UNIVERSITÉ
DE REIMS
CHAMPAGNE-ARDENNE

N°

Année 2011

Thèse de Doctorat

Pour obtenir

Le grade de docteur de l'Université de Reims Champagne-Ardenne

Spécialité : **Physique**

Détermination par nano-EBIC et par simulation de Monte-Carlo de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires: application à des structures contenant des nanocristaux de germanium

Par

Quang-Tri DOAN

Soutenue le 09 décembre 2011

Jury :

Michel TROYON	**Professeur, URCA, Reims**	**Président**
Brigitte SIEBER	**Chargée de Recherche, UMET, Lille**	**Rapporteur**
François BERTIN	**Chercheur, CEA/LETI, Grenoble**	**Rapporteur**
Abdelillah EL HDIY	**Professeur, URCA, Reims**	**directeur de thèse**

Remerciement

Je remercie en tout premier lieu M. Michel TROYON de m'avoir accueilli au sein du laboratoire de Microscopies et d'Etudes de Nanostructures (LMEN). Je le remercie également pour sa disponibilité durant toute la période de la thèse, puis d'avoir accepté de présider ce Jury.

Bien entendu, je remercie chaleureusement mon directeur de thèse M. Abdelillah EL HDIY pour tout ce qu'il m'a apporté durant ces trois années, tant sur le point de vue scientifique que personnel.

J'exprime ma gratitude à Mme. Brigitte SIEBER et à M. François BERTIN d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail.

Je remercie tout également Mme Isabelle BERBEZIER, Directrice de recherche au CNRS, premièrement, pour m'avoir aimablement accueilli au sein de son équipe de recherche pendant mon stage et de m'avoir fourni les échantillons sur lesquels ont été menées les études rapportées dans ce manuscrit. Je n'oublierais pas d'exprimer ma gratitude aux membres de son équipe (Nanostructures Semi-conductrices Épitaxiées) pour l'accueil qu'ils m'ont réservé et pour leur investissement dans la réalisation de mes échantillons. Je remercie particulièrement: Luc Favre, Antoine Ronda, Guillaume Amiard, Mansour Aouassa, Adrien Gouyé, Elise Gomes.

De manière générale, merci à toutes les personnes du laboratoire ou d'ailleurs ayant participé de près ou de loin à ce travail et à leur aide précieuse. Je remercie particulièrement : Michaël Molinari, Nicolas Dumelié, Sylvain Potiron, Laurence Wortham et Monique Michel.

J'ai également une pensée aux autres doctorants du laboratoire notamment Aude avec qui j'ai partagé mon bureau, je lui souhaite une bonne réussite.

Enfin je tiens à remercier ma femme, Minh Anh, pour son soutien au quotidien, son écoute et sa patience sans limite.

Bref, merci à tous.

Résumé

L'objectif de ce travail de thèse est d'étudier certaines propriétés locales de structures contenant des nanocristaux de Ge sur leur surface par utilisation de la technique nano-EBIC (courant induit par bombardement électronique et collecté par un nano-contact). La particularité de cette technique qui utilise le même principe que la technique EBIC classique est l'utilisation d'une pointe conductrice d'un AFM (microscope à force atomique) à la place d'une électrode standard. Nous nous sommes intéressés à la détermination de la longueur de diffusion effective (L_{eff}) et l'étude de sa variation en fonction de paramètres tels que l'énergie primaire et la taille des nanocristaux. L_{eff} augmente pour les faibles énergies primaires, passe par un maximum qui dépend de la taille des nanocristaux, puis diminue pour les énergies élevées. Ce comportement de l'évolution de L_{eff} a été expliqué en chapitre 2. Cependant, ce résultat n'a jamais été observé auparavant. C'est pourquoi, nous avons complété ce travail par une étude basée sur la simulation Monte-Carlo, où l'effet de plusieurs paramètres a été analysé. Parmi les paramètres étudiés, on cite la taille et la forme du nano-contact (ou plus précisément la taille de la nano-zone de déplétion qui se forme sous le contact), la vitesse de recombinaison en surface et l'énergie primaire. La simulation donne le même comportement de variation de L_{eff} que dans le cas expérimental.

Mots-clés : Technique nano-EBIC, simulation Monte Carlo, Longueur de diffusion, Nanocristaux de Ge.

Abstract

The objective of this work is to study certain local properties of structures containing on their surface Ge nanocrystals by using the nano-EBIC (Electron beam induced current collected by a nano-contact). The peculiarity of this technique which uses the same principle as the classical EBIC technique is the use of a conductive AFM (atomic force microscope) tip instead of a standard electrode. We were interested in the determination of the effective diffusion length (Leff) and the study of its variation according to parameters such as the primary energy and the size of nanocrystals. Leff increases for weak energies, reaches a maximum which depends on the nanocrystal size, then decreases for high energies. This behavior of the evolution of Leff was explained in chapter 2. However, this result has never been reported previously. That is why we completed this work by a study based on the Monte Carlo simulation, where the effect of several parameters was analyzed. Among the parameters studied, we quote the size and the shape of the nano-contact (or more exactly the size of the depletion nano-zone formed under the contact), the surface recombination velocity and the primary energy. The simulation gives the same behavior of Leff variation than the experimental case.

Keywords: Technique nano-EBIC, simulation Monte Carlo, Longueur de diffusion, Nanocristaux de Ge.

Table des matières

Introduction générale 8

Bibliographie 13

Chapitre1 Evolution technologique technique nano-EBIC pour la caractérisation de nano-objets 15

I-Evolution de la technologie des semi-conducteurs 18

1- Evolution du semi-conducteur 18

1.1- Propriétés des semi-conducteurs 18

1.2- Effet de la diminution des dimensions 21

2- Evolution des dispositifs 25

II- Historique de la microscopie 28

1- Caractérisation par microscopie à sonde locale 30

2- Notre propre système de caractérisation 30

2-1. Description succincte du système hybride (AFM/MEB) 31

2-2. Quelques utilisations spécifiques : mesures électriques en C-AFM, nano-EBIC et topographique 33

III- Conclusion 37

Chapitre2 Utilisation de la technique nano-EBIC pour déterminer la longueur de la diffusion de structures contenant des nanocristaux de Ge 44

I- Description des échantillons étudiés 48

II-Obtention des mesures nano-EBIC : spectres et imageries 51

1- Image électrique par nano-EBIC 51

2- Obtention de la longueur de diffusion 55

a-Profil type du courant induit 55

b-Effet de l'énergie primaire sur le profil du courant induit 56

c-Efficacité de collecte 60

d-Modèles permettant l'extraction de la longueur de diffusion effective .. 62

III- Effets de l'énergie primaire et de la taille des nanocristaux sur la variation de la longueur effective de diffusion 67

1- Effet de l'énergie primaire 67

2- Effet de la taille des nanocristaux de Ge 70

3- Comparaison avec certaines données de la littérature 72

IV- Conclusion 75

Chapitre 3 Simulation Monte Carlo de la technique nano-EBIC 86

I- Rappel sur l'interaction électron - matière 91

1- Collision élastique 91

2- Collision inélastique 92

II- Simulation de la trajectoire de l'électron incident à l'intérieur de la cible 94

1- Détermination des directions prises par l'électron incident dans le matériau cible 95

2- Distance entre collisions de l'électron primaire à l'intérieur du matériau cible 96

3- Transfert d'énergie de l'électron incident 97

4- Création et diffusion de charges 99

a- Nombre de paires électron-trou créées par collision 99

b- Diffusion de la charge créée 100

5- Mise en œuvre d'un algorithme pour simuler les trajectoires de l'électron incident et des charges générées ainsi que leur collecte 102

a- Simulation de la trajectoire de l'électron incident 102

b- Simulation des trajectoires de la charge créée et de sa collecte 104

III- Test de la simulation de la procédure nano- EBIC 107

1- Influence du numéro atomique du matériau cible 107

2- Influence de l'angle d'inclinaison sur le volume de génération 109

3- Présentation des résultats de la simulation nano-EBIC 109

a- Un nano-contact pour la collecte du courant induit 109

b- Quelques résultats préliminaires sur la simulation du profil de l'efficacité de collecte 111

IV- Conclusion 116

Chapitre 4 Etude de la longueur de diffusion effective par simulation Monte Carlo: Analyse de certains paramètres physiques 120

I- Phénomènes de recombinaisons 123

1- Recombinaison au sein d'un semi-conducteur 123

2- Recombinaison en surface 124

II- Efficacité de collecte pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface 130

III- Détermination de la longueur de diffusion effective à partir d'un profil simulé 133

IV- Conclusion 139

Conclusion générale et perspectives 143

Introduction générale

Introduction générale

Les nanomatériaux ou boîtes quantiques à base de semi-conducteurs constituent le cœur des nouvelles structures récemment développées et qui suscitent l'intérêt des principales équipes de recherche tant au niveau national qu'au niveau international. Les propriétés spécifiques de ces nanomatériaux suite au confinement des porteurs (électrons et/ou trous) dans les trois directions, donnent à ces nanomatériaux le nom "d'atomes artificiels". Les nanomatériaux sont élaborés par différentes techniques soit dans des matrices semi-conductrices ou isolantes pour former la structure fondamentale pour les études en physique ou pour le développement de dispositifs spécifiques tels que les mémoires ou les transistors à un électron si on utilise leur propriétés de transport [Tiwari'95, Welser'97, Oda'07], ou dans des dispositifs optoélectroniques pour l'utilisation de leur propriétés optiques [Kanemitsu'92]. En effet, la structure électronique d'un nanomatériau dépend de sa taille et de sa forme, et la variation de l'une ou de l'autre peut modifier qualitativement la structure électronique des états localisés dans le nanomatériau.

