égale à une fraction de la durée de vie des porteurs minoritaires  $\tau$  dans la cible en absence de défaut:

$$\Delta t = \frac{\tau}{NST} \quad (\text{II-25})$$

La direction du déplacement est choisie aléatoirement. L'angle  $\varphi$  est calculé comme dans la première phase de simulation:

$$\varphi = 2\pi \cdot R_4 \quad (\text{II-26})$$

Mais l'angle de diffusion  $\theta$  est calculé par l'expression suivante:

$$R_5 = \frac{\int_0^\theta \sin(\theta) \cdot d\theta}{\int_0^\pi \sin(\theta) \cdot d\theta} \quad (\text{II-27})$$

Après les calculs nous obtiendrons l'expression suivante :

$$\cos\theta = 1 - 2 \cdot R_5 \quad (\text{II-28})$$

Où  $R_4$  et  $R_5$  sont deux nombres pseudo aléatoires entre 0 et 1.

Après un certain nombre d'étapes NSTT supérieur ou égal à NST, le porteur minoritaire est considéré comme collecté s'il atteint la surface prise au bord du contact Schottky ( $z=0$ ) sinon, il est considéré perdu par recombinaison. Il faut noter que ce nombre NSTT joue un rôle important dans notre simulation car il correspond à un nombre d'étapes effectives que les porteurs parcourent avant leur recombinaison.

La probabilité de collecte  $P_{0i}^{\text{col}}$  des porteurs générés par la source  $S_i$  est égale au rapport du nombre  $N_{0i}^{\text{col}}$  des porteurs collectés à la surface du contact sur le nombre  $N_i^{\text{gén}}$  des porteurs générés par la source  $S_i$ :

$$P_{0i}^{\text{col}} = \frac{N_{0i}^{\text{col}}}{N_i^{\text{gén}}} \quad (\text{II-29})$$

Le nombre total  $N_0^{\text{col}}$  des porteurs collectés à la surface du contact Schottky pour une position donnée du faisceau électronique incident est obtenu en multipliant le nombre des porteurs minoritaires générés  $N_i^{\text{gén}}$  par la probabilité de collecte  $P_{0i}^{\text{col}}$  de chaque source  $S_i$ , puis en sommant sur toutes les sources  $S_i$ :

$$N_0^{\text{col}} = \sum_{i=1}^{N_S} N_i^{\text{gén}} \cdot P_{0i}^{\text{col}} \quad (\text{II-30})$$

où  $N_S$  est le nombre total des sources  $S_i$  pour une position donnée du faisceau électronique incident. Tenant compte de II-29 et II-30, nous pouvons écrire :

$$N_0^{\text{col}} = \sum_{i=1}^{N_S} N_{0i}^{\text{col}} \quad (\text{II-31})$$

Le courant EBIC normalisé simulé  $I_0^{\text{mcs}}$  est proportionnel au nombre total  $N_0^{\text{col}}$  des porteurs collectés à la surface :

$$I_0^{\text{mcs}} = \frac{N_0^{\text{col}}}{\sum_{i=1}^{N_S} N_i^{\text{gén}}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_S} N_{0i}^{\text{col}}}{\sum_{i=1}^{N_S} N_i^{\text{gén}}} \quad (\text{II-32})$$

Nous avons aussi calculé le nombre total  $N_{0SS}^{col}$  des porteurs collectés à la surface d'un contact Schottky en absence de défauts en multipliant le nombre  $N_i^{gén}$  des porteurs minoritaires générés par la source  $S_i$  située à la profondeur  $z_i$  par la probabilité de collecte  $\exp\left(-\frac{z_i}{L}\right)$  puis en sommant sur toutes les sources  $S_i$  pour une position donnée du faisceau électronique incident:

$$N_{0SS}^{col} = \sum_{i=1}^{N_s} N_i^{gén} \exp\left(-\frac{z_i}{L}\right) \quad (\text{II-33})$$

où  $L$  est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires dans le semiconducteur en absence de défaut. Elle est donnée par:

$$L = \sqrt{D \cdot \tau} \quad (\text{II-34})$$

Le courant EBIC normalisé semi simulé  $I_0^{SS}$  est proportionnel au nombre total  $N_{0SS}^{col}$  des porteurs collectés à la surface :

$$I_0^{SS} = \frac{N_{0SS}^{col}}{\sum_{i=1}^{N_s} N_i^{gén}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_s} N_i^{gén} \exp\left(-\frac{z_i}{L}\right)}{\sum_{i=1}^{N_s} N_i^{gén}} \quad (\text{II-35})$$

Notons que l'expression II-35 est déduite directement de celle qui donne le courant EBIC normalisé théorique  $I_0^{th}$  en absence de défauts:

$$I_0^{th} = \frac{\int_0^{\infty} g(z) \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \cdot dz}{\int_0^{\infty} g(z) \cdot dz} \quad (\text{II-36})$$

où  $g(z)$  est la fonction de génération et  $\exp\left(-\frac{z}{L}\right)$  est la probabilité de collecte.

Nous avons représenté sur la figure II-9 la variation en fonction de l'énergie incidente, du courant EBIC normalisé semi simulé  $I_0^{ss}$  en absence de défaut dans le germanium, calculé par l'expression II-35 en utilisant la fonction de génération que nous avons obtenu par la simulation de Monté Carlo. A titre de comparaison, nous avons rapporté sur la même figure les résultats du courant EBIC normalisé théorique  $I_0^{th}$  calculés par l'expression II-36 en utilisant la fonction de génération du modèle théorique de Kanaya et Okayama [25].

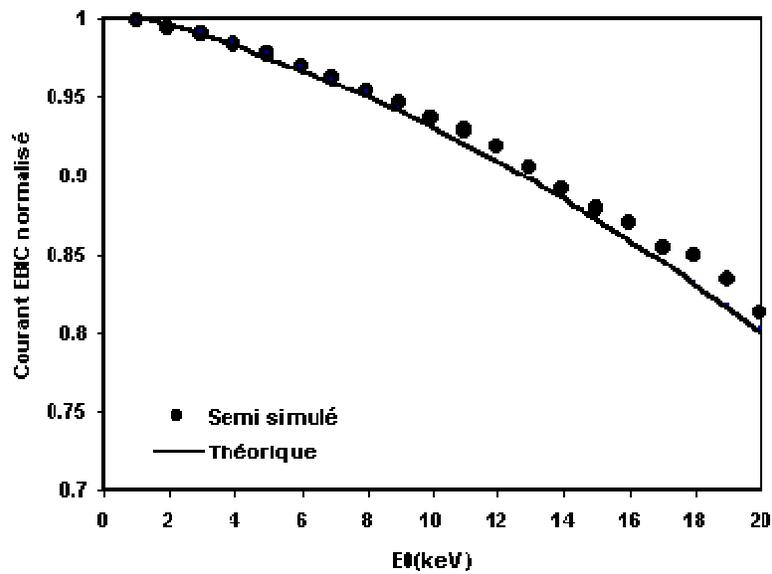


Figure II-9. Variation du courant EBIC normalisé collecté en absence de défaut en fonction de L'énergie incidente  $E_0$  dans le germanium pour  $L=3.16\mu\text{m}$ .

Nous remarquons que notre courbe du courant EBIC normalisé  $I_0^{ss}$  collecté en absence de défaut calculée par l'expression II-35 en utilisant la fonction de génération obtenue par la simulation de Monte Carlo est en bon accord avec celle calculée par l'expression II-36 en utilisant la fonction de génération du modèle théorique de Kanaya et Okayama [25].

## **II-6. L'INFLUENCE DES DIFFERENTS PARAMETRES DE SIMULATION SUR LE COURANT EBIC EN ABSENCE DE DEFAULT**

La comparaison de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  nous permet de tester la validité de notre algorithme. La valeur de  $I_0^{SS}$  est supposé comme une valeur exacte pour la distribution des sources considérées. Par conséquent, dans notre étude par simulation, il faut que  $I_0^{mcs}$  soit égal à  $I_0^{SS}$ . Nous analyserons dans ce qui suit l'influence des différents paramètres de simulation sur  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$ . Ces paramètres sont le nombre d'électrons incidents  $N_e$ , la longueur d'étape  $\Delta S$  et le nombre total d'étapes NSTT.

### **II-6. 1. L'INFLUENCE DU NOMBRE D'ÉLECTRONS INCIDENTS $N_e$**

Les résultats de simulation sont statistiquement meilleurs pour les valeurs élevées du nombre  $N_e$  d'électrons incidents. Cependant compte tenu de la contrainte temps de simulation, nous avons étudié l'effet de  $N_e$  et par conséquent l'effet du nombre total  $N_s$  des sources  $S_i$  sur le courant simulé afin d'optimiser le temps de calcul. Les résultats de  $I_0^{SS}$  et  $I_0^{mcs}$  sont regroupés dans le tableau II-1.

$N_e$	100	500	1000
$N_s$	24419	113459	225723
$I_0^{SS}$	0.827	0.812	0.813
$I_0^{mcs}$	0.823	0.806	0.807
$( I_0^{mcs} - I_0^{SS}  / I_0^{SS})(\%)$	0.5	0.7	0.7

Tableau II-1. Variation de  $I_0^{SS}$  et  $I_0^{mcs}$  en fonction de  $N_e$   
Ge, NST=1000, NSTT= 2.5NST et L=3.16 $\mu$ m.

Nous constatons que les valeurs de  $I_0^{SS}$  et  $I_0^{mcs}$  à 20 keV et L=3.16  $\mu$ m varient de 2 % quand  $N_e$  varie de 100 à 500 et de 0.1% quand  $N_e$  varie de 500 à 1000. Nous constatons aussi que l'erreur  $(|I_0^{mcs} - I_0^{SS}| / I_0^{SS})$  entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  est inférieure à 1%.

N. B. Nous considérons dans tout ce qui suit  $N_e=500$  électrons.

## II-6. 2. L'INFLUENCE DE LA LONGUEUR D'ETAPE $\Delta S$

Nous avons étudié l'influence de la longueur du parcours  $\Delta S$  de chaque étape sur  $I_0^{mcs}$  à deux valeurs différentes d'énergie incidente  $E_0=10$  keV et  $E_0=20$  keV. Nous avons pris  $NSTT= 2.5NST$ ,  $L=3.16\mu m$  et le germanium comme matériau. Les résultats sont regroupés dans le tableau II-2. A titre de comparaison nous avons rapporté dans le même tableau les valeurs de  $I_0^{SS}$ .

$E_0(\text{keV})$	NST	$\Delta S(\text{nm})$	$L/\Delta S$	$I_0^{mcs}$	$I_0^{SS}$
10	10	1000	3.16	0.846	0.935
	100	316	10	0.915	
	1000	100	31.6	0.933	
	4000	50	63.2	0.937	
	16000	25	126.5	0.939	
20	10	1000	3.16	0.734	0.812
	100	316	10	0.789	
	1000	100	31.6	0.806	
	4000	50	63.2	0.810	
	16000	25	126.5	0.812	

Tableau II-2. Variation de  $I_0^{mcs}$  en fonction de  $\Delta S$  à  $E_0=10$  keV et  $E_0=20$  keV dans le germanium :  $NSTT= 2.5NST$  et  $L=3.16\mu m$ .

Nous notons que pour  $L=3.16\mu m$  et  $NST$  qui varie de 10 à 16000 nous avons eu des valeurs de  $\Delta S$  qui varie de 1000 à 25nm et un rapport  $L/\Delta S$  qui varie de 3.16 à 126.5 respectivement. Dans le cas où le rapport  $L/\Delta S$  est supérieur à 10 Nous avons obtenu des valeurs de  $I_0^{mcs}$  proches de celles de  $I_0^{SS}$ .

Nous avons représenté sur la figure II-10 la variation de  $I_0^{mcs}$  en fonction de  $E_0$  dans le germanium pour deux valeurs de  $\Delta S=100\text{nm}$  et  $\Delta S=50\text{nm}$ , quand  $L = 3.16\mu\text{m}$  le rapport  $L/\Delta S$  est égal à 31.6 et 63.2 respectivement.

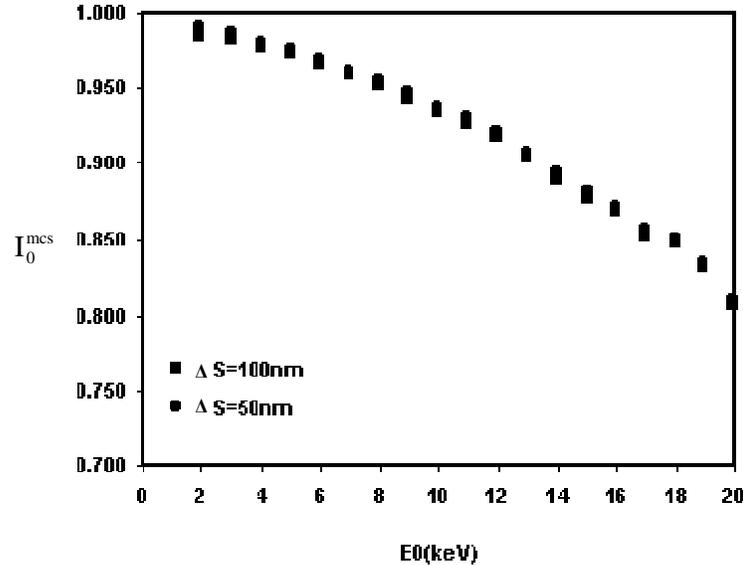


Figure II-10. Variation de  $I_0^{mcs}$  en fonction de  $E_0$  pour deux valeurs différentes de  $\Delta S$  dans le germanium:  $L=3.16\mu\text{m}$ ,  $NSTT= 2.5NST$ .

Nous constatons que pour deux valeurs différentes de  $\Delta S$ , les deux courbes de  $I_0^{mcs}$  sont confondues. Nous pouvons conclure que  $I_0^{mcs}$  est peu sensible à  $\Delta S$  quand le rapport  $(L/ \Delta S)$  est supérieur à 10.