D'un autre côté, l'une des raisons pratiques du développement de la recherche dans ce domaine est la compatibilité avec l'infrastructure existante de fabrication des circuits intégrés à base de silicium. Prenons l'exemple de l'industrie microélectronique ; même si théoriquement la miniaturisation de la dimensionnalité conduit à accroître la capacité de stockage des mémoires et la vitesse de programmation tout en réduisant la puissance consommée, une préoccupation importante demeure; à savoir la bonne fiabilité des dispositifs MOS (métal-oxyde semiconducteur) telles que les dispositifs MOSFET (transistor MOS à effet de champ), et les cellules mémoire à taille réduite à l'état ultime. Parmi les principaux problèmes qui se posent ici, on cite l'augmentation du courant de fuite, la réduction de la tension seuil de claquage des oxydes, etc. Pour éviter de tels problèmes, l'utilisation des nanocristaux, à la place de la grille flottante utilisée dans les mémoires standards, rend moins sensible le composant aux fuites locales et permet une ultime miniaturisation tout en évitant les instabilités électriques. En effet, différentes études très récentes ont montré l'intérêt d'utiliser des nanocristaux du fait de leurs propriétés spécifiques. On trouve leur utilité dans le transport par effet tunnel d'un électron unique [Welser'97], dans le transport balistique [Nishiguchi'02], et l'émission électronique [Oda'07]. La fiabilité en ce qui concerne le

stockage d'information par exemple a été pour la première fois mise en évidence dans les années 1995/96 par une équipe d'IBM [Tiwari'95, Tiwari'96].

Quel que soit le champ d'utilisation des nanomatériaux, l'un des principaux processus responsables des propriétés spécifiques électroniques et optiques des nanomatériaux est la capture et/ou émission des porteurs lors du transport d'électrons ou de trous. L'efficacité de ces processus est contrôlée par différents paramètres intrinsèques (taille et forme des nanocristaux) et extrinsèques (nature de la structure les contenant, perturbation électrique, photonique ou électronique extérieure). Malgré les nombreuses études faites à ce jour sur les propriétés et comportements des nanocristaux, il reste un champ d'instigation relativement vaste. De ce point de vue, nous nous sommes intéressés au comportement de nanocristaux de Ge vis-à-vis d'un bombardement électronique. Les processus de piégeage sous bombardement électronique ont été étudiés très récemment [Smaali'06, Gacem'10, El Hdiy'10], nous nous sommes plutôt penchés sur ce que peut provoquer la présence de nanocristaux en surface d'une structure sous bombardement électronique sur certains paramètres physiques tels que la longueur de diffusion. En d'autres mots, nous procédons à la mesure de la longueur de diffusion (effective) en présence de nanocristaux. L'objectif est de mettre en évidence leur effet sur l'évolution et la valeur de ce paramètre important.

Pour ce faire, l'une des techniques les mieux appropriées pour déterminer la longueur de diffusion est la technique EBIC (courant induit par bombardement électronique). Cette méthode expérimentale a souvent été utilisée pour caractériser et analyser les composants semiconducteurs. Elle permet la localisation des jonctions métallurgiques, ainsi que les défauts électriquement actifs [Leamy'82, Koch'88, Puhlmann'90, Cavalcoli'91, Chan'95, Chernyak'96, Kuroda'98, Zhu'03]. Néanmoins la technique EBIC sous sa forme classique ne peut permettre une étude claire lorsque l'on est en présence de nanocristaux. C'est la raison pour laquelle, nous utilisons un système hybride combinant un microscope électronique à balayage (MEB) et un microscope à force atomique (AFM) pour améliorer la résolution des mesures EBIC. Cette nouvelle technique porte le nom de nano-EBIC (ou NF-EBIC : EBIC en champ proche). Elle a bien montré sa bonne résolution [Troyon'07] et a permis d'étudier le transport local à travers des nanocristaux [Gacem'10]. Des images et des profils EBIC sont obtenus et analysés.

Le manuscrit sera donc présenté de la manière suivante :

- le chapitre 1 donnera un aperçu sur les évolutions technologiques des composants à base de semiconducteurs. Il donnera aussi un bref aperçu sur les progrès effectués au niveau des techniques de caractérisation. Dans cette partie, nous nous sommes limités à une description aussi brève que possible sur l'historique de la technique de microscopie afin de présenter avec un peu plus de détails notre propre technique (la technique nano-EBIC). Nous soulignerons cette présentation par l'apport de quelques résultats types montrant sa haute résolution et son adaptabilité dans la caractérisation de nanomatériaux.

- Le chapitre 2 sera consacré à la présentation de mesures expérimentales donnant à la fois des images et des profils nano-EBIC obtenus sur des structures Si/SiO_2 contenant sur leur surface des nanocristaux de Ge non recouverts. Les effets de l'énergie primaire, la taille et la densité des nanocristaux seront présentés et analysés. Nous décrirons essentiellement l'évolution de la longueur de diffusion « effective » en fonction de l'énergie d'accélération des électrons primaires tout en tenant compte de l'effet de la présence des nanocristaux. Cette évolution de la longueur de diffusion présente un comportement inhabituel par rapport aux rares résultats données dans la littérature et traitant ce point [Jastrzebski'75, Miyajima'98]. En effet, nous avons montré que la longueur de diffusion effective augmente avec l'énergie primaire, passe par un maximum puis diminue, alors qu'elle présentait une saturation après augmentation dans la référence [Jastrzebski'75], et juste une augmentation dans [Miyajima'98]. Nous expliquerons le pourquoi de cette différence.

- Et pour apporter des informations supplémentaires sur ce point, le chapitre 3 sera consacré à une étude basée sur la simulation Monte- Carlo tri-dimensionnelle qui apportera quelques informations supplémentaires au comportement d'évolution de la longueur de diffusion effective. Vu la complexité de notre structure, nous avons opté pour l'utilisation d'un substrat de silicium pour la simulation afin de ne pas introduire trop d'hypothèses quant à l'analyse et l'interprétation des résultats obtenus.

- Le chapitre 4 complétera l'étude de simulation par l'étude de paramètres supplémentaires tels que la vitesse de recombinaison en surface. En effet, la nature de la surface affecte plus ou moins la valeur et l'évolution de la longueur de diffusion. Dans le cadre de cette simulation, nous comparerons les résultats obtenus dans le cas d'un nano-contact avec ceux obtenus dans le cas d'un contact de très grande dimension (donc classique). Une comparaison avec nos résultats expérimentaux est aussi donnée à la fin de ce chapitre.

- A la fin de ce rapport, nous présenterons notre conclusion générale, en insistant sur les points primordiaux à étudier à court, voire à moyen terme, tels qu'une proposition sur la résolution des équations de continuité avec les bons paramètres pour ce qui concerne les conditions aux limites dans le cas de notre système expérimental. Il serait aussi intéressant de poursuivre la simulation en ouvrant le champ vers des valeurs intermédiaires de la vitesse de recombinaison en surface par exemple.

Bibliographie

[Cavalcoli'91] D. Cavalcoli, A. Cavallini and A. Casaldini, J. Appl. Phys. Vol. 70, Issue 4, pp. 2163-2168, 15 August (1991).

[Chan'95] D.S.H. Chan, V.K.S. Ong and J.C.H. Phang, IEEE Trans. Electron. Dev., Vol. 42, no 5, pp. 963-968, May 1995.

[Chernyak'96] L. Chernyak, A. Osinsky, H. Temkin, J.W. Yang, Q. Chen and M. Asif Khan, Appl. Phys. Lett. Vol. 69, no. 17, pp. 2531-2533, (1996).

[El Hdiy'10] A. El Hdiy, M. Troyon, K. Gacem et Q.T. Doan, "Carrier storage in Ge nanocrystals grown on silicon oxide by a two step dewetting/nucleation process", in NANOCRYSTALS Edit. par SCIYO en 2010.

[Gacem'10] K. Gacem, A. El Hdiy, M. Troyon, I. Berbezier et A. Ronda, Nanotech. 21, 1 (2010).

[Jastrzebski'75] L. Jastrzebski, J. Lagowski and H. C. Gatos., Appl. Phys. Lett., 27, 537 (1975).

[Kanemitsu'92] Y. Kanemitsu, H. Uto, Y. Masumoto et Y. Maeda, Appl. Phys. Lett. 61, 2187 (1992).

[Koch'88] F. Koch, W. Hergert, G. Oelgart and N. Puhlmann, Phys. Stat. Sol. (a)., 109, 261(1988).

[Kuroda'98] N. Kuroda, C. Sasaoka, A. Kimura, A. Usui and Y. Mochizuki, J. Cryst. Grow., 189/190, 551(1998).

[Leamy'82] H.J. Leamy, J. Appl. Phys., 53, R51(1982).

[Miyajima'98] T. Miyajima, M. Ozawa, T. Asatsuma, H. Kawai and M. Ikeda., J. Cryst. Growth., 189/190,768(1998).

[Nishiguchi'02] K. Nishiguchi, S. Oda, J. Appl. Phys. 92, 1399 (2002).

[Oda'07] S. Oda, S.Y. Huang, MA.A Salem, D. Hippo et H. Mizuta, Phys. E 38, 59 (2007).

[Puhlmann'90] N. Puhlmann and G.Oelgart, Phys. Stat. Sol. (a), 122, 705(1990).

[Smaali'06] K. Smaali, M. Troyon, A. El Hdiy, M. Molinari, G. Saint-Girons et G. Patriarche. Appl. Phys. Lett. 89, 112115 (2006).

[Tiwari'95] S. Tiwari, F. Rana, K. Chan, H. Hanafi, W. Chan, and D. Buchanan, IEDM Tech. Dig. 95, 521 (1995).

[Tiwari'96] S. Tiwari, F. Rana, H. Hanafi, A. Hartstein, E. F. Crabbé and K. Chan, Appl. Phys. Lett. 68, 1377 (1996).

[Troyon'07] M. Troyon and K. Smaali, Appl. Phys. Lett., 90, 212110/1-3(2007).

[Welser'97] J. J. Welser, S. Tiwari, S. Rishton, K. Y. Lee and Y. Lee, IEEE Electron. Dev. Lett., 18, 278 (1997).

[Zhu'03] S. Q. Zhu, E. I. Rau and F. H. Yang, Semicond. Sci. Technol., 18, 361(2003).

Chapitre 1

-Evolution technologique

- La technique nano-EBIC pour la caractérisation de nano-objets

Introduction 17

I-Evolution de la technologie des semi-conducteurs 18

1-Evolution du semi-conducteur 18

1.1- Propriétés des semi-conducteurs 18

a- Structure de semi-conducteur 18

b- Propriétés des semi-conducteurs 20

1.2- Effet de la diminution des dimensions 21

2- Evolution des dispositifs 25

II- Historiquedelamicroscopie 28

1- Caractérisation par microscopie à sonde locale 30

2- Notre propre système de caractérisation 30

2-1. Description succincte du système hybride (AFM/MEB) 31

2-2. Quelques utilisations spécifiques : mesures électriques en C-AFM, nano-EBIC et topographique 33

a- Mesure électrique en C-AFM 33

b- Principe de la technique nano-EBIC 34

III- Conclusion 37

Bibliographie 38

Introduction

Depuis l'apparition des transistors, la technologie du semi-conducteur a toujours fait face au chalenge imposé par la réduction de leurs dimensions pour améliorer l'intégration des dispositifs et donc leur performance. Les conséquences des multiples confinements et des réductions dimensionnelles se reflètent dans la réduction de la densité des états, l'augmentation des effets de l'énergie coulombienne, le déplacement des sous-bandes d'énergie, la réduction des taux de capture et d'émission. Ces effets ont évidemment été largement étudiés [Wheeler'82, Petroff'82, Fulton'87, Yano'93, Tiwari'94, Takahashi'94, Tiwari'95, Ono'02, Kanoum'06, Usmani'10]. L'objet essentiel de ces miniaturisations se trouve dans la réduction certes du prix de vente mais aussi dans l'augmentation de la capacité des mémoires. Il s'avère depuis des années que les nanocristaux de Si ou de Ge sont capables de remplacer les grilles en silicium polycristallin dans les mémoires conventionnelles. Ces nanocristaux, plantés dans une couche tunnel d'oxyde peuvent exhiber des propriétés physiques très intéressantes car très différentes des propriétés habituelles observées en volume même à température ambiante.

Dans ce chapitre introductif, nous tacherons de faire l'historique de l'évolution de la technologie et, parallèlement à cette évolution, nous décrirons les progrès considérables qui ont suivi. Ces progrès n'auraient pas eu lieu s'il n'y avait pas en face une ténacité du monde de la recherche scientifique pour élaborer des procédés et des techniques de caractérisation de plus en plus performants. Nous donnerons donc une description succincte sur les différentes techniques depuis le microscope optique au microscope à sonde locale. A la fin de ce chapitre, nous présentons notre technique en montrant des exemples expérimentaux en images électriques, topographiques et EBIC (courant induit par bombardement électronique). Cette technique qui porte le nom de nano- (ou NF pour champ proche) EBIC a montré sa fiabilité par l'obtention d'images révélant des détails inobservables par la technique EBIC standard [Smaali'08, Troyon'07].

I- Evolution de la technologie des semi-conducteurs

1- Evolution du semi-conducteur

1.1- Propriétés des semi-conducteurs

a- Structure de semi-conducteur

- *Structure cristalline*

La matière condensée peut prendre deux états solides différents, suivant les conditions dans lesquelles elle s'est formée : un état dit amorphe, dans lequel la disposition des atomes est aléatoire, ou un état cristallisé caractérisé par un arrangement périodique des atomes. Les solides amorphes sont généralement appelés des verres. Les solides cristallisés peuvent se former en monocristaux ou poly-cristaux.

L'immense majorité des semi-conducteurs utilisés dans les applications électroniques (Si, Ge, etc) ou optoélectroniques (GaAs, InP, etc) sont basés sur la même structure cristallographique : celle du diamant (Si, Ge, etc) ou la structure « Zinc Blende » (GaAs, InP, etc). La structure diamant est formée par deux réseaux cubiques faces centrées (cfc) interpénétrés à coordonnée (1/4a, 1/4a, 1/4a), où *a* est la longueur de la face du cube du réseau cfc considéré. La structure zinc-blende est représentée soit en perspective soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube. La figure 1-1 montre un exemple de deux structures : diamant (figure 1-1a) et Zinc blende (figure 1-1b).

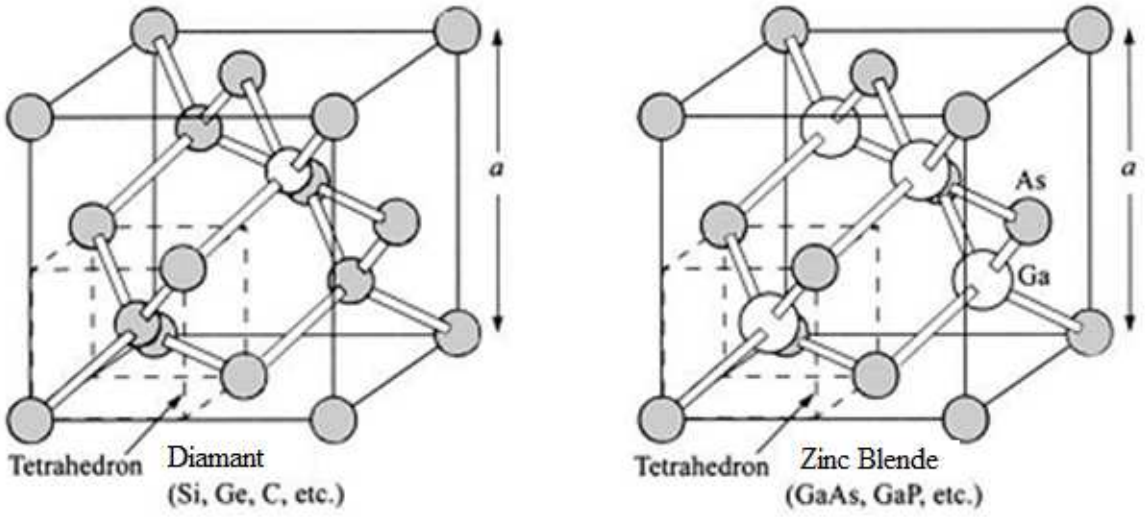
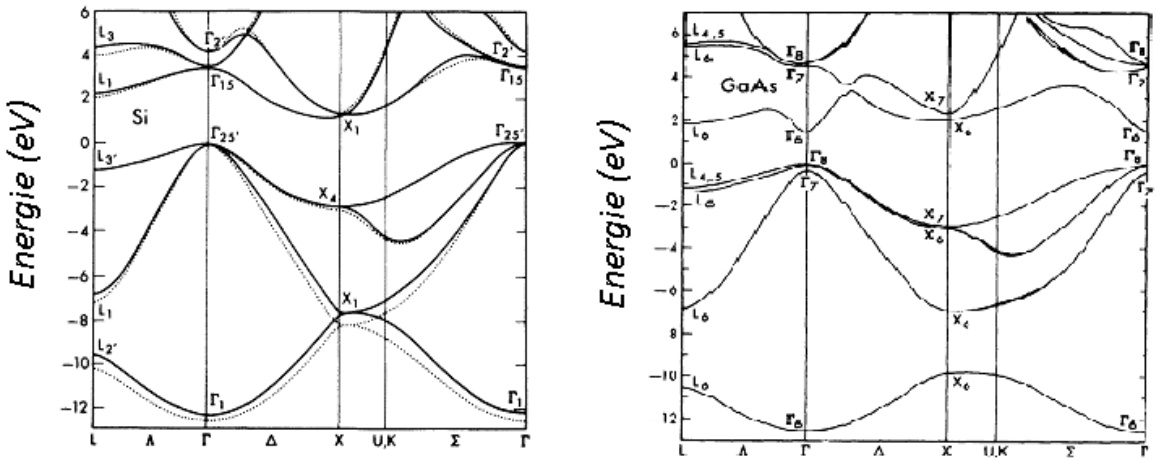


Figure 1-1 : Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende.

- *Structure des bandes d'énergie*

Plusieurs méthodes, qui sont à la base de nombreux calculs, ont été réalisées pour la détermination de la structure de bandes d'énergie des semi-conducteurs. Trois méthodes sont utilisées fréquemment : la méthode d'ondes planes orthogonalisées [Allen'55, Herman'55], la méthode de pseudopotentiel [Phillips'58] et la méthode k-p [Smith'79]. La figure 1-2 montre des exemples de bandes d'énergie du Si et du GaAs.



(a) (b)

Figure 1-2 : Structure des bandes d'énergie ; (a) structure des bandes de Si, (b) structure des bandes de GaAs [Chelikowsky'76].