### **II-6. 3. L'INFLUENCE DU NOMBRE TOTAL D'ETAPES NSTT**

Le choix du nombre total d'étapes NSTT joue un rôle important dans notre simulation car il influe d'une manière remarquable sur  $I_0^{mcs}$  qui doit être égal à  $I_0^{SS}$ . Notons que la valeur de  $I_0^{SS}$  est la valeur exacte pour la distribution des sources simulées. Il est important de noter que dans notre algorithme, les porteurs ne se recombinent pas durant le processus de diffusion. Après un nombre d'étapes NSTT, les porteurs résiduels (non collectés) sont perdus par recombinaison. En d'autres

termes, le nombre d'étapes NSTT correspond à un nombre d'étapes effectives que les porteurs parcourent avant leur recombinaison.

Nous avons effectué des simulations pour différentes valeurs de NSTT et nous avons regroupé dans le tableau II-3 les résultats de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  à 10 keV et 20 keV : Ge,  $L=3.16\mu\text{m}$ ,  $NST=1000$ ,  $\Delta S=100\text{nm}$ .

$E_0=10\text{keV}$	$I_0^{SS}$	0.935					
	NSTT/NST	1	2	2.5	3	4	5
	$I_0^{mcs}$	0.894	0.925	0.933	0.938	0.947	0.953
	$( I_0^{mcs} - I_0^{SS} /I_0^{SS})(\%)$	4.4	1.1	0.2	0.3	1.3	1.9
$E_0=20\text{keV}$	$I_0^{SS}$	0.812					
	NSTT/NST	1	2	2.5	3	4	5
	$I_0^{mcs}$	0.703	0.784	0.806	0.822	0.845	0.861
	$( I_0^{mcs} - I_0^{SS} /I_0^{SS})(\%)$	13.4	3.5	0.7	1.2	4.1	6.0

Tableau II-3. Variation de  $I_0^{mcs}$  en fonction de NSTT à 10 keV et 20keV: Germanium,  $NST=1000$ ,  $L=3.16\mu\text{m}$ ,  $\Delta S=100\text{nm}$ .

D'après le tableau II-3, nous remarquons que  $I_0^{mcs}$  varie de 0.894 à 0.953 quand  $E_0=10\text{keV}$  et varie de 0.703 à 0.861 quand  $E_0=20\text{keV}$  pour des valeurs de NSTT qui varient de  $NSTT=NST$  à  $NSTT=5NST$ . En comparant les résultats de  $I_0^{mcs}$  avec ceux de  $I_0^{SS}$ , nous notons que l'accord est obtenu pour un rapport  $NSTT / NST$  compris entre 2 et 4 et le meilleur accord est obtenu pour le cas  $NSTT=2.5NST$ .

Pour voir l'influence du matériau sur ce dernier résultat (meilleur accord entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  pour  $NSTT=2.5NST$ ,  $L=3.16\mu\text{m}$ ,  $NST=1000$ ,  $\Delta S=100\text{nm}$ ,  $L/ \Delta S=31.6$ ), nous avons effectué des simulations pour deux matériaux différents (Si et Ge). Le tableau II-4 regroupent les résultats de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  à  $E_0=10\text{keV}$  et  $E_0=20\text{keV}$ .

Matériau	$E_0$ (keV)	$I_0^{mcs}$	$I_0^{SS}$	$( I_0^{mcs} - I_0^{SS} /I_0^{SS})(\%)$
Si	10	0.866	0.868	0.2
	20	0.593	0.630	5.9
Ge	10	0.933	0.935	0.2
	20	0.806	0.812	0.7

Tableau II-4. Les valeurs de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  pour Si et Ge à 10 keV et 20 keV : NSTT=2.5NST, NST=1000, L=3.16 $\mu$ m,  $\Delta S$ =100nm, L/  $\Delta S$ =31.6

D'après le tableau II-4, on remarque que pour  $E_0=10$  keV, l'erreur relative  $|I_0^{mcs} - I_0^{SS}|/I_0^{SS}$  n'a pas changé quand on a utilisé deux matériaux différents tandis que pour  $E_0=20$  keV elle a augmenté de 0.7% pour Ge à 5.9% pour Si.

On peut conclure que dans les conditions NSTT=2.5NST, L=3.16 $\mu$ m, NST=1000, L/  $\Delta S$ =31.6, l'erreur relative  $|I_0^{mcs} - I_0^{SS}|/I_0^{SS}$  est peu sensible au matériau utilisé dans la réalisation de la diode Schottky

Pour voir l'influence de la longueur de diffusion L des porteurs minoritaires dans le cas NSTT=2.5NST, NST=1000, L/  $\Delta S$ =31.6, nous avons effectué des simulations pour deux longueurs de diffusion différentes. Les tableaux II-5 et II-6 regroupent les résultats de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  pour L=10 $\mu$ m et L=1 $\mu$ m à 10 et 20 keV dans Si et Ge.

Matériau	$E_0$ (keV)	$I_0^{mcs}$	$I_0^{SS}$	$( I_0^{mcs} - I_0^{SS} /I_0^{SS})(\%)$
Si	10	0.952	0.956	0.4
	20	0.854	0.856	0.2
Ge	10	0.973	0.979	0.6
	20	0.932	0.934	0.3

Tableau II-5. Les valeurs de  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  pour L=10 $\mu$ m: NSTT=2.5NST, NST=1000,  $\Delta S$ =316nm, L/  $\Delta S$ =31.6

Matériau	$E_0$ (keV)	$I_0^{\text{mcs}}$	$I_0^{\text{SS}}$	$( I_0^{\text{mcs}} - I_0^{\text{SS}} /I_0^{\text{SS}})(\%)$
Si	10	0.625	0.655	4.6
	20	0.220	0.297	25.9
Ge	10	0.809	0.815	0.7
	20	0.495	0.549	9.8

Tableau II-6. Les valeurs de  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  pour  $L=1\mu\text{m}$ :  
 $\text{NSTT}=2.5\text{NST}$ ,  $\text{NST}=1000$ ,  $\Delta S=31.6\text{nm}$ ,  $L/\Delta S=31.6$

Nous remarquons que quand  $\text{NSTT}=2.5\text{NST}$ ,  $\text{NST} =1000$  et  $L/\Delta S=31.6$ , le meilleur accord entre  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  est obtenu à 10keV pour  $L=10\mu\text{m}$  et  $L=1\mu\text{m}$ . Mais à 20keV, l'accord est obtenu dans le cas où  $L=10\mu\text{m}$  seulement, tandis que pour  $L=1\mu\text{m}$ , l'erreur relative  $|I_0^{\text{mcs}} - I_0^{\text{SS}}|/I_0^{\text{SS}}$  est égale 25.9% pour le silicium et 9.8% pour le germanium. Nous avons varié le paramètre NSTT pour obtenir le meilleur accord possible entre  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  dans ce cas. Nous sommes arrivés à diminuer l'erreur relative  $|I_0^{\text{mcs}} - I_0^{\text{SS}}|/I_0^{\text{SS}}$  de 9.8% à 0.7% pour le germanium et de 25.9% à 4.4% pour le silicium quand  $\text{NSTT}=3.5\text{NST}$  et  $\text{NSTT}= 4\text{NST}$  respectivement.

A titre de compréhension, nous avons représenté sur la figure II-11 les courbes de  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  en fonction de  $E_0$  pour une diode Schottky pour  $\text{NSTT}=\text{NST}$  et NSTT variable. Nous avons considéré le germanium comme matériau, une longueur de diffusion  $L=1\mu\text{m}$  et  $\text{NST}=1600$  qui nous donne une longueur d'étape  $\Delta S=25\text{nm}$  et un rapport  $L/\Delta S=40$ . Dans ces conditions, les résultats obtenus montrent que l'erreur relative entre  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  est comprise entre 2% et 46% quand  $\text{NSTT} =\text{NST}$  et entre 0% et 3% quand NSTT varie de 2.5NST à 3.5NST lorsque  $E_0$  varie de 1 à 25 keV.

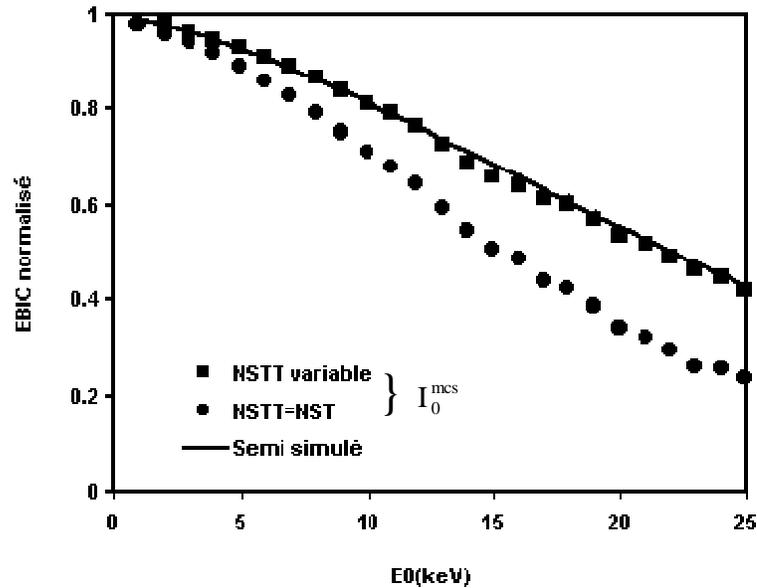


Figure II-11. Variation du courant EBIC normalisé en fonction de  $E_0$  dans le germanium pour NSTT fixe et variable.  $L=1\mu\text{m}$ ,  $NST=1600$ ,  $\Delta S=25\text{nm}$  et  $L/\Delta S=40$ .

## II-7. CONCLUSION

Nous pouvons conclure que le nombre des électrons incidents  $N_e$  et la longueur d'étape  $\Delta S$  qui doit être inférieure à la longueur  $L$  de diffusion des porteurs minoritaires, influent d'une manière faible sur  $I_0^{mcs}$ . Tandis que NSTT joue un grand rôle dans notre simulation (car il influe fortement sur  $I_0^{mcs}$ ), NSTT peut être considéré comme un paramètre d'ajustement afin d'obtenir un meilleur accord possible entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$ . Ce dernier est considéré comme une valeur exacte courant EBIC normalisé pour la distribution des sources simulées.

Une valeur de NSTT comprise entre 2 et 4 donne un bon accord entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  pour une énergie comprise entre 1 et 20keV et une longueur de diffusion  $L$  comprise entre 1 et  $10\mu\text{m}$ . Une valeur de  $NSTT=2.5NST$  a donnée le meilleur accord

entre  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I_0^{\text{SS}}$  à 10keV pour les trois longueurs de diffusion :  $L=1\mu\text{m}$ ,  $L=3.16\mu\text{m}$  et  $L=10\mu\text{m}$ , mais à 20keV elle a donné le bon accord pour  $L=3.16\mu\text{m}$  et  $L=10\mu\text{m}$  seulement tandis que pour  $L=1\mu\text{m}$ , l'erreur relative  $\left| \frac{I_0^{\text{mcs}} - I_0^{\text{SS}}}{I_0^{\text{SS}}} \right|$  est égale à 9.8% pour le germanium et 25.9% pour le silicium. On a pu diminué  $\left| \frac{I_0^{\text{mcs}} - I_0^{\text{SS}}}{I_0^{\text{SS}}} \right|$  de 9.8% à 0.7% pour le germanium et de 25.9% à 4.4% pour le silicium quand le nombre NSTT a pris les valeurs 3.5NST et 4NST respectivement

Nous exposerons dans le chapitre suivant le calcul par la simulation de Monte Carlo du courant EBIC collecté en présence d'un défaut quelconque dans un semiconducteur, cela nous permettra d'étudier ensuite le contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky. Les résultats de simulations seront discutés et comparés avec ceux obtenus par des expressions analytiques existantes dans la littérature.

### III SIMULATION MONTE CARLO DU CONTRASTE EBIC D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY

#### III-1. INTRODUCTION

La simulation Monte Carlo du courant EBIC collecté en présence d'un défaut quelconque dans un semiconducteur, nous permettra d'exprimer le profil de contraste EBIC du cas particulier d'une dislocation perpendiculaire à la surface d'un contact Schottky. Il est clair que le signal détecté dans ce cas contient les informations caractérisant la recombinaison des porteurs minoritaires sur la dislocation. Nous étudierons dans ce chapitre le contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky et l'effet des différents paramètres sur ce dernier tels que l'énergie incidente, la durée de vie des porteurs et le rayon de la dislocation.

#### III-2. SIMULATION MONTE CARLO DU COURANT EBIC EN PRESENCE D'UN DEFAUT QUELCONQUE DANS UN SEMICONDUCTEUR

Considérons la géométrie décrite par la figure III-1

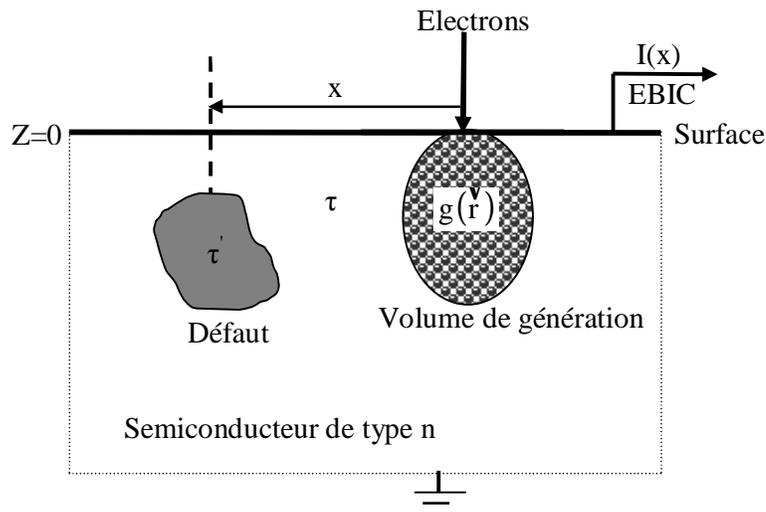


Figure III-1. Schéma illustré du modèle employé pour le calcul du courant EBIC collecté en présence d'un défaut quelconque dans un semiconducteur.