La figure 1-2 montre que la bande de conduction se compose d'un certain nombre de sous-bandes. Le plus bas de la bande de conduction peut apparaître au centre $k = 0$ (Γ) ou hors du centre le long des axes k différents. Les considérations de symétrie ne suffisent pas à déterminer l'emplacement du bas de la bande de conduction. Les résultats expérimentaux montrent, cependant, que dans le Si le minimum le plus bas se trouve hors du centre le long de la direction [100] axe (Δ). Dans le GaAs, le minimum de la bande de conduction est à $k = 0$ (Γ). Considérant que le maximum de la bande de valence (E_v) se produit à Γ, le minimum de la bande de conduction peut être aligné ou non avec le maximum de la bande de valence dans l' espace des k, ce qui contrôle la détermination de la largeur et le type de la bande interdite. Il

en résulte une largeur de bande interdite directe pour le GaAs et une largeur de bande interdite indirecte pour le Si. A température ambiante et sous pression atmosphérique normale, les valeurs du gap sont 1.12 eV pour Si et 1.42 eV pour le GaAs.

b- Propriétés des semi-conducteurs

Dans ce paragraphe, nous présentons un bref résumé des propriétés des semi-conducteurs qui sont importantes pour les différentes fonctions que pourraient accomplir les dispositifs à base de semi-conducteurs car les composants électroniques, par exemple, mettent à profit les propriétés dynamiques des porteurs de charges dans les semi-conducteurs lorsqu'intervient une excitation thermique, électrique, etc…

- *Propriétés électriques*

La théorie quantique des solides établit que les états électroniques se regroupent en bandes permises (bande de conduction et bande de valence). Les propriétés électriques d'un matériau dépendent des populations électroniques des différentes bandes permises de la structure électronique. En effet, la conduction électrique résulte du déplacement des électrons et des trous à l'intérieur de chaque bande. Dans le cas d'un semi-conducteur, la bande interdite est plus faible que pour les isolants. Ainsi, des électrons peuvent être excités depuis la bande de valence vers la bande de conduction par agitation thermique, ce qui rend le matériau un peu plus conducteur. Remarquons qu'à la surface d'un semi-conducteur, les états électroniques sont profondément modifiés du fait de la présence de liaisons pendantes, d'adsorption d'éléments étrangers dont l'oxygène qui constitue un bon candidat. La technologie de préparation joue à cet effet un rôle très important afin de profiter au maximum des propriétés de conduction du semi-conducteur (étude des conditions de préparation, de conservation, de passivation, etc…).

- *Propriétés optiques*

Un semi-conducteur reste transparent pour les photons ayant une énergie inférieure à la largeur de la bande interdite (E_g). Cependant, lors de l'absorption de photons, les porteurs (électrons dans la bande de conduction et trous dans la bande de valence) se voient accélérés suite au surplus d'énergie fourni par les photons absorbés. Si l'énergie est suffisante, les excitations élémentaires du semi-conducteur seront des paires électrons-trous. Remarquons que de même pour les propriétés électroniques, les propriétés optiques reposent sur l'existence d'états électroniques délocalisés. Différentes applications utilisent les propriétés optiques, à savoir le laser à semi-conducteur qui, combiné avec la miniaturisation et la rapidité de modulation, a ouvert un champ d'applications pour les transmissions de l'information.

1.2- Effet de la diminution des dimensions

Lorsqu'une, deux ou les trois dimensions du cristal sont réduite à une échelle comparable à la longueur d'onde de Louis de Broglie, les propriétés électroniques (et optiques) du dit semiconducteur changent, et le mouvement des porteurs de charges se trouve limité à un plan (le cas d'un gaz bidimensionnel), à une dimension (le cas de nanofils), ou confiné dans les trois directions (le cas d'une boîte quantique). La figure 1-3 montre la variation de la densité d'états dans les structures de différentes dimensionnalités.

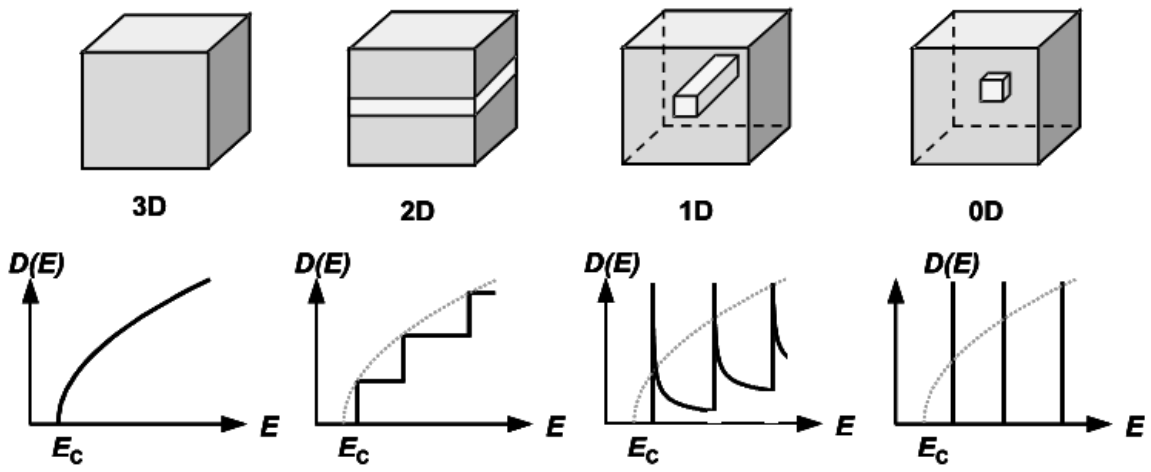


Figure 1-3 : Densité d'état électronique en fonction de la dimension.

Dans le cas des boîtes quantiques, les porteurs subissent alors un confinement dans les trois directions de l'espace. La densité d'états prend la forme de pics de Dirac ; raison pour laquelle, les boîtes quantiques portent le nom « d'atomes artificiels ».

Les nanocristaux (NCs) semi-conducteurs sont souvent appelés boîtes quantiques (quantum dots (QDs) en anglais). Ce sont des matériaux ayant des propriétés intermédiaires entre celles des atomes isolés et des semi-conducteurs macroscopiques. En raison de leurs faibles dimensions, ces nanocristaux semi-conducteurs présentent des propriétés différentes et des effets de confinement quantique liés à leur taille. Nous présentons ici deux exemples sur l'effet de la taille des nanocristaux de Si et de Ge sur la largeur de la bande interdite.

- *Dans le cas du silicium* ; L'effet de confinement quantique pour le Si a été étudié par plusieurs équipes [Delley'93, Vinciguerra'00, Park'01, Kim'04, Cho'09]. La largeur de la bande interdite peut par exemple être déterminée par [Kim'04] :

$$E(eV) = E_b + \frac{C}{a^2} \qquad (1-1)$$

où a est le diamètre du nanocristal considéré sphérique, C est un paramètre de confinement et E_b est l'énergie correspondant à la largeur de la bande interdite du silicium massif cristallin.

Pour l'énergie du gap, on a l'expression suivant [Kim'04]:

$$E_g(eV) = 1.16 + \frac{11.8}{a^2} \qquad (1-2)$$

L'évolution de l'énergie du gap du nanocristal de Si en fonction de sa taille est présentée dans la figure 1-4.

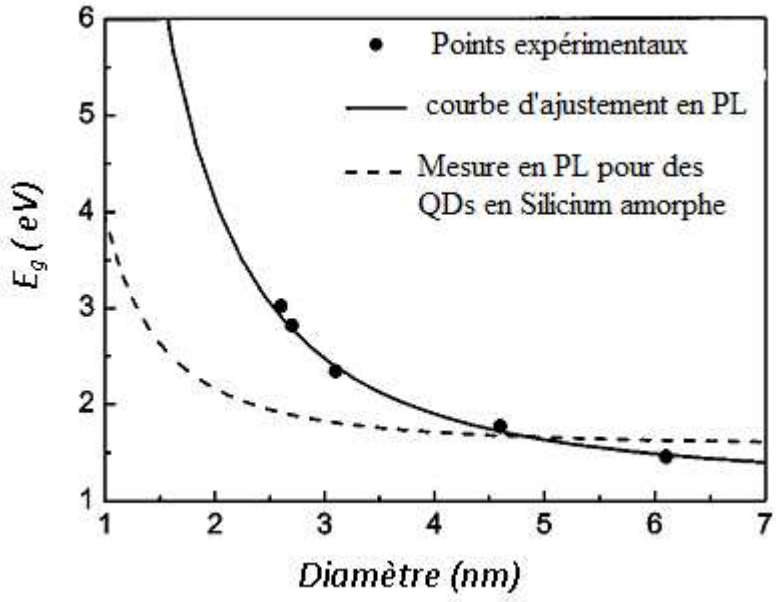


Figure 1-4: Variation de la largeur de la bande interdite en fonction de la taille de nanocristal de Si [Kim'04]

➢ *Dans le cas du germanium* ; Les niveaux de bandes d'énergie des NCs de Ge dépendent de sa taille et peuvent être calculés par les formules suivantes [Niquet'00] :

Pour la bande de valence :

$$E_v(a) = E_v(\infty) - \frac{15143.8}{a^2 + 6.465 \times a + 2.546} \quad \text{(meV)} \qquad (1-3)$$

Pour la bande de conduction :

$$E_c(a) = E_c(\infty) - \frac{11863.7}{a^2 + 2.391 \times a + 4.252} \quad \text{(meV)} \qquad (1-4)$$

La figure 1-5 montre l'énergie du gap de NCs de Ge par rapport à leur taille.

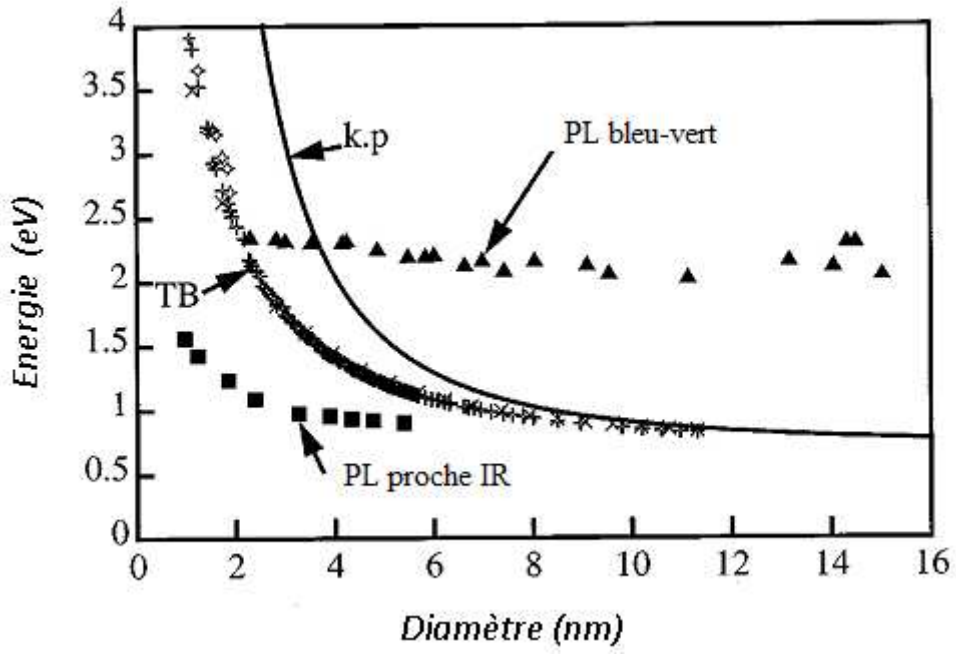


Figure 1- 5: Variation de la largeur de la bande interdite d'un NC de Ge en fonction de sa taille. Comparaison des valeurs calculées par les méthodes k.p et TB (Tight Binding : liaisons fortes) avec des mesures effectuées par photoluminescence [Niquet'00].

On peut constater dans les deux figures 1-4 et 1-5 que la largeur de la bande interdite du NC varie proportionnellement en $1/a^2$.

Remarquons que les propriétés de confinement, dans le cas d'un NC, dépendent du rayon de Bohr de l'exciton du semi-conducteur massif :

$$a_B = \frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\varepsilon}{\mu q^2} \qquad (1-5)$$

où $\mu = \frac{m_h^* \times m_e^*}{m_h^* + m_e^*}$ est la masse réduite de l'exciton, m_e^* et m_h^* sont la masse de l'électron et du trou, h la constante de Planck et ε la constante diélectrique du semi-conducteur. Un calcul simple conduit, pour le Si à a_B ~4 nm et pour le Ge à a_B ~25 nm. Ce qui signifie qu'un fort confinement est atteint pour un rayon inférieur à 4 nm pour le NC

sphérique de Si, et que pour un NC de Ge ce fort confinement s'obtient pour 25 nm. C'est là un avantage d'utiliser des NCs de Ge sur ceux du Si.

2- Evolution des dispositifs

C'est en 1947 qu'a été inventé par Brattain et Bardeen le premier transistor et c'est en 1954 qu'un transistor a été utilisé dans un poste de radio. Des progrès considérables ont été effectués pendant ces décennies pour aboutir à un transistor de quelques micromètres (figure 1-6). Quelques années plus tard, en 1958, Kilby a montré qu'il était possible de fabriquer un simple circuit intégré dans un substrat de germanium, un semi-conducteur couramment utilisé à cette époque (figure 1-7).

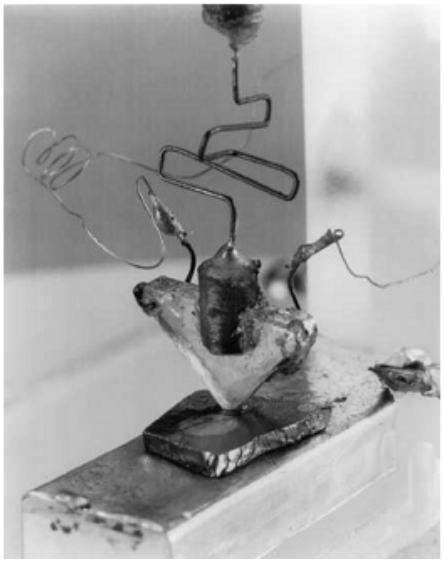


Figure 1- 6: Structure du premier transistor [Brattain'50].

Figure 1-7 : Schéma du premier circuit intégré [Kilby'58].

Depuis 1965, la loi de Moore [Moore'65] a guidé le progrès industriel dans le domaine de la miniaturisation. En effet, Moore a prédit que le nombre de transistors des microprocesseurs sur une puce de silicium doublerait environ tous les deux ans et ceci s'est vérifié jusqu'au début des années 2000. A titre d'exemple, vers la fin des années 1970 la longueur de grille était aux alentours de 1 µm, et en 2010 elle se trouvait à 22 nm. Cette mise à l'échelle continue des tailles des transistors implique également que les techniques de caractérisation évoluent.

Le fabricant Intel montre comment cette tendance affecte la taille minimale requise (figure 1-8). La diminution très rapide de la taille des composants électroniques a eu plusieurs conséquences : augmentation considérable de la puissance de calcul et de traitement de l'information, réduction du coût des composants et accroissement de la fiabilité, sans oublier la réduction de la puissance consommée. La figure 1-9 révèle mieux les dimensions de différents composants semi-conducteurs, tels qu'un atome de Si, un transistor et un circuit intégré, en perspective. On peut remarque que la taille d'un transistor MOS individuel s'approche des détails d'un virus.

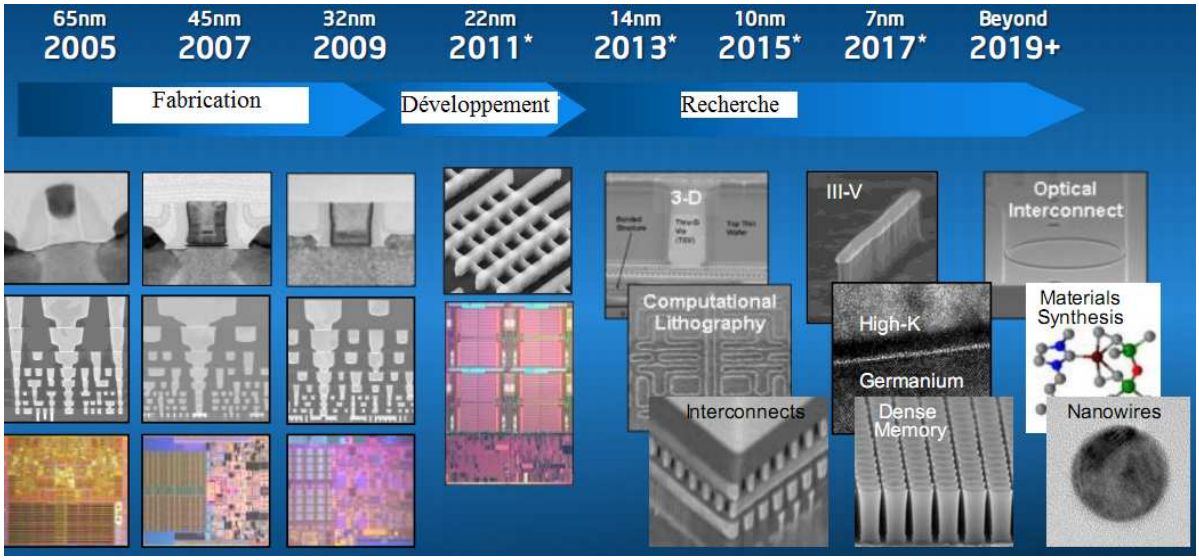


Figure 1- 8: Evolution du transistor [Intel]

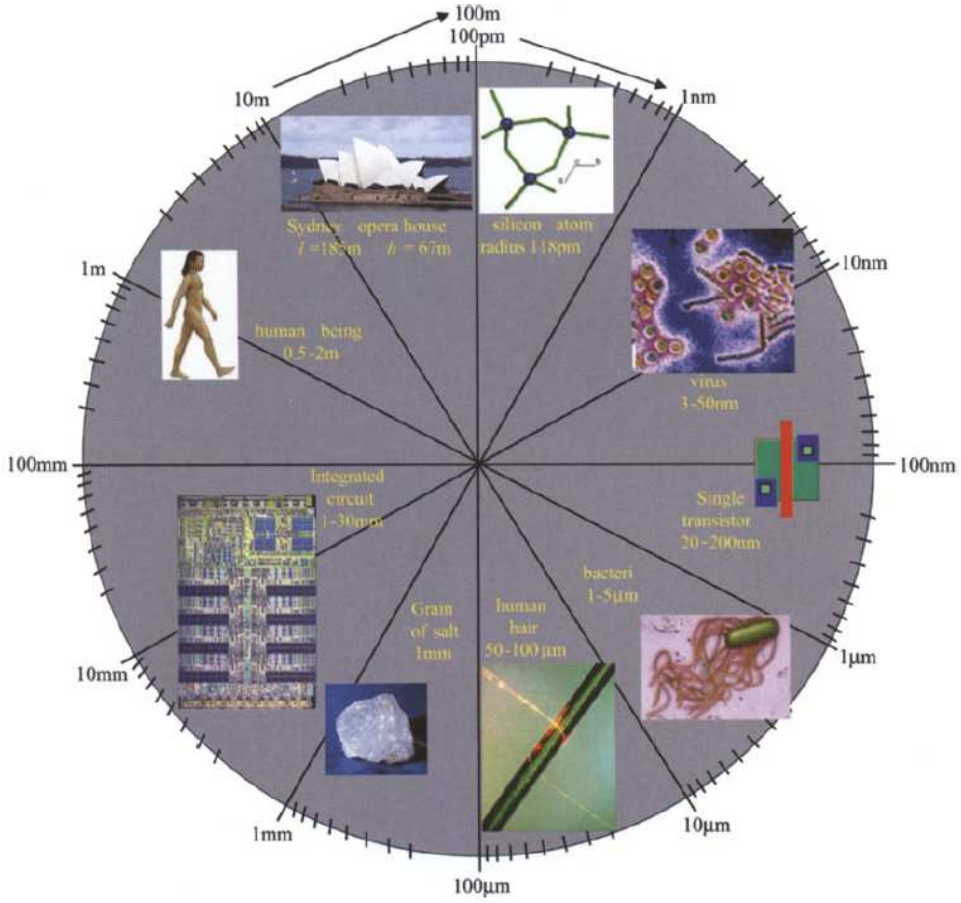


Figure 1-9 : Différentes tailles de composants semi-conducteurs (atome, transistor, CI) en perspective [Veendrick'08].