Nous considérons les hypothèses suivantes :

- La couche métallique et la zone déserte du contact Schottky sont négligées.
- La vitesse de recombinaison en surface est infinie.
- Le taux d'injection est faible.
- $\tau$  est la durée de vie des porteurs minoritaire dans le semi-conducteur parfait
- $\tau'$  est la durée de vie des porteurs minoritaires dans le défaut de volume F.
- La durée de vie  $\tau'$  est inférieure à  $\tau$

On calcule le courant EBIC en présence d'un défaut quelconque de la même manière que celle traitée dans le chapitre précédent pour un semiconducteur parfait sauf que si le porteur minoritaire se trouve à l'intérieur du défaut de volume F, son parcours  $\Delta S'$  est calculé par:

$$\Delta S' = \sqrt{D \cdot \Delta t'} \quad (\text{III-1})$$

où D est le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires. La même valeur a été utilisée dans le semi-conducteur et le défaut. Cette supposition est généralement adoptée dans les modèles théoriques par souci de simplification.  $\Delta t'$  est la durée de chaque étape à l'intérieur du défaut, on l'a prise égale à une fraction de la durée de vie des porteurs minoritaires  $\tau'$ .

$$\Delta t' = \frac{\tau'}{NST} \quad (\text{III-2})$$

Le porteur minoritaire est considéré comme collecté s'il atteint la surface prise au bord du contact Schottky ( $z = 0$ ) sinon il est considéré perdu par recombinaison après un nombre total NSTT d'étapes. La probabilité de collecte  $P_i^{\text{col}}$  des porteurs générés par la source quasi ponctuelle  $S_i$  est égale au rapport du nombre  $N_i^{\text{col}}$  des porteurs collectés à la surface sur le nombre  $N_i^{\text{gén}}$  des porteurs générés par  $S_i$ :

$$P_i^{\text{col}} = \frac{N_i^{\text{col}}}{N_i^{\text{gén}}} \quad (\text{III-3})$$

Le nombre total  $N^{\text{col}}(x)$  des porteurs collectés à la surface à une distance  $x$  du faisceau électronique incident par rapport au défaut est obtenu en multipliant le nombre des porteurs minoritaires générés  $N_i^{\text{gén}}$  par la probabilité de collecte  $P_i^{\text{col}}$  de chaque source  $S_i$  puis en sommant sur toutes les sources  $S_i$

$$N^{\text{col}}(x) = \sum_{i=1}^{N_s} N_i^{\text{gén}} \cdot P_i^{\text{col}} \quad (\text{III-4})$$

où  $N_s$  est le nombre total des sources  $S_i$  à une position donnée du faisceau électronique incident.

Si nous tenons compte des deux relations III-3 et III-4 nous déduisons ce qui suit :

$$N^{\text{col}}(x) = \sum_{i=1}^{N_s} N_i^{\text{col}} \quad (\text{III-5})$$

Le courant EBIC normalisé simulé  $I^{\text{mcs}}(x)$  en présence de défauts est proportionnel au nombre total  $N^{\text{col}}(x)$  des porteurs collectés à la surface, il est calculé par l'expression suivante :

$$I^{\text{mcs}}(x) = \frac{N^{\text{col}}(x)}{\sum_{i=1}^{N_s} N_i^{\text{gén}}} \quad (\text{III-6})$$

Après avoir exposé le calcul du courant EBIC en présence d'un défaut quelconque dans un semiconducteur par la simulation de Monte Carlo, nous allons appliquer cette méthode pour étudier le contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky.

### III-3. SIMULATION MONTE CARLO DU CONTRASTE EBIC D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY

#### III-3-1. ALGORITHME DE SIMULATION

Nous considérons les mêmes hypothèses du paragraphe précédent. Le défaut dans ce cas est une dislocation de forme cylindrique normale à la surface d'un contact Schottky. Elle possède un rayon  $r_d$  et un volume  $F$  dont lequel la durée de vie des porteurs minoritaire est égale à  $\tau'$  (figure III-2).

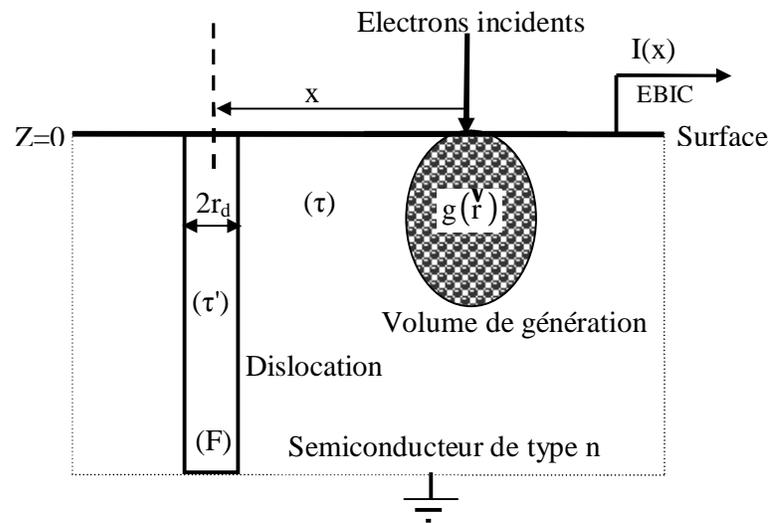


Figure III-2. Schéma illustré du modèle employé pour la simulation du courant EBIC collecté en présence d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky.

On simule le courant EBIC quand le faisceau électronique incident est à une distance  $x$  de la dislocation en utilisant l'algorithme exposé dans le paragraphe précédent. Quand la distance  $x$  est très grande par rapport à la longueur de diffusion  $L$  des porteurs minoritaires dans le matériau parfait, le courant EBIC calculé est  $I_0^{mcs}$ . Il correspond au courant collecté en absence du défaut. Ce courant doit être égal au courant semi simulé  $I_0^{SS}$ . L'expression de ce dernier donnée par la relation II-35 est

exacte pour la distribution des sources considérées car cette expression a été obtenue sans aucune approximation. Les autres positions donnent  $I^{\text{mcs}}(x)$ .

Dans notre algorithme de simulation, il faut que la longueur d'étape des porteurs minoritaires à l'extérieur et à l'intérieur de la dislocation soit plus petite que le diamètre de la dislocation. Si cette condition n'est pas satisfaite, les porteurs qui arrivent au voisinage de la dislocation à une distance plus petite que la longueur d'étape peuvent la traverser sans la "voir". La longueur d'étape  $\Delta S' = \sqrt{D \cdot \Delta t'}$  à l'intérieur de la dislocation est plus petite que la longueur d'étape  $\Delta S = \sqrt{D \cdot \Delta t}$  à l'extérieur car la durée de vie  $\tau'$  des porteurs à l'intérieur de la dislocation est plus petite que la durée de vie  $\tau$  à l'extérieur.

En simulant les deux courants  $I_0^{\text{mcs}}$  et  $I^{\text{mcs}}(x)$ , on peut déduire le profil du contraste  $C^{\text{mcs}}(x)$  comme suit :

$$C^{\text{mcs}}(x) = \frac{I_0^{\text{mcs}} - I^{\text{mcs}}(x)}{I_0^{\text{mcs}}} = 1 - \frac{I^{\text{mcs}}(x)}{I_0^{\text{mcs}}} \quad (\text{III-7})$$

Le contraste maximum est obtenu quand le faisceau électronique incident est à l'aplomb de la dislocation c'est-à-dire à  $x = 0$ , sa valeur est obtenue comme suit:

$$C_{\text{max}}^{\text{mcs}} = C^{\text{mcs}}(x = 0) = 1 - \frac{I^{\text{mcs}}(x = 0)}{I_0^{\text{mcs}}} \quad (\text{III-8})$$

### **III-3- 2. PROFIL DE CONTRASTE**

Nous avons simulé le profil du contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky à différentes énergies incidentes  $E_0$  dans le germanium pour deux longueurs de diffusion  $L = 1 \mu\text{m}$  ( $\tau = 10^{-8}\text{s}$ ) et  $L = 10 \mu\text{m}$  ( $\tau = 10^{-6}\text{s}$ ). Le rayon de la dislocation est  $r_d = 0.4\mu\text{m}$  et la force de recombinaison  $\gamma = 0.1\pi$ . La figure III-3 montre les courbes de  $C(x)$  obtenues.

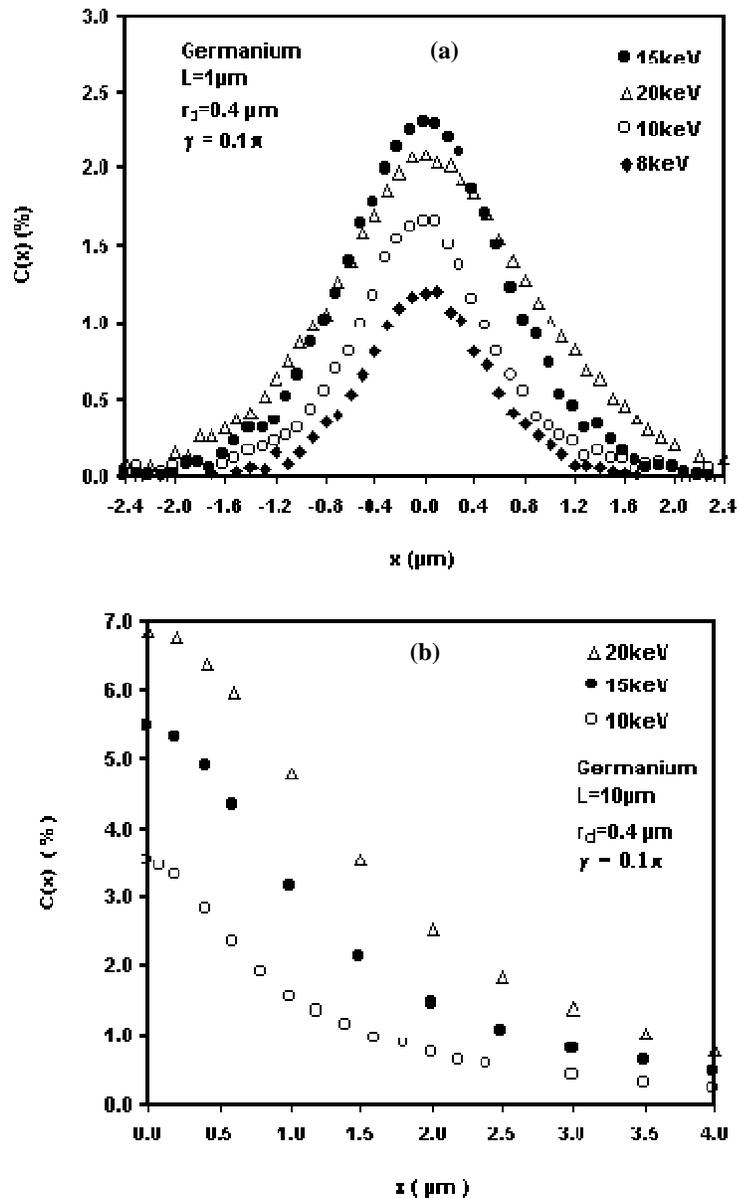


Figure III-3. Profils de contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky obtenus à différentes énergies  $E_0$  du faisceau incident dans le germanium: (a)  $L=1\mu\text{m}$  et (b)  $L=10\mu\text{m}$ .

Le profil de contraste EBIC ainsi obtenu peut être caractérisé par deux grandeurs:

- La valeur maximum du contraste  $C_{\text{max}}$  obtenue quand  $x=0$ , c'est à dire quand le faisceau électronique est à l'aplomb de la dislocation.
- La largeur à mi-hauteur des pics.

On commence la discussion par l'influence de l'énergie  $E_0$  sur le profil de contraste puis on abordera la discussion sur l'influence de la longueur de diffusion  $L$ .

Les courbes de la figure III-3 montrent que  $C_{\max}$  augmente puis diminue quand l'énergie du faisceau incident  $E_0$  augmente. L'augmentation de  $C_{\max}$  peut être expliquée par le fait que les porteurs générés à des distances de plus en plus grandes quand  $E_0$  croît, la probabilité de leur recombinaison dans la dislocation avant collecte augmente. Pour les grandes énergies  $E_0 \geq 20$  keV, une fraction de plus en plus grande de porteurs est générée à une distance qui ne leur permet pas de "sentir" la présence de la dislocation et il en résulte une diminution de  $C_{\max}$ .

La largeur à mi-hauteur des pics des profils caractérise la résolution de l'image EBIC obtenue. Elle mesure l'étendue spatiale de l'action recombinante de la dislocation. Celle-ci est d'autant plus grande que l'énergie  $E_0$  du faisceau électronique incident est grande. La figure III-4 montre la variation de la largeur totale à mi-hauteur des pics FWHM (Full Width at Half Maximum) des profils de contraste en fonction de  $R$  pour deux longueurs de diffusion  $L=1\mu\text{m}$  et  $L=10\mu\text{m}$ . Les résultats de FWHM sont obtenus à partir des courbes de la figure III-3. Le parcours entier  $R$  est calculé par l'expression de Everhart et Hoff [31] (cf. relation I-8).

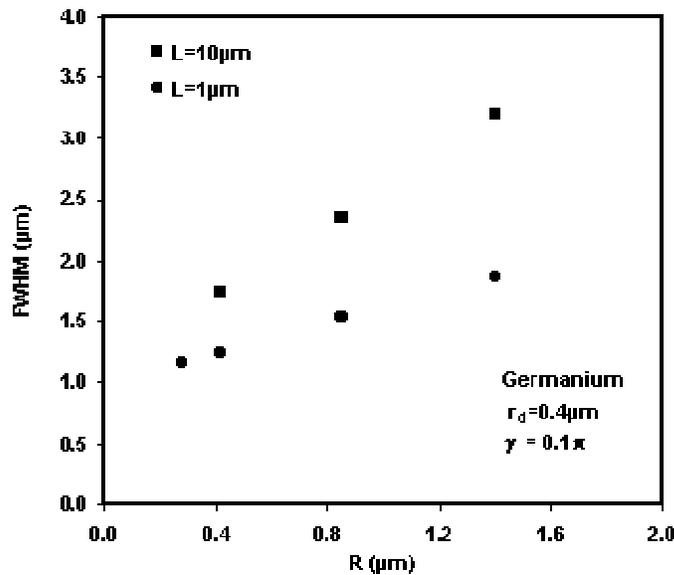


Figure III-4. Variation de FWHM des profils de contraste EBIC d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $R$  dans le germanium.

On note que FWHM est de même ordre de grandeur que le parcours entier  $R$ . Les courbes augmentent d'une manière linéaire quand  $R$  augmente. La courbe concernant  $L=10\mu\text{m}$  présente une pente plus grande que celle de  $L=1\mu\text{m}$ . D'après l'expression de Everhart et Hoff [31] (cf. relation I-8), on peut dire que FWHM est proportionnelle à  $E_0^{1.75}$ . On conclue donc que la résolution de l'image EBIC est proportionnelle à  $E_0^{1.75}$ . Ce résultat est en accord avec l'expérience (Leamy [23]).

À une énergie incidente  $E_0$  fixée, on note une augmentation du contraste et de la largeur à mi-hauteur des pics des profils quand la longueur de diffusion  $L$  augmente. Cette augmentation observée peut s'expliquer par le fait qu'une fraction de plus en plus grande des porteurs de longueur de diffusion plus grande peut atteindre la dislocation. Il en résulte que la probabilité de recombinaison sur la dislocation avant collecte à l'interface métal-semiconducteur augmente. On peut conclure que l'action recombinante de la dislocation est d'autant plus grande que la longueur de diffusion est grande (à  $E_0$  fixée). Ce résultat est en accord avec ceux obtenus par Yakimov [4], Donolato [13] et Pasemann [17] dans leurs études sur le contraste EBIC des dislocations dans les semiconducteurs.

On va s'intéresser dans ce qui suit à l'étude détaillée du contraste EBIC maximum  $C_{\text{max}}$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky et l'effet des différents paramètres sur ce dernier, tels que l'énergie incidente, la durée de vie des porteurs et le rayon de la dislocation.

#### **III-4. VARIATION DU CONTRASTE EBIC MAXIMUM D'UNE DISLOCATION NORMALE A LA SURFACE D'UN CONTACT SCHOTTKY EN FONCTION DES DIFFERENTS PARAMETRES PHYSIQUES**

##### **III-4. 1. VARIATION EN FONCTION DE L'ENERGIE INCIDENTE**

Nous avons effectué des simulations pour calculer le contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky à différentes énergies incidentes et par conséquent à différents parcours entiers  $R$ . Ce dernier est calculé par l'expression I-8 suggérée par le modèle de Everhart et Hoff [31].

Les courbes de la figure III-5 montrent les résultats obtenus par simulation et ceux calculés en utilisant l'expression I-67 du modèle théorique de Donolato [16].

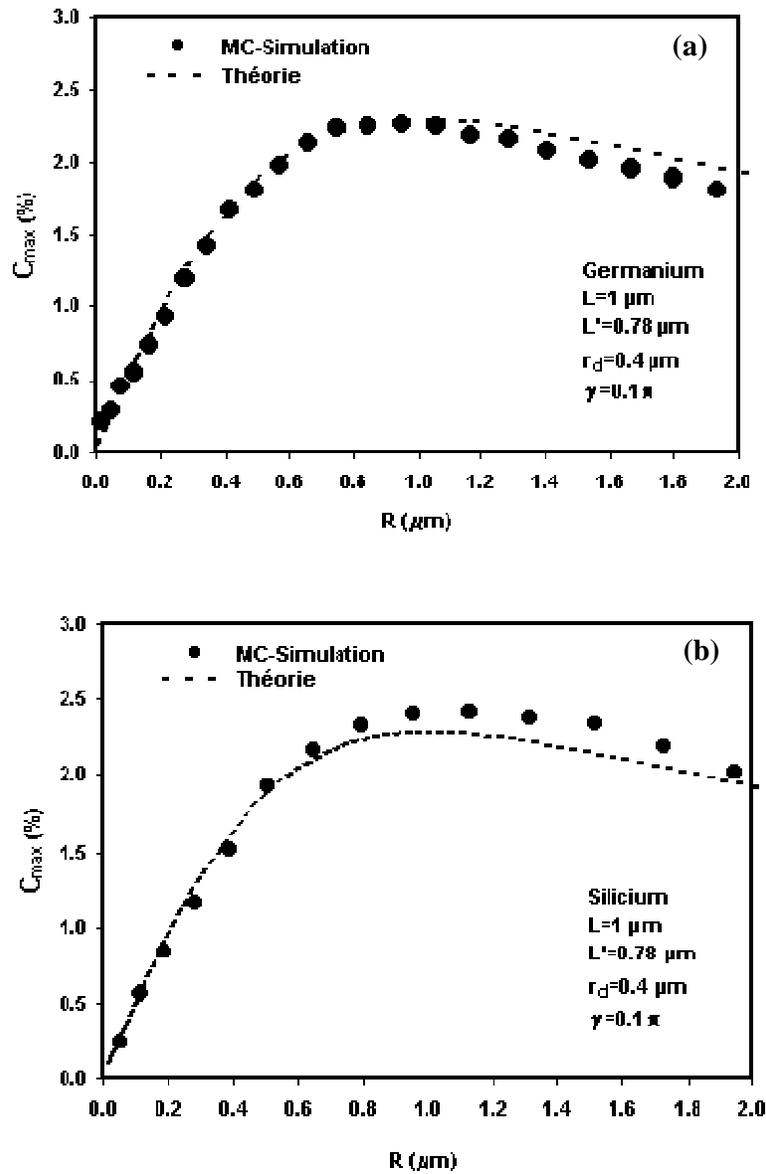


Figure III-5. Variation du contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $R$  dans (a) le germanium et (b) le silicium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

Les courbes de la figure III-5 montrent que  $C_{\max}$  augmente, il atteint un maximum puis il diminue d'une manière progressive quand  $R$  augmente. Quand  $R$  tend vers zéro  $C_{\max}$  tend vers zéro. Nos résultats de simulation ainsi obtenus sont en accords avec ceux obtenus par les deux modèles de Donolato [16] et Pasemann [17].

Nous avons étudié la variation de  $C_{\max}$  en fonction de  $R$  pour différentes valeurs de  $r_d$  en maintenant les valeurs de  $L$  et  $\gamma$  constantes. Les résultats de simulations sont présentés sur la figure III-6

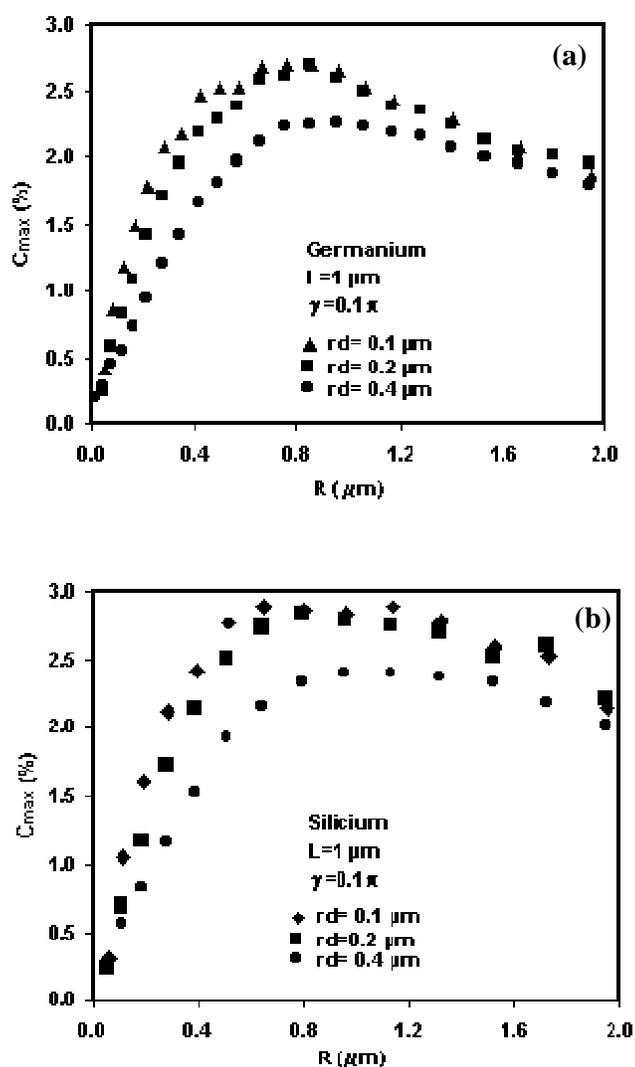


Figure III-6. Variation de  $C_{\max}$  simulé en fonction de  $R$  pour trois valeurs différentes de rayon de dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans (a) le germanium et (b) le silicium.

Les courbes de la figure III-6 possèdent des maxima. En fixant les valeurs des paramètres  $L$  et  $\gamma$ , on remarque que pour chaque valeur fixe du parcours entier  $R$ , le contraste maximum simulé augmente quand le rayon  $r_d$  de la dislocation diminue.

Pour maintenir la force de recombinaison  $\gamma$  donnée par l'expression I-68 ( $\gamma = \frac{\pi \cdot r_d^2}{D} \cdot \left( \frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right)$ ) constante quand  $r_d$  diminue et le paramètre  $L$  reste fixe (i.e.  $\tau$  fixe), il faut diminuer la durée de vie  $\tau'$  des porteurs à l'intérieur de la dislocation. A titre d'exemple, si nous fixons les paramètres  $\tau = 10^{-8}$  s et  $\gamma = 0.1\pi$ , nous obtiendrons les valeurs suivantes:  $\tau' = 0.615 \times 10^{-8}$  s quand  $r_d = 0.4 \mu\text{m}$  et  $\tau' = 0.091 \times 10^{-8}$  s quand  $r_d = 0.1 \mu\text{m}$ . La recombinaison sera donc plus forte dans la dislocation de plus petit rayon si les valeurs de  $L$  et  $\gamma$  sont maintenues fixes. Ce résultat est en accord avec les modèles de Donolato [16] et Pasemann [17].

A faible énergie incidente où le parcours entier  $R$  est inférieur au diamètre  $2r_d$  de la dislocation, le volume de génération se trouve à l'intérieur de la dislocation. On pouvait s'attendre à un contraste élevé contrairement aux résultats de simulation et du modèle théorique qui montrent un contraste faible près de la surface, c'est-à-dire le courant EBIC collecté loin et à l'aplomb de la dislocation sont proches. Ceci peut être expliquée par le fait qu'il y'a une compétition entre la recombinaison dans la dislocation et la collecte près de la surface. A basse énergie, les sources qui génèrent les porteurs se trouvent près de la surface. Comme la durée de vie  $\tau'$  à l'intérieur de la dislocation n'est pas nulle, la probabilité de collecte des porteurs générés près de la surface sera grande et une fraction importante de porteurs peut atteindre la surface avant de se recombiner.

Pour examiner le cas où la durée de vie  $\tau'$  des porteurs minoritaires à l'intérieur de la dislocation est nulle ( $\tau' = 0$ ,  $L' = 0$  et  $\gamma \rightarrow \infty$ ), c'est-à-dire que tout porteur qui pénètre à l'intérieur de la dislocation de rayon  $r_d$  est perdu par recombinaison, nous avons effectué des simulations du contraste EBIC maximum en fonction de l'énergie incidente  $E_0$  et par conséquent en fonction du parcours entier  $R$ . Ce dernier est calculé par l'expression I-8 suggérée par le modèle de Everhart et Hoff [31]. Les résultats obtenus dans (a) le germanium et (b) le silicium sont présentés sur la figure III-7.

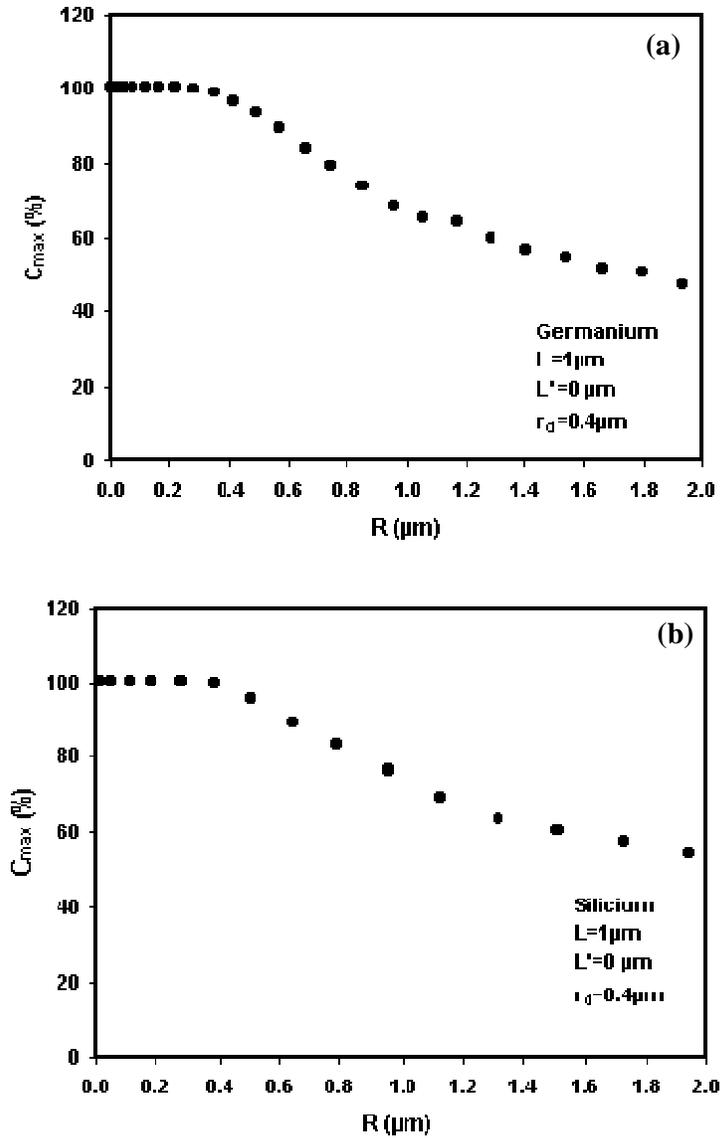


Figure III-7. Variation du contraste EBIC maximum simulé d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction du parcours entier R pour une durée de vie  $\tau' = 0$  dans (a) le germanium et (b) le silicium

D'après les courbes de la figure III-7, on a un contraste égal à 100 % pour les énergies incidentes correspondant à un parcours entier R inférieur à 0.4  $\mu\text{m}$ , puis décroît d'une manière monotone quand R augmente. Un contraste égal à 100 % veut dire que tous les porteurs sont perdus par recombinaison. Il faut noter que le cas où la durée de vie  $\tau'$  des porteurs minoritaires à l'intérieur de la dislocation est nulle ( $\tau' = 0$ ) ne peut être calculé par les modèles théoriques car le terme  $\gamma$  qui définit la force de la recombinaison tend vers  $\infty$  ( $\gamma \rightarrow \infty$ ).