Actuellement, la technologie CMOS est bien entrée dans l'ère du deca-nanomètre. Ceci permet la réalisation de systèmes contenant plus de 10 milliards de transistors par puce.

Afin de mieux résumer les progrès fait dans le domaine de la microélectronique, la figure 1-10 donne un aperçu de l'augmentation du nombre de composants par circuit intégré (CI).

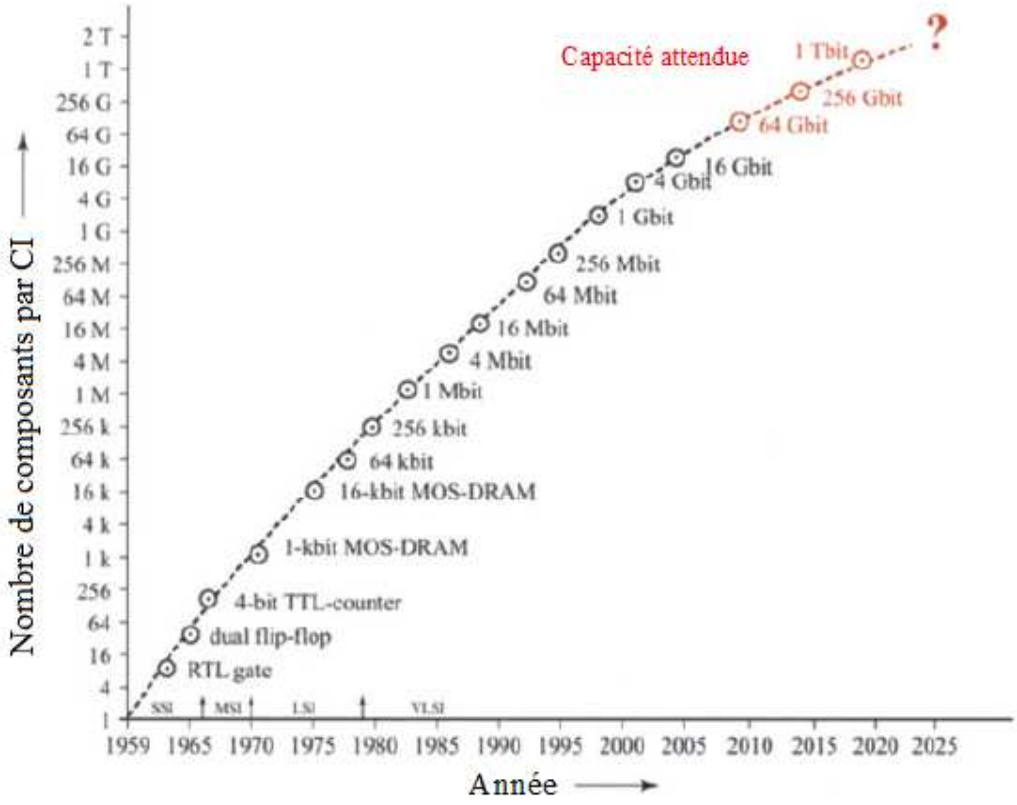


Fig. 1-10 : Augmentation du nombre de composants par circuit intégré (CI) [Veendrick'08].

II- Historique de la microscopie

La microscopie a fait des progrès considérables depuis l'invention du microscope optique en 1674 par Anton Van Leewenhoek. La figure 1-11 donne un résumé des inventions dans ce domaine avec les inventeurs correspondants à chaque invention et à chaque époque.

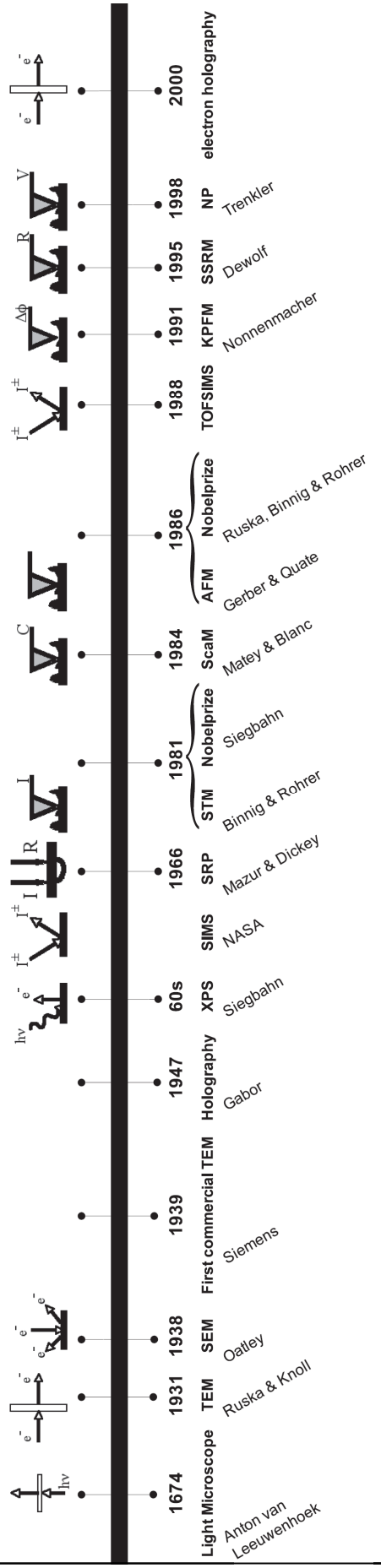


Figure 1-11 : Chronologie des outils analytiques avec les inventeurs correspondants [Duhayon'06].

1- Caractérisation par microscopie à sonde locale

La microscopie à sonde locale (en anglais Scanning probe microscopy (SPM)) est une technique basée sur l'utilisation d'une pointe sonde placée à proximité de la surface d'un échantillon qui permet, entre autres informations, de cartographier celle-ci de façon tridimensionnelle avec une résolution à l'échelle du nanomètre. Dans les cas extrêmes, on peut obtenir une résolution latérale de l'ordre de 0.1 nm et une résolution verticale de 0.01 nm. Le point de départ de la microscopie à sonde locale est l'invention du microscope à effet tunnel (STM) en 1982 [Binnig'82] sur la base d'un système que l'on peut appeler « cartographe » réalisé par Russell Young en 1971 [Young'72]. Le principe est basé sur le fait qu'une émission de courant par effet de champ peut s'établir entre une pointe métallique et une surface conductrice (ou semi-conductrice), émission dépendant exponentiellement de la distance qui les sépare. Plusieurs types de microscope à sonde locale ont été développés après l'apparition du STM pour différents besoins dont le plus répandu actuellement grâce à ses nombreuses applications est le microscope à force atomique (AFM). Le développement des divers types de microscopes à sonde locale est lié au besoin d'étude locale des propriétés électriques, magnétiques, optiques et d'en faire la corrélation avec les images topographiques. On peut citer différentes applications telles que la mesure du potentiel de surface [Nonnenmacher'91], de la conductance [O'Shea'95, Olbrich'98], de la capacité [Huang'94, Lee'02] de l'impédance [Shao'03, O'Haire'04, Pingree'05], de conductivité thermique [Altes'04, Balk'95], de magnétisme [Degen'08], de propriétés optiques [Novotny'95], etc.

2- Notre propre système de caractérisation

La technique nano-EBIC est basée sur la collecte du courant induit par bombardement électronique par une pointe sonde AFM conductrice. C'est une technique qui dérive de la méthode classique EBIC (electron beam induced current) que nous présenterons dans les paragraphes qui suivent. L'instrument utilisé pour cette étude est un système hybride combinant un microscope électronique à balayage (MEB) dans lequel est placé un microscope à force atomique (AFM) développé au laboratoire. Ce même système sera utilisé pour des mesures en C-AFM (conductif - AFM) et pour des mesures de courant induit (images et/ou profils).

2-1. Description succincte du système hybride (AFM/MEB)

Toutes nos mesures ; qu'il s'agisse d'images de courant induit, d'images électriques ou de profils, ont été effectuées grâce à cet instrument hybride [Troyon'97] dont le schéma de principe est donné à la figure 1-19 et dont certains éléments le constituant sont visibles dans l'image de la figure 1-20. L'AFM fabriqué au LMEN peut être facilement (en prenant certaines précautions) installé et utilisé pour les différentes caractérisations dans la chambre objet du MEB équipé d'un canon à émission de champ (GEMINI LEO-ZEISS). Il est évident que cette association présente des avantages indéniables et les études récentes les montrent bien [Troyon'07, Smaali'08, Gacem'10]. En effet, le MEB par exemple permet de visualiser très rapidement l'échantillon étudié avec un très grand champ et une grande profondeur de champ, alors que l'AFM est limitée à des images de quelques μm^2 obtenues en quelques minutes. Certaines parties de l'échantillon peuvent être rapidement sélectionnées, puis des images avec l'AFM peuvent être réalisées avec un fort grandissement en bénéficiant de sa haute résolution 3D.