D'après l'expression I-8 suggérée par le modèle de Everhart et Hoff [31],  $R=0.4\mu\text{m}$  correspond à  $E_0=10\text{ keV}$  pour le germanium et  $6\text{ keV}$  pour le silicium. Pour voir dans ce cas si le volume de génération se trouve à l'intérieur de la dislocation de rayon  $0.4\mu\text{m}$ , nous avons représenté sur la figure III-8 les trajectoires électroniques obtenues par la simulation de Monte Carlo en utilisant notre programme.

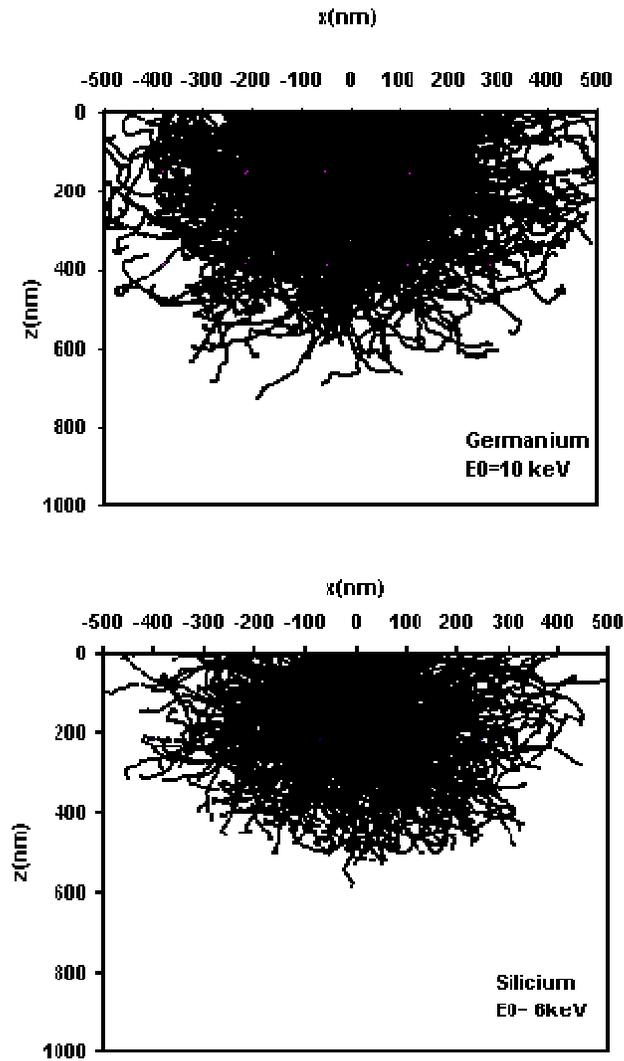


Figure III-8. Trajectoires électroniques dans:  
(a) le germanium et (b) le silicium

D'après la figure III-8, on remarque que le volume de génération s'étend approximativement de  $x = -0.4\mu\text{m}$  à  $x = +0.4\mu\text{m}$  ce qui signifie qu'il est à l'intérieur de la dislocation de diamètre  $2r_d = 0.8\mu\text{m}$ . On remarque aussi que la profondeur de pénétration est égale approximativement à  $0.6\mu\text{m}$  pour le germanium (pour  $10\text{ keV}$ ) et

0.5  $\mu\text{m}$  pour le silicium (pour 6keV). Ces valeurs sont supérieures à la valeur du parcours entier  $R = 0.4\mu\text{m}$  suggérée par le modèle théorique de Everhart et Hoff [31].

Après avoir étudié l'effet de l'énergie sur le contraste EBIC maximum, nous allons nous intéresser dans le paragraphe suivant à l'effet de la longueur de diffusion  $L'$  et par conséquent l'effet de la durée de vie  $\tau'$  des porteurs à l'intérieur de la dislocation.

### **III-4. 2. VARIATION EN FONCTION DE LA LONGUEUR DE DIFFUSION À L'INTERIEUR DE LA DISLOCATION**

Nous avons effectué des simulations de contraste maximum en fonction de la longueur de diffusion à l'intérieur de la dislocation. Pour cela nous avons considéré deux cas: le volume de génération se trouve à l'intérieur et à l'extérieur de la dislocation.

On définit dans tout ce qui suit, l'erreur relative  $\varepsilon_r$  (%) comme suit:

$$\varepsilon_r (\%) = 100 \times \left| \frac{C_{\max}^{\text{the}} - C_{\max}^{\text{mcs}}}{C_{\max}^{\text{the}}} \right| \quad (\text{III-9})$$

Où  $C_{\max}^{\text{the}}$  et  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  sont respectivement les valeurs théorique et simulée du contraste maximum.

#### **III-4. 2. 1. LE VOLUME DE GENERATION EST À L'INTERIEUR DE LA DISLOCATION**

Les deux tableaux III-1 et III-2 et leurs figures III-9 et III-10 respectivement correspondantes montrent nos résultats du contraste EBIC maximum obtenus par simulation. A titre de comparaison, nous avons rapporté dans les mêmes tableaux et les mêmes figures les résultats théoriques calculés par l'expression I-67 du modèle de Donolato [16].

$L'$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.15	0.20	0.26	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	71.61	57.66	45.78	33.75	28.84	15.32	8.79	5.03	2.81	1.47
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	266.45	115.73	64.59	37.68	27.21	14.13	8.07	4.79	2.80	1.51
$\varepsilon_r$ (%)	73.12	50.18	29.12	10.43	5.99	8.42	8.92	5.01	0.36	2.65
$\gamma$	49.74	21.83	12.06	7.05	5.08	2.64	1.51	0.89	0.52	0.28

Tableau III-1: Germanium,  $L=1\mu\text{m}$ ,  $r_d=0.4\mu\text{m}$ ,  $E_0=10\text{keV}$ ,  $R=0.4\mu\text{m}$

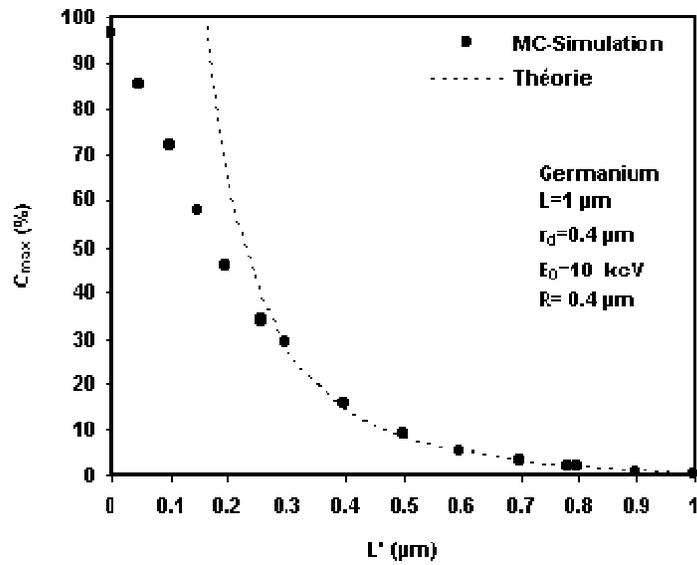


Figure III-9. Variation du contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $L'$  dans le germanium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

$L'$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.15	0.20	0.26	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	74.88	60.71	47.53	34.66	27.16	15.24	8.62	4.85	2.73	1.36
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	255.06	110.78	61.83	36.07	26.05	13.53	7.73	4.58	2.68	1.45
$\varepsilon_r$ (%)	70.64	45.20	23.13	3.91	4.26	12.64	11.51	5.90	1.87	6.21
$\gamma$	49.74	21.83	12.06	7.05	5.08	2.64	1.51	0.89	0.52	0.28

Tableau III-2: Silicium,  $L=1\mu\text{m}$ ,  $r_d=0.4\mu\text{m}$ ,  $E_0=6\text{keV}$ ,  $R=0.4\mu\text{m}$

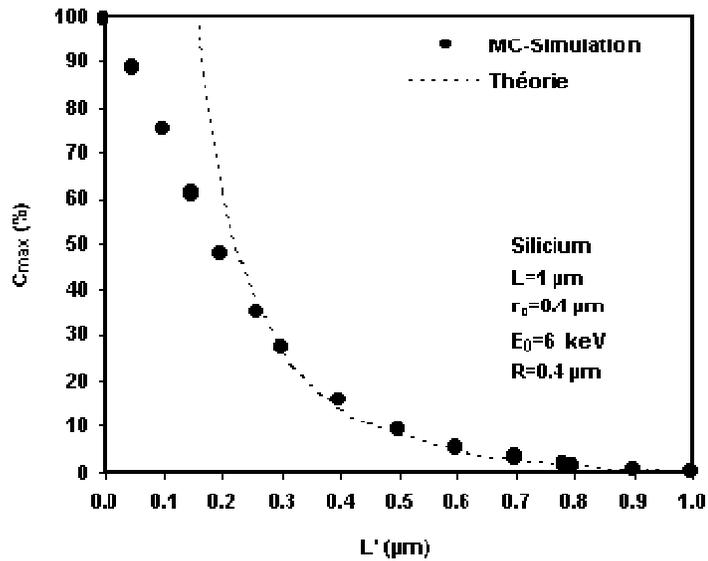


Figure III-10. Variation du contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $L'$  dans le silicium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

Les deux tableaux III-1 et III-2 montrent que nos résultats du contraste maximum obtenus par simulation,  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  sont inférieurs à 100% pour toutes valeurs du paramètre  $L'$ , tandis que les valeurs théoriques,  $C_{\max}^{\text{the}}$  sont supérieures à 100 % pour les valeurs  $L' < 0.15 \mu\text{m}$ . Un contraste supérieur à 100% n'a pas un sens physique car il ne doit pas dépasser 100%. On note un accord d'une erreur relative inférieure à 10% entre nos résultats et ceux calculés par l'expression I-67 (modèle de Donolato [16]) pour les valeurs du paramètre  $L'$  supérieures à  $0.26 \mu\text{m}$  qui correspond à une force de recombinaison  $\gamma < 7$  et un contraste maximum inférieur à 35%.

Les courbes des figures III-9 et III-10, montrent que le contraste maximum diminue d'une manière monotone quand la longueur de diffusion à l'intérieur de la dislocation augmente et tend vers zéro quand  $L' = L = 1 \mu\text{m}$ . Quand  $L'$  tend vers zéro, les valeurs théoriques,  $C_{\max}^{\text{the}}$  prennent des valeurs supérieures à 100% tandis que nos valeurs simulées,  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  prennent des valeurs comprises entre 90% et 100%.

### III-4. 2. 2. LA DISLOCATION EST À L'INTERIEURE DU VOLUME DE GENERATION

Les deux tableaux III-3 et III-4 et leurs figures III-11 et III-12 respectivement correspondantes montrent les résultats du contraste maximum obtenus par simulation et ceux calculés par l'expression I-67 du modèle de Donolato [16].

L' ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	45.71	33.35	22.47	14.51	9.29	5.67	3.39	1.89	0.80
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	346.88	84.09	35.43	18.40	10.51	6.23	3.65	1.97	0.82
$\varepsilon_r$ (%)	86.82	60.34	36.58	21.14	11.61	8.99	7.12	4.06	2.44
$\gamma$	49.74	12.06	5.08	2.64	1.51	0.89	0.52	0.28	0.12

Tableau III-3: Germanium,  $L=1\mu\text{m}$ ,  $r_d=0.4\mu\text{m}$ ,  $E_0=20\text{keV}$ ,  $R=1.4\mu\text{m}$

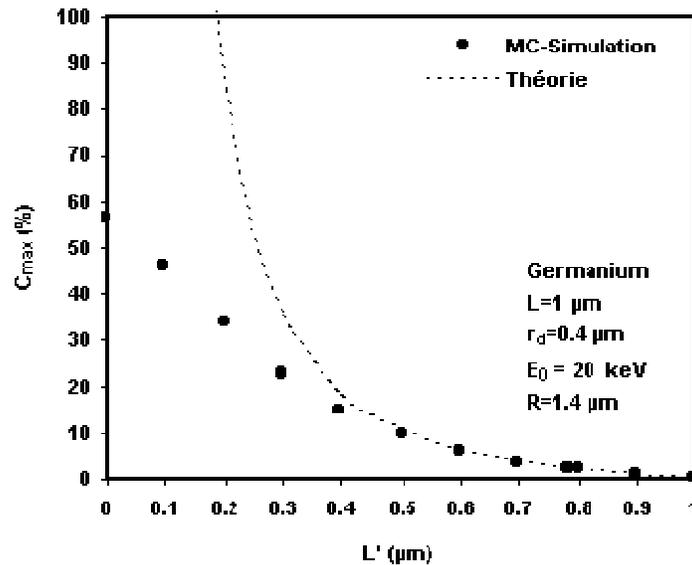


Figure III-11. Variation du contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $L'$  dans le germanium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

$L'$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.0
$C_{\text{max}}^{\text{mes}}$ (%)	43.45	32.77	23.02	15.67	10.44	7.09	4.89	3.51	2.53	1.97
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	317.56	79.15	35.00	19.55	12.40	8.51	6.17	4.65	3.61	2.86
$\varepsilon_r$ (%)	86.32	58.60	34.23	19.85	15.81	16.69	20.75	24.52	29.92	31.12
$\gamma$	28.25	7.04	3.11	1.74	1.10	0.76	0.55	0.41	0.32	0.25

Tableau III-4: Germanium,  $L=3.2\mu\text{m}$ ,  $r_d=0.3\mu\text{m}$ ,  $E_0=20\text{keV}$ ,  $R=1.4\mu\text{m}$

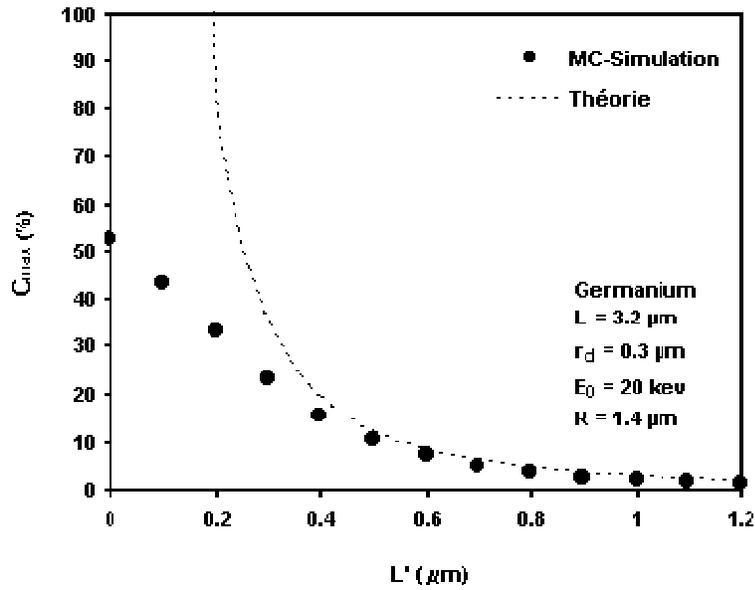


Figure III-12. Variation du contraste EBIC maximum d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky en fonction de  $L'$  dans le germanium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

Les résultats des deux tableaux III-3 et III-4 montrent un contraste maximum théorique  $C_{\max}^{\text{the}}$  supérieur à 300 % pour  $L' = 0.10\mu\text{m}$ . les résultats simulés sont en accord d'une erreur relative inférieure à 20% avec ceux calculés par l'expression I-67 pour les valeurs  $L' > 0.4\mu\text{m}$  qui correspond à une force de recombinaison  $\gamma < 3$  et un contraste  $C_{\max} < 20\%$  dans le cas  $L = 1\mu\text{m}$  et pour  $0.4 < L'(\mu\text{m}) < 0.7$  qui correspond à  $0.5 < \gamma < 2$  et  $5\% < C_{\max} < 20\%$  dans le cas  $L = 3.2\mu\text{m}$ .

Les deux figures III-11 et III-12 montrent que les courbes de  $C_{\max}$  diminuent d'une manière monotone quand  $L'$  croit et tendent vers zéro quand  $L' = L$ . Quand  $L'$  tend vers zéro, nos valeurs simulées  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  prennent des valeurs comprises entre 50% et 60% tandis les valeurs théoriques  $C_{\max}^{\text{the}}$  prennent des valeurs supérieures à 100%.

Les valeurs simulées du contraste maximum,  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  sont généralement inférieures à celles calculées par l'expression I-67. En effet on pouvait prévoir que pour les faibles valeurs du paramètre  $L'$ , (défauts fortement recombinants), l'approximation  $\Delta p(\mathbf{r}') = \Delta p_0(\mathbf{r}')$  suggérée dans le modèle de Donolato [16] ne soit pas valide. Ceci peut être expliquée en tenant compte de la condition  $L' < L$  ( $\tau' < \tau$ ), la concentration de l'excès de porteurs minoritaires  $\Delta p(\mathbf{r}')$  dans le défaut doit être plus faible que  $\Delta p_0(\mathbf{r}')$  en absence de défaut. L'intérêt du résultat obtenu par simulation est de donner un domaine de variation de la force de recombinaison  $\gamma$  du défaut qui peut être décrit par l'approximation linéaire.

### **III-4. 3. VARIATION EN FONCTION DU RAYON DE LA DISLOCATION**

#### **III-4. 3. 1. CAS $L' \neq 0$**

Nous avons effectué des simulations du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  pour deux valeurs de  $L$  différentes. Les tableaux III-5-8 et leurs figures III-13-16 respectivement correspondantes montrent nos résultats obtenus par simulation et ceux calculés par l'expression I-67 du modèle de Donolato [16].

$r_d$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45	0.50	0.55	0.60	0.70
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	0.33	1.46	2.28	3.17	4.08	5.03	5.96	6.82	7.65	8.42	9.75
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	0.63	2.03	2.78	3.50	4.16	4.79	5.35	5.87	6.35	6.79	7.58
$\varepsilon_r$ (%)	47.62	28.08	17.99	9.43	1.92	5.01	11.40	16.18	20.47	24.01	28.63
$\gamma$	0.06	0.22	0.35	0.50	0.68	0.89	1.13	1.40	1.69	2.01	2.74

Tableau III-5: Germanium,  $L=1\mu\text{m}$ ,  $L'=0.6\mu\text{m}$ ,  $E_0=10\text{keV}$ ,  $R=0.4\mu\text{m}$

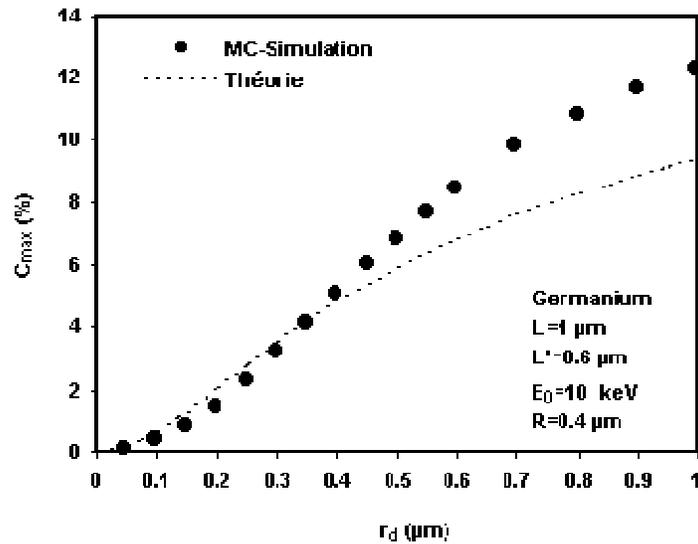


Figure III-13. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans le germanium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

$r_d$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45	0.50	0.55	0.60	0.70
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	0.34	1.48	2.24	3.14	4.05	4.85	5.70	6.55	7.37	8.03	9.15
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	0.63	1.99	2.71	3.38	4.01	4.58	5.11	5.59	6.04	6.45	7.18
$\varepsilon_r$ (%)	46.03	25.63	17.34	7.10	1.00	5.90	11.55	17.17	22.02	24.50	27.44
$\gamma$	0.06	0.22	0.35	0.50	0.68	0.89	1.13	1.40	1.69	2.01	2.74

Tableau III-6: Silicium,  $L=1\mu\text{m}$ ,  $L'=0.6\mu\text{m}$ ,  $E_0=6\text{keV}$ ,  $R=0.4\mu\text{m}$

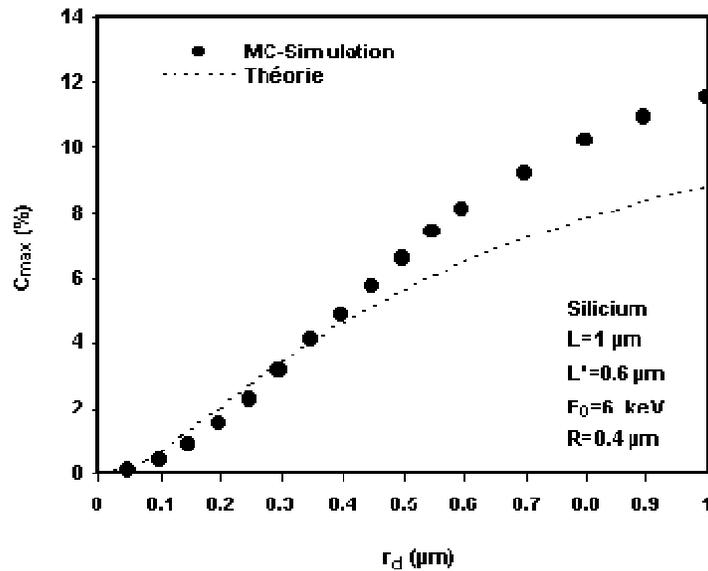


Figure III-14. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans le silicium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

$r_d$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.20	0.30	0.40	0.45	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	0.18	0.80	1.97	3.67	4.74	5.88	8.33	10.87	13.42	15.91
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	0.34	1.32	2.86	4.84	5.95	7.12	9.58	12.11	14.63	17.08
$\varepsilon_r$ (%)	47.06	39.39	31.12	24.17	20.34	17.42	13.05	10.24	8.27	6.85
$\gamma$	0.03	0.11	0.25	0.45	0.57	0.71	1.02	1.39	1.81	2.29

Tableau III-7: Germanium,  $L=3.2\mu\text{m}$ ,  $L'=1\mu\text{m}$ ,  $E_0=20\text{keV}$ ,  $R=1.4\mu\text{m}$

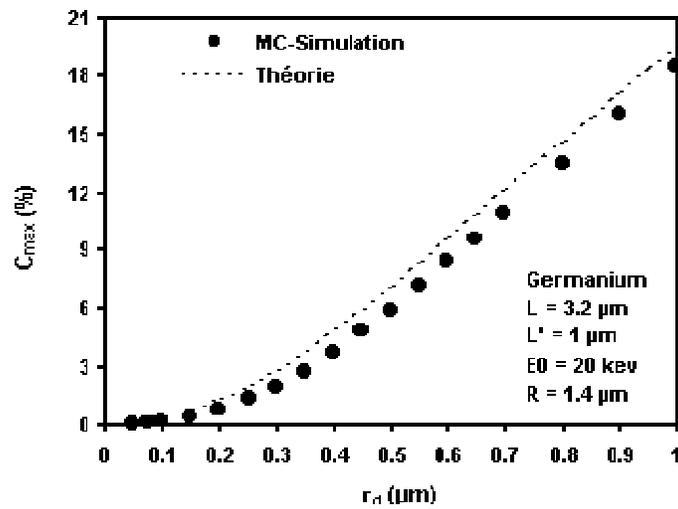


Figure III-15. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans le germanium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

$r_d$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.30	0.50	0.65	0.80	1.00
$C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$ (%)	0.23	2.28	6.42	10.29	14.30	19.80
$C_{\text{max}}^{\text{the}}$ (%)	0.26	2.34	6.32	10.38	15.18	22.44
$\varepsilon_r$ (%)	11.54	2.56	1.58	0.87	5.80	11.76
$\gamma$	0.03	0.25	0.71	1.19	1.81	2.83

Tableau III-8: Silicium,  $L=3.2\mu\text{m}$ ,  $L'=1\mu\text{m}$ ,  $E_0=20\text{keV}$ ,  $R=3.2\mu\text{m}$

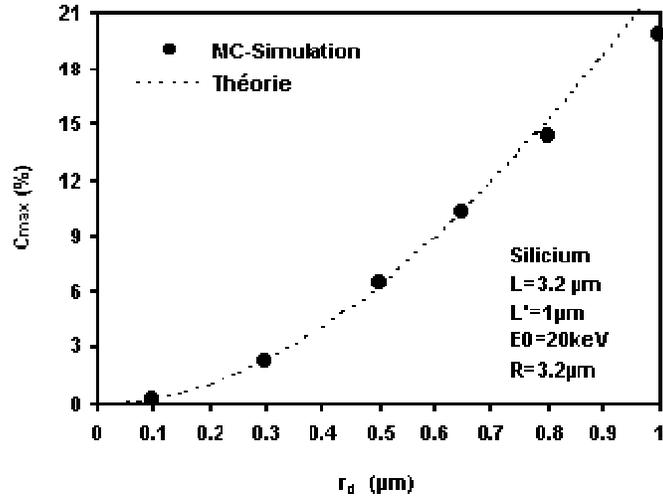


Figure III-16. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans le silicium. Les courbes théoriques sont calculées par l'expression I-67

Les courbes des figures III-13-16 montrent que le contraste EBIC maximum croît avec le rayon de la dislocation. L'augmentation de  $C_{\text{max}}$  est beaucoup plus rapide quand la dislocation se trouve à l'intérieur du volume de génération ( $2r_d < R$ ) et devient un peu lente dans le cas contraire (i.e.  $2r_d > R$ ). Le contraste maximum s'annule quand le rayon de la dislocation  $r_d$  tend vers zéro et il tend vers une valeur inférieure à 20% quand  $r_d = 1\mu\text{m}$ .

Les tableaux III-5-8 montrent que nos résultats du contraste maximum obtenus par simulation  $C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$  sont en accord avec ceux calculés par l'expression I-67 (modèle de Donolato [16]) avec une erreur relative inférieure à 20% dans les conditions suivantes:

- $0.2 < r_d$  ( $\mu\text{m}$ )  $< 0.6$  qui correspond à  $0.3 < \gamma < 2$  et  $2 < C_{\text{max}}(\%) < 8$  dans le cas  $L = 1\mu\text{m}$ ,  $L' = 0.6\mu\text{m}$  et  $R = 0.4\mu\text{m}$ .
- $0.4 < r_d$  ( $\mu\text{m}$ )  $< 1$  qui correspond à  $0.5 < \gamma < 3$  et  $4 < C_{\text{max}}(\%) < 20$  dans le cas  $L = 3.2\mu\text{m}$ ,  $L' = 1\mu\text{m}$  et  $R = 1.4\mu\text{m}$ .
- $0.1 \leq r_d$  ( $\mu\text{m}$ )  $< 1$  qui correspond à  $0.03 \leq \gamma < 3$  et  $0.2 < C_{\text{max}}(\%) < 20$  dans le cas  $L = 3.2\mu\text{m}$ ,  $L' = 1\mu\text{m}$  et  $R = 3.2\mu\text{m}$ .