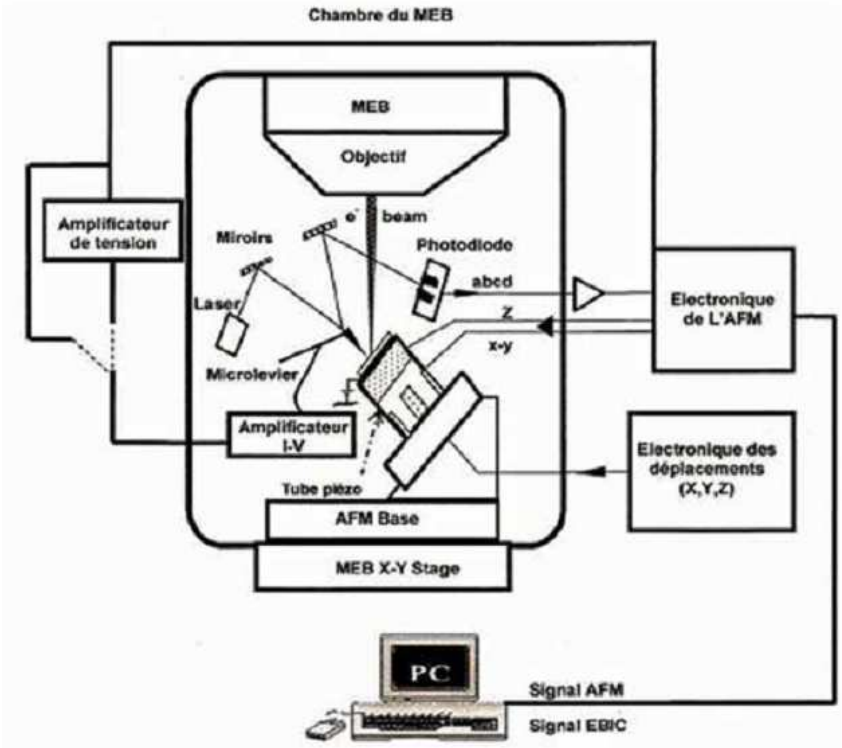


Figure 1-19 : Schéma de principe du système hybride combinant un MEB et un AFM.

La tête de l'AFM placée dans la chambre objet du MEB est inclinée de 45° par rapport au faisceau d'électrons. Le plan de l'échantillon est également incliné de 45° et fait face au détecteur d'électrons secondaires. La particularité de notre AFM est que la pointe est fixe, et l'échantillon monté sur un tube piézoélectrique se déplace et permet le balayage d'une surface d'environ 20 × 20 μm^2. Lors du choix d'une zone à étudier, l'échantillon peut être déplacé dans le plan (x, y) perpendiculaire à l'axe de la pointe sur une distance de ± 1.5 mm à quelques dizaines de nanomètres près grâce à deux moteurs pas à pas. Quant au troisième axe (z), il est commandé par un autre moteur pas à pas permettant d'engager la pointe au contact de la surface de l'échantillon à étudier. Pour plus de détails, voir les références [Troyon'97, Smaali'07, Gacem'08].

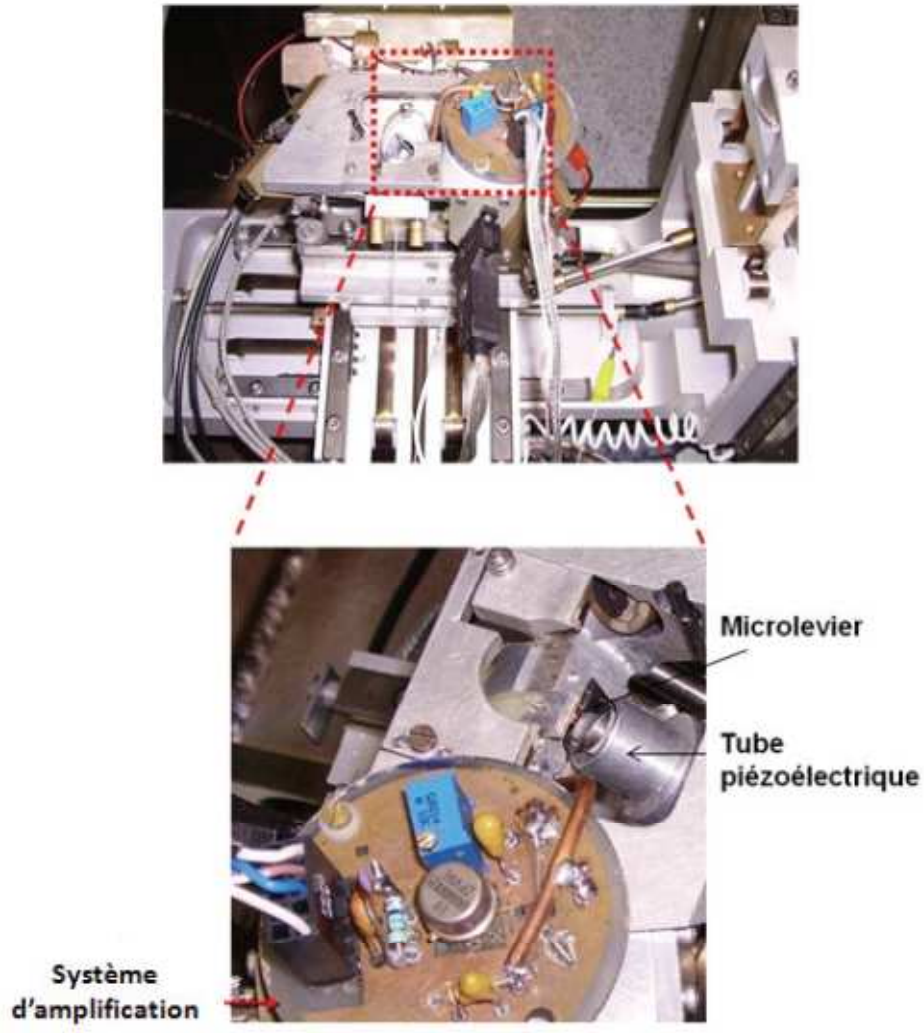


Figure 1-20. Images de l'AFM fabriqué au LMEN, monté sur le porte-échantillon du MEB.

2-2. Quelques utilisations spécifiques : mesures électriques en C-AFM, nano-EBIC et topographique

a- Mesure électrique en C-AFM

L'AFM en mode conductif est une technique puissante et sensible pour la caractérisation électrique des variations de conductivité des échantillons. Elle permet de mesurer et de cartographier la distribution locale du courant de l'échantillon dont la valeur peut varier entre quelques pico-ampères et quelques microampères et imager simultanément sa topographie. C'est une technique utile pour la caractérisation d'une grande variété de matériaux comprenant les couches diélectriques minces, les couches ferroélectriques, les polymères conducteurs, les nanostructures semi-conductrices… Son principe est simple, il suffit de remplacer la pointe habituelle de l'AFM par une pointe conductrice et d'utiliser l'AFM en mode contact. Lorsqu'on polarise l'échantillon par rapport à la pointe, on recueille un courant traduisant la conduction locale entre la pointe et la surface. La formation du contraste électrique est obtenue séquentiellement point par point en déplaçant la surface de l'échantillon par rapport à la pointe conductrice. L'image électrique est alors reconstruite simultanément avec l'image topographique. On peut aussi effectuer des mesures locales de courant – tension.

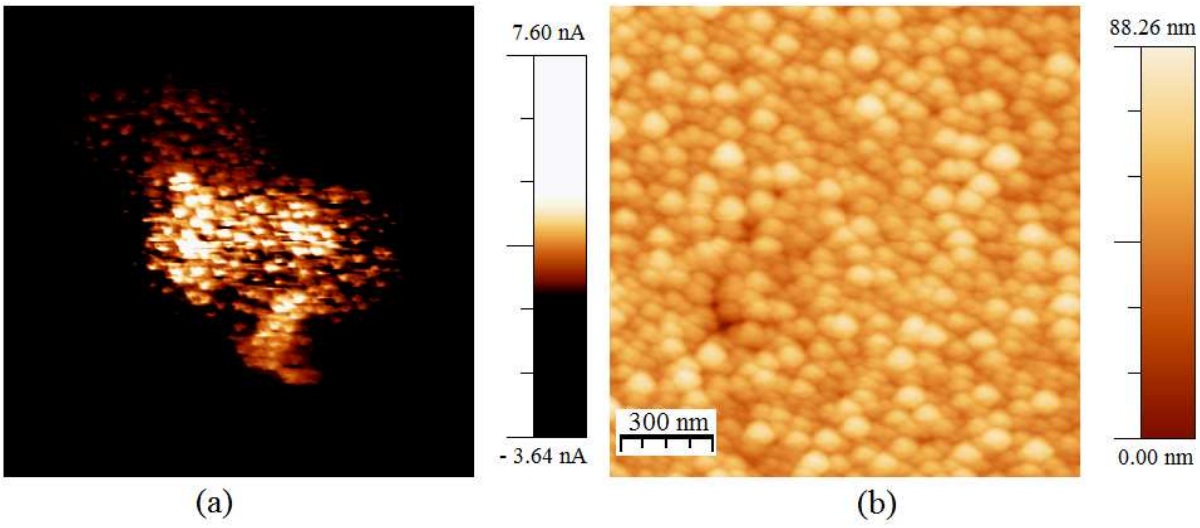


Figure 1-21. Image C-AFM obtenue avec une tension de 0 V sur une zone irradiée d'un échantillon contenant des NCs ayant un diamètre moyen de 70 nm (a). Image topographique obtenue simultanément à l'image C-AFM (b).