On remarque que le domaine d'accord entre nos résultats  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  obtenus par simulation et ceux calculés par l'expression I-67 du modèle de Donolato [16] s'élargit quand la longueur de diffusion  $L$  croit et se rapproche du parcours entier  $R$ .

### III-4. 3. 2. CAS $L'=0$

Nous avons effectué des simulations de contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  pour différentes longueur de diffusion  $L$  à l'extérieur de la dislocation dans le germanium en considérant les paramètres suivants:  $L' = 0\mu\text{m}$  et  $E_0=10\text{keV}$ . Les résultats sont représentés sur la figure III-17.

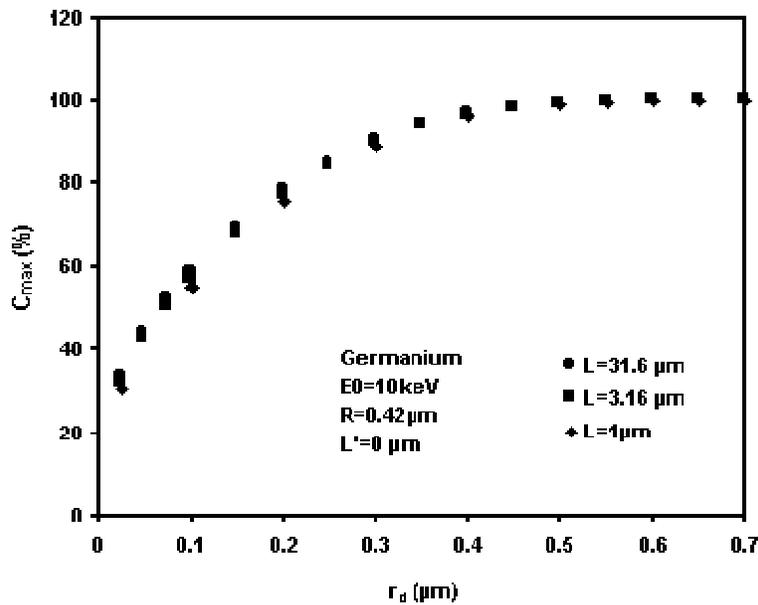


Figure III-17. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky dans le germanium pour différentes valeurs de  $L$  avec  $L' = 0\mu\text{m}$  et  $E_0=10\text{keV}$ .

La figure ci dessus montre que le contraste EBIC maximum simulé croit avec le rayon  $r_d$  de la dislocation puis il se sature en prenant une valeur égale à 100% quand  $r_d > 0.4\mu\text{m}$ . Quand  $r_d$  tend vers zéro, le contraste maximum simulé tend vers une valeur comprise entre 20 % et 30 %. On note que la longueur de diffusion  $L$  à l'extérieur de la dislocation n'influe pas sur le contraste EBIC maximum quand  $L'=0$ .

Pour ce même cas ( $L' = 0 : \gamma \rightarrow \infty$ ), nous avons maintenu la longueur de diffusion  $L$  constante et nous avons effectué des simulations pour calculer le contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  de la dislocation dans le germanium à différentes valeurs de l'énergie  $E_0$ . Les résultats sont représentés sur la figure III-18.

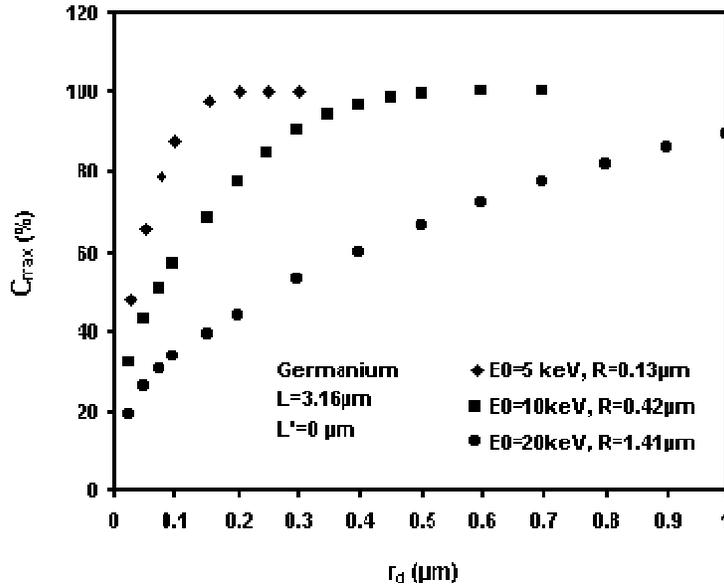


Figure III-18. Variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky à différentes valeurs de l'énergie  $E_0$  dans le germanium.  $L=3.16 \mu\text{m}$  et  $L'=0 \mu\text{m}$

La figure III-18 montre que le contraste EBIC maximum simulé augmente avec le rayon  $r_d$  de la dislocation puis il se sature quand  $r_d > R$ . Cette valeur de saturation est égale à 100%. L'augmentation du contraste EBIC maximum avec  $r_d$  est due à l'augmentation du volume de recombinaison.

Il est difficile de simuler le contraste quand le rayon de la dislocation tend vers zéro ( $r_d \rightarrow 0$ ) car la longueur d'étape doit être maintenue plus petite que le diamètre ( $2r_d$ ), ce qui est assuré par l'augmentation du nombre d'étape NST qui fait croître considérablement le temps de simulation.

Les résultats présentés sur la figure III-18 montrent que pour des valeurs de rayons dislocation inférieures à 50nm, les valeurs de contrastes obtenus pour des tensions primaires généralement utilisées en pratique (10keV-20keV) sont voisines de 20%-30%. Par conséquent, on peut conclure que l'observation expérimentale éventuelle de contraste supérieur à 20%-30% pourrait être associée à des rayons de dislocation dépassant les 100nm, ce qui peut être une indication de la présence d'impuretés ségréguées au voisinage de la dislocation.

### **III. 5. CONCLUSION**

Dans le cas  $L' \neq 0$ , nos résultats de simulation en fonction de l'énergie  $E_0$  et par conséquent en fonction du parcours entier  $R$  ont montré que quand  $R$  augmente le contraste maximum augmente puis diminue en passant par un maximum tandis que FWHM augmente d'une manière linéaire. FWHM est proportionnelle à  $E_0^{1.75}$ . L'action recombinante de la dislocation est d'autant plus grande que la longueur de diffusion  $L$  est grande (à  $E_0$  fixée). Dans le cas  $L' = 0$ , le contraste maximum simulé  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  est égal à 100 % quand le volume de génération se trouve à l'intérieur de la dislocation de rayon  $r_d$  ( $R < 2r_d$ ), puis décroît d'une manière monotone quand  $R$  augmente.

La variation du contraste maximum en fonction de  $L'$ , a montré que:

- Le contraste maximum s'annule quand le paramètre  $L'$  tend vers  $L$
- Quand le paramètre  $L'$  tend vers zéro, les valeurs théoriques du contraste maximum  $C_{\max}^{\text{the}}$  prennent des valeurs supérieures à 100% tandis que nos valeurs simulées  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  sont toujours inférieures à 100%.
- Nos résultats du contraste maximum simulé  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  diffèrent de 20% de ceux calculés en utilisant le modèle de Donolato pour une force de recombinaison  $\gamma < 2$  et un contraste  $C_{\max} < 20\%$ .

La variation du contraste maximum en fonction de  $r_d$  a montré que:

Dans le cas  $L' \neq 0$ , le contraste maximum s'annule quand le rayon de la dislocation  $r_d$  tend vers zéro et il tend vers une valeur inférieure à 20% quand  $r_d = 1\mu\text{m}$ . Nos résultats du contraste maximum obtenus par simulation  $C_{\text{max}}^{\text{mes}}$  diffèrent de 20% de ceux calculés par l'expression de Donolato pour une force de recombinaison  $\gamma < 2$  et  $C_{\text{max}} < 10\%$  pour  $L = 1\mu\text{m}$  et  $C_{\text{max}} < 20\%$  pour  $L = 3.2\mu\text{m}$ .

Dans le cas  $L'=0$ , la longueur de diffusion  $L$  à l'extérieur de la dislocation n'influe pas sur le contraste. Finalement pour ce même cas ( $L' = 0$ ,  $\gamma \rightarrow \infty$ ), l'observation expérimentale éventuelle de contraste supérieur à 20%-30% pourrait être associée à des rayons de dislocation dépassant les 100nm, ce qui peut être une indication de la présence d'impuretés ségréguées au voisinage de la dislocation.

## CONCLUSION GÉNÉRALE

La création des paires électron trou s'effectue tout au long du parcours en zig zag des électrons incidents dans les semi-conducteurs, leur collecte à l'aide d'une jonction p-n ou un contact Schottky constitue le courant EBIC. Nous avons mis en œuvre un algorithme de simulation par la méthode de Monte Carlo pour calculer ce courant et étudier le contraste associé aux dislocations. Cet algorithme simule d'abord les trajectoires électroniques, la dissipation d'énergie et la génération des porteurs dans un semi-conducteur bombardé par un faisceau électronique d'énergie  $E_0$ . Une distribution de sources ponctuelles est obtenue dans cette première phase. Ensuite, la diffusion aléatoire des porteurs générés à partir de chaque source ponctuelle est simulée. Après un certain nombre total d'étapes de simulations NSTT, le porteur minoritaire est considéré comme collecté s'il atteint la surface prise au bord du contact Schottky ( $z=0$ ) sinon, il est considéré perdu par recombinaison.

Nous avons testé l'influence des différents paramètres de simulation sur la valeur du courant collecté en absence de défaut. Les résultats montrent que le nombre des électrons incidents  $N_e$  considérés influent d'une manière faible sur le courant EBIC normalisé simulé  $I_0^{mcs}$ . La longueur d'étape  $\Delta S = L/\sqrt{NST}$  influe peu sur le courant tant qu'elle est choisie inférieure à la longueur de diffusion  $L$  des porteurs minoritaires. Nous avons aussi calculé un courant EBIC normalisé semi simulé  $I_0^{SS}$  en absence de défaut en utilisant l'expression analytique exacte du courant et la distribution simulée de sources de génération des porteurs. La comparaison entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  nous permet de tester la validité de notre algorithme dans l'étude du contraste de dislocation. Les résultats montrent que le nombre total d'étapes NSTT influe fortement sur la valeur simulée du courant  $I_0^{mcs}$ . Une valeur  $NSTT=2.5NST$  donne le meilleur accord entre  $I_0^{mcs}$  et  $I_0^{SS}$  à 10 keV pour différentes longueurs de diffusion. A 20keV, l'erreur relative  $|I_0^{mcs} - I_0^{SS}|/I_0^{SS}$  est inférieure à 10% pour le germanium et 26% pour le silicium quand  $L=1\mu m$ . Cette différence est réduite à une valeur inférieure à 1% pour le germanium et à 4 % pour le silicium quand le nombre NSTT est pris égal à  $3.5NST$  et  $4NST$  respectivement.

La simulation Monte Carlo du courant EBIC collecté en présence d'un défaut de forme géométrique quelconque dans un semi-conducteur, nous a permis d'exprimer le profil de contraste EBIC du cas particulier d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky. Ce profil est caractérisé par deux grandeurs: la largeur à mi-hauteur des pics et le contraste maximum.

Dans le cas  $L' \neq 0$ , nos résultats de simulations en fonction du parcours entier  $R$  ont montré que la largeur totale à mi-hauteur des pics (FWHM) des profils de contraste augmente d'une manière linéaire quand  $R$  augmente tandis que le contraste maximum augmente puis diminue en passant par un maximum. FWHM est proportionnelle à  $E_0^{1.75}$ . L'action recombinante de la dislocation est d'autant plus grande que la longueur de diffusion  $L$  est grande (à  $E_0$  fixée). Ces résultats obtenus par simulations sont en accord avec ceux de la littérature.

Dans le cas  $L' = 0$  ( $\tau' = 0$ ), la variation du contraste en fonction de  $R$  a montré que  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  est égal à 100% quand le volume de génération se trouve à l'intérieur de la dislocation ( $R < 2r_d$ ), puis décroît d'une manière monotone quand  $R$  augmente. Il faut noter que le cas où  $\tau' = 0$  ne peut être calculé par les modèles théoriques car le terme  $\gamma$  qui définit la force de la recombinaison tend vers  $\infty$  ( $\gamma \rightarrow \infty$ ).

Notre étude du contraste en fonction de la longueur de diffusion  $L'$  des porteurs minoritaires à l'intérieur d'une dislocation normale à la surface d'un contact Schottky a montré que le contraste maximum s'annule quand le paramètre  $L'$  tend vers  $L$ . Quand  $L'$  tend vers zéro, les valeurs théoriques  $C_{\max}^{\text{the}}$  prennent des valeurs supérieures à 100% tandis que nos valeurs  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  obtenues par simulations sont toujours inférieures à 100%. Nos résultats du contraste maximum  $C_{\max}^{\text{mcs}}$  diffèrent de 20 % de ceux calculés en utilisant le modèle de Donolato pour une force de recombinaison  $\gamma < 2$ .

Notre étude de la variation du contraste EBIC maximum en fonction du rayon  $r_d$  de la dislocation a montré que :

Dans le cas où le paramètre  $L'$  n'est pas nul ( $L' \neq 0$ ), le contraste maximum s'annule quand le rayon  $r_d$  tend vers zéro et il tend vers une valeur inférieure à 20% quand  $r_d = 1 \mu\text{m}$ . Nos résultats du contraste maximum obtenus par simulations  $C_{\text{max}}^{\text{mcs}}$  diffèrent de 20% de ceux calculés par l'expression analytique de Donolato pour une force de recombinaison  $\gamma < 2$ .

Dans le cas où  $L' = 0$ , la longueur de diffusion  $L$  à l'extérieur de la dislocation n'influe pas sur le contraste maximum. Finalement pour ce même cas ( $L' = 0, \gamma \rightarrow \infty$ ), l'observation expérimentale éventuelle d'un contraste supérieur à 20%-30% pourrait être associée à des rayons de dislocation dépassant les 100nm, ce qui peut être une indication de la présence d'impuretés ségréguées au voisinage de la dislocation.

Ce travail nous a permis d'élaborer un programme de simulation qui peut être utilisé comme un outil de recherche pour la caractérisation locale de l'activité électrique des défauts étendus dans les semi-conducteurs, particulièrement des dislocations par la technique EBIC. Il constitue également un outil pédagogique très intéressant pour l'enseignement d'un cours sur l'interaction électron-matière.

## REFERENCES

- [1] P. R. **Wilshaw**, T. S. Fell and M. D. Coteau, J. Phys. IV, Colloq. C6, Suppl. au J. phys. III, Vol. 1 (1991) 3
- [2] B. **Sieber**, J. L. Farvacque and P. Carton, J. phys. III France, Vol. 2 (1992) 325
- [3] M. **Kittler** and C. Ulhaq-Bouillet, Mater. Sci. Eng. B Vol. 24 (1994) 52
- [4] E. B. **Yakimov**, J. Phys. Condens. Matter Vol. 14 (2002) 13069
- [5] S. **Pandelov**, W. Seifer, M. Kittler and J. Reif, J. Phys. Condens. Matter Vol. 14 (2002) 13161
- [6] J. **Chen**, T. Sekiguchi, R. Xie, P. Ahmet, T. Chikyo, D. Yang, S. Ito and F. Yin, Scripta Materialia, Vol. 52 (2005) 1211
- [7] E. B. **Yakimov**, Bull. Mater. Sci. Vol. 28, No.4 (2005) 367
- [8] C. **Donolato**, Optik, Vol. 52, No.1 (1978/79)19
- [9] C. **Donolato** and H. Klann, J. Appl. Phys. Vol. 51, No.3 (1980) 1624
- [10] J. **Marek**, J. Appl. Phys. Vol. 55, No.2 (1984) 318
- [11] J. D. **Zook**, Appl. Phys. Lett. Vol.8 (1980) 223
- [12] C. **Donolato**, J. Physique, Coll. C4, Suppl. au No.9, Tome 44 (1983) 269
- [13] C. **Donolato**, Appl. Phys. Lett. Vol. 34, No.1 (1979) 80
- [14] L. **Pasemann**, H. Blumtritt, and R. Gleichmann, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 70 (1982) 197
- [15] J. **Marek**, J. Appl. Phys. Vol. 53 (1983) 1454
- [16] C. **Donolato**, J. Appl. Phys. Vol. 70, No. 12 (1991) 7657
- [17] L. **Pasemann**, J. Appl. Phys. Vol. 69, No. 9 (1991) 6387
- [18] M. **Stemmer**, Mater. Sci. Eng. B, Vol. 24 (1994) 180
- [19] N. **Tabet** and M. Ledra, Mater. Sci. Eng. B, Vol. 42 (1996) 181
- [20] N. **Tabet**, Solid State Phenomena, Vol. 63-64 (1998) 89
- [21] C. J. **Wu** and D. B. Wittry, J. Appl. Phys., Vol. 49, No. 5 (1978) 2827
- [22] B. **Akamatsu**, and J. P. Henoc, J. Appl. Phys., Vol. 52, No.12 (1981) 7245
- [23] H. J. **Leamy**, J. Appl. Phys., Vol. 53, No. 6 (1982) 51
- [24] N. **Tabet**, C. Monty and Y. Marfaing, Revue Phys. Appl. Vol. 24 (1989) 871
- [25] K. **Kanaya** and S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 5 (1972) 43.
- [26] H. A. **Bethe** (1933) (cité dans Newbury [27])

- [27] D. E. **Newbury**, D. C. Joy, P. Echlin, C. E. Fiori, J. I. Goldstein, « Advanced Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis », Plenum Press, New York, (1986).
- [28] R. **Shimizu** and K. Murata, J. Appl. Phys., Vol. 42, No. 1 (1971) 387
- [29] B. G. **Yacobi** and D. B. Holt, J. Appl. Phys., Vol. 59, No. 4 (1986) R1
- [30] D. F. **Kyser**, Proc. 6th Int. Conf. On X-ray Optics and Microanalysis, (1971) 147
- [31] T. E. **Everhart** and P. H. Hoff, J. Appl. Phys., Vol. 42, No. 13 (1971) 5837
- [32] A. E. **Gruen** (1957) (cité par Everhart et al [31])
- [33] E. J. **Sternglass**, Phys. Rev., Vol. 95, No. 2 (1954) 345
- [34] H. J. **Fitting** and J. Reinhardt, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 88 (1985) 245
- [35] H. J. **Fitting**, H. Glaefeke and W. Wild, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 43 (1977) 185
- [36] V. E. **Cosslett** et R. N. Thomas (1965) (cité par Kanaya et al [25])
- [37] E. **Napchan**, Revue Phys. Appl, colloq. C6, Suppl. au No. 6, Tome 24 (1989) 15
- [38] DJ. **Mekki**, R. J. Tarento and N. Tabet, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 130 (1992) 383
- [39] C. A. **Klein**, Phys. Lett. Vol. 24A, No. 10 (1967) 513
- [40] C. A. **Klein**, J. Appl. Phys., Vol. 39, No. 4 (1968) 2029
- [41] H. R. **Zulliger**; J. Appl. Phys., Vol. 42, No. 13 (1971) 5570
- [42] D. C. **Joy**, Journal of Microscopy, Vol. 143, Pt3 (1986) 233.
- [43] C. **Donolato** Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 65 (1981) 649
- [44] **Berz** et Kuiken (cité dans Tabet [45], p122)
- [45] N. **Tabet**, Thèse de Docteur ès-Sciences Physique, Université de Paris Sud, Centre d'Orsay, France, (1988)
- [46] W. **Schockley** et W. T. Read, (1952) (cité dans Tabet [45], p 41)
- [47] C. **Donolato**, (1985) (cité dans Tabet [45], p 43)
- [48] K. **Murata**, T. Matsukawa and R. Shimizu, Jap. J. Appl. Phys., Vol.10, No. 6 (1971) 678.
- [49] K. **Murata**, J. Appl. Phys., Vol. 45, No. 9 (1974) 4110
- [50] I. **Adesida**, R. Shimizu and T. E. Everhart, J. Appl. Phys., Vol. 51 No. 11 (1980) 5962
- [51] **Kang-Yoon** Lee, Guang-Sup Cho and Duk-In Choi, J. Appl. Phys., Vol. 67 No. 12 (1990) 7560.
- [52] **Wall** et al. (1974) (cité par Fontaine [53])

- [53] G. **Fontaine**, « Microanalyse et Microscopie Electronique à Balayage »,  
Proceeding de l'école d'été de St-Martin-d'Hères, Les éditions de Physique,  
ORSAY (France) (1978) 39
- [54] M. **Ledra**, Thèse de Magister en Electronique, Université de Constantine, (1996)
- [55] G. **Neubert** and S. Rogaschewski, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 59 (1980) 35
- [56] H. E. **Bishop**, Proc. Phys. Soc., 85 (1965) 855.
- [57] G. **Oelgart** and U. Werner, Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 85 (1984) 205
- [58] U. **Werner**, F. Koch and G. Oelgart, J. Phys. D: Appl. Phys. Vol. 21 (1988) 116

## المستخلص

استعملت تقنية التيار المحرض بحزمة إلكترونية استعمالاً واسعاً لتصوير حركة الالتحام الشحني في العيوب الممتدة مثل التفككات في شبه الموصلات. درسنا في هذا العمل تكوين التباين في صور EBIC لعيوب ممتدة في شبه الموصلات. عرضنا التحليل النظري للتباين و حدود صلاحية النماذج المتداولة ثم عرضنا طريقة محاكاة مونت كارلو التي طورناها لحساب تباين EBIC لعيب ذي شكل غير محدد. تعتمد الطريقة على محاكاة المسارات الإلكترونية الأولية داخل الشبه موصل و الطاقة المبددة التي تحدد توليد حاملات الشحنات تحت القصف الإلكتروني. تم حساب تباين EBIC لعيب ذي شكل خاص عن طريق محاكاة الانتشار العشوائي للحاملات الشحنية المتولدة. اعتبرنا العيب الممتد كمنطقة حيث تكون مدة حياة حاملات الشحنة فيها أقل من قيمتها في المنطقة المحيطة بالعيوب. ناقشنا في هذا العمل، أثر مختلف عوامل المحاكاة مثل طاقة وعدد الإلكترونات الساقطة، طول المرحلة وعدد المراحل على استقرار قيم التيار EBIC في غياب العيب ثم عرضنا النتائج المتحصل عليها في حالة تفكك عمودي على توصيل شوطكي. حللنا تغير التباين EBIC بدلالة طاقة الإلكترونات الساقطة، طول انتشار حاملات الشحنة ونصف قطر التفكك في حالة طول انتشار حاملات الشحنة داخل التفكك غير معدوم ( $L \neq 0$ ). نتائج التباين EBIC الأعظم المتحصل عليها بواسطة المحاكاة تتوافق مع تلك المتحصل عليها بالتحليل التقريبي من الرتبة الأولى في المجال المحصور بين 0.3 و 2 لقوة التحام التفكك. تمت دراسة تغير التباين EBIC بدلالة نصف قطر التفكك في حالة طول انتشار حاملات الشحنة معدوم داخل التفكك ( $L=0$ )، بينت النتائج المتحصل عليها بواسطة المحاكاة أن التباين EBIC الأعظم محصور بين 20% و 30% في حالة نصف قطر التفكك أقل من 50nm و طاقة الحزمة الإلكترونية الساقطة محصورة بين 10keV و 20keV.

الكلمات المفتاحية: التفككات، EBIC، محاكاة مونت كارلو، تباين الالتحام.

## Abstract

The Electron Beam Induced Current (EBIC) technique has been widely used to image the recombination activity of various extended defects including dislocations in semiconductors. In this work, we have presented the EBIC contrast theoretical analysis and the limitations of the analytical models that are available in the literature. Then we have introduced a Monte Carlo algorithm that we have developed to simulate the EBIC contrast at a defect of arbitrary shape located underneath the Schottky contact. The algorithm simulates the electron trajectories in solids and the energy dissipation that determines the carrier generation within the semiconductor under electron bombardment. The recombination contrast at an extended defect of a given shape is obtained by simulating the random diffusion of the carriers that are generated at point-like sources randomly distributed within the generation volume. The defect is considered as a region where the carrier lifetime is smaller than in the surrounding bulk. We have discussed the effect of various simulation parameters such as the energy and the number of incident electrons, the step length and the total number of steps on the stability of the obtained values of the EBIC current in absence of defects. Finally, the results obtained for a dislocation normal to the Schottky contact are presented. We have analyzed the variation of the contrast EBIC versus the primary beam energy, carrier diffusion length and the dislocation radius for none vanishing carrier diffusion length within the dislocation ( $L \neq 0$ ). The simulated values of the maximum EBIC contrast are in good agreement with those obtained by the analytical approach using the first order approximation for dislocation strength greater than 0.3 and less than 2. The contrast EBIC upon the dislocation radius was obtained for vanishing carrier diffusion length within the dislocation ( $L=0$ ), the simulated values show that the maximum EBIC contrast lies in the range 20%-30% for a dislocation radius less than 50nm and beam energy between 10keV and 20keV.

*Keywords:* Dislocations, EBIC, Monte Carlo Simulation, Recombination contrast.

## Résumé

La technique EBIC (Electron Beam Induced Current) est largement utilisée pour imager l'activité de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs et en particulier les dislocations. Nous avons présenté dans ce travail l'analyse théorique de contraste EBIC et les limitations des modèles analytiques existants dans la littérature, puis nous avons introduit l'algorithme de la méthode de Monte Carlo que nous avons développé pour simuler le contraste EBIC d'un défaut de forme quelconque situé sous un contact Schottky. L'algorithme simule les trajectoires électroniques et la dissipation d'énergie qui détermine la génération des porteurs à l'intérieur du semi-conducteur sous bombardement électronique. Le contraste de recombinaison sur un défaut quelconque est obtenu par la simulation de la diffusion aléatoire des porteurs générés par des sources quasi ponctuelles distribuées aléatoirement à l'intérieur du volume de génération. Le défaut est considéré comme une région où la durée de vie des porteurs est inférieure à celle dans la région avoisinante. Nous avons discuté l'effet des différents paramètres de simulation comme l'énergie et le nombre d'électrons incidents, la longueur d'étape et le nombre total d'étapes sur la stabilité des valeurs obtenues du courant EBIC en absence de défaut. Finalement nous avons présenté les résultats obtenus pour le cas particulier d'une dislocation perpendiculaire à la surface de contact Schottky. Nous avons analysé la variation du contraste EBIC en fonction de l'énergie du faisceau incident, la longueur de diffusion des porteurs et le rayon de la dislocation pour une longueur de diffusion non nulle à l'intérieur de la dislocation ( $L \neq 0$ ). Les résultats obtenus par simulations sont en bon accord avec ceux obtenus par l'approche analytique du premier ordre pour une force de recombinaison située entre 0.3 et 2. Le contraste EBIC maximum en fonction du rayon de la dislocation a été étudié pour une longueur de diffusion nulle à l'intérieur de la dislocation ( $L = 0$ ), les valeurs simulées montrent que le contraste EBIC maximum est compris entre 20% et 30% pour un rayon de dislocation inférieur à 50nm et une énergie incidente comprise entre 10keV et 20keV.

Mots clés: Dislocations, EBIC, Monte Carlo Simulation, Contraste de recombinaison.