La figure 1-21 donne un exemple d'image topographique d'une structure contenant sur sa surface des nanocristaux de Ge de ~70 nm diamètre moyen avec l'image électrique en C-AFM prise sous une tension de polarisation nulle pour mettre en exergue la réponse de NCs ayant subi un bombardement électronique dans les conditions d'obtention d'une mesure EBIC que nous expliquerons juste après. Principe de la technique nano-EBIC.

b- Principe de la technique nano-EBIC

La technique nano-EBIC dérive de la technique EBIC classique dont le principe et les fonctionnalités pratiques sont bien connus [Munakata'66, Mataré'68, Hackett'71, Jastrzebski'75, Kazumura'77, Akamatsu'81, Dimitriadis'81, Leamy'82, Babras'90, Cavalcoli'91, Boudjani'95, Chan'96, Donolato'96, Sekiguchi'96, Guermazi'00, Guermazi'01, Chen'04, Moldovan'07]. Ici, nous donnons un bref aperçu. Pour plus d'informations, voir les références citées ci-avant. Le principe du courant induit par un faisceau d'électrons repose sur un processus de création de paires électron – trou sous l'impact d'un faisceau électronique suffisamment énergétique et la collecte de ces porteurs minoritaires en excès. Cette collecte de porteurs se fait traditionnellement par l'intermédiaire d'une électrode métallique. Pour collecter des porteurs de charges, ces derniers sont séparés soit par un champ électrique local (présence d'une zone de charge d'espace), soit, par un champ appliqué externe si le champ local n'est pas suffisant. Ces porteurs, au delà de la zone de charge d'espace, sont soumis à leur gradient de concentration et parcourent en moyenne pendant un temps τ (durée de vie) une distance L (longueur de diffusion). Par la suite, ils sont ou collectés, ou recombinés. Cette technique permet de cartographier les défauts électriquement actifs et permet aussi de déterminer certains paramètres physiques importants dans les domaines de l'optoélectronique et de la microélectronique. En effet, on peut accéder à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires ainsi qu'à leur durée de vie. On peut aussi accéder à la vitesse de recombinaison en surface, celle-ci traduit les effets de surface sur le courant induit. Néanmoins, cette technique, bien qu'elle soit très utilisée pour l'étude de composants à base de semi-conducteurs, atteint sa limite de validité pour la caractérisation de nanomatériaux. En effet, sa résolution se trouve affectée par le volume de génération des paires électron-trou.

Dans le cadre de la technique nano-EBIC, la différence majeure avec la technique EBIC classique est le mode de collecte du courant induit ; l'électrode métallique a été

remplacée par une pointe conductrice de l'AFM utilisé en mode contact. Il se crée alors sous la pointe une nano-zone de déplétion dans laquelle règne un champ local permettant de séparer les paires électron-trou. Ainsi, la collecte du courant induit se fait au niveau d'un nano-contact. En pratique, pour obtenir une image du courant induit, la pointe et le faisceau sont fixes. Ce dernier est focalisé à proximité de la pointe à une distance très inférieure à la longueur de diffusion. L'image est construite par déplacement (balayage) en X et Y de l'échantillon grâce au tube piézoélectrique pour former une image nano-EBIC (sans oublier que simultanément, on obtient aussi une image topographique).

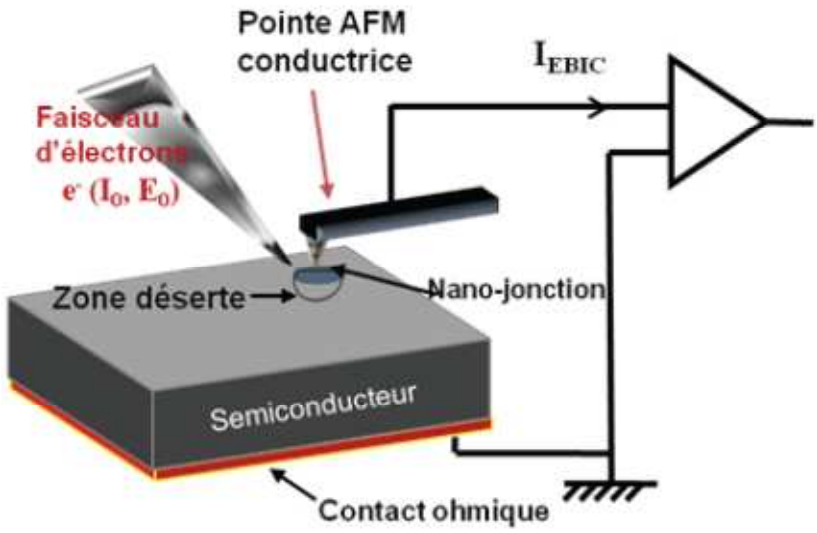


Figure 1-22. Schéma de principe de la technique nano-EBIC

Nous verrons dans le chapitre suivant, que la nature des porteurs collectés dépend fortement de la nature électrique du nano-contact qui s'établit entre la pointe de l'AFM et la surface de l'échantillon étudié. Ici, nous limiterons notre présentation succincte à la résolution de cette nouvelle technique vis-à-vis de la méthode standard. Récemment, nous avons bien montré que la technique nano-EBIC est bien résolutive et que sa résolution se trouve aux alentours de 10 nm voire sous 10 nm [Gacem'08]. Ceci vient principalement du fait que la

résolution n'est plus limitée par le volume de génération comme c'est le cas de la technique standard, mais plutôt par la dimension de la nano-zone de déplétion située sous le nano-contact.

Finalement, avec le système hybride, nous pouvons effectuer des images en C-AFM, des mesures locales de courant-tension et des mesures nano-EBIC. A titre d'exemple, voici quelques résultats types obtenus sur des structures Si/SiO_2 contenant sur leur surface des nanocristaux sphériques de Ge. La figure 1-23 montre une image nano-EBIC mesurée sans polarisation entre pointe et échantillon et l'image topographique correspondante. La pointe conductrice de l'AFM utilisée pour cette mesure était en Pt-Ir. L'intensité du courant de sonde électronique était 1.5 nA et l'énergie d'accélération 5 keV. L'image nano-EBIC (figure 1-23 a) révèle la position des NCs dont la correspondance est montrée par l'image topographique.

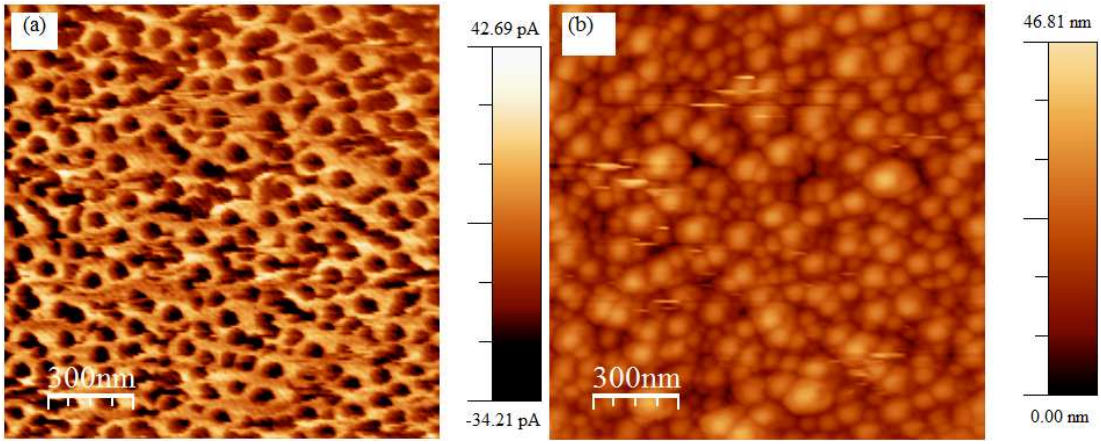


Figure 1-23 : (a) Image électrique obtenue avec un courant de sonde électronique de 1.5 nA, à une énergie d'accélération de 5 keV et (b) image topographique correspondante. Les deux images sont obtenues simultanément avec une pointe en Si recouverte d'une couche métallique de Pt-Ir.

III- Conclusion

Le but de ce premier chapitre était de donner un aperçu sur les évolutions à la fois technologiques et instrumentales. Dans cet historique nous ne présentons pas une description exhaustive, nous nous sommes limités à une présentation succincte de l'évolution des composants à base de semi-conducteurs puisque notre travail concerne les nanocristaux de Ge déposés sur une structure Si/SiO_2.

Nous avons donné un aperçu de la technique ce caractérisation originale développée au laboratoire, la nano-EBIC, basée sur la combinaison MEB et AFM sans détailler les fonctionnalités des instruments qui sont maintenant bien connues, ceci afin d'éviter des redondances par rapport aux récents travaux [Troyon'97, Smaali'07, Smaali'08, Gacem'08, Gacem'10]. Si le lecteur cherche des informations supplémentaires, il pourra les trouver dans les références citées ci-dessus. Nous rappelons simplement que la nano-EBIC a montré sa faisabilité dans l'étude de jonctions p-n [Smaali'08], de boîtes quantiques [Troyon'07] et des nanocristaux [Gacem'10].

Dans le chapitre suivant, nous présenterons des résultats obtenus sur des structures Si/SiO_2 contenant des nanocristaux de germanium déposés sur leur surface.

Bibliographie

[Akamatsu'81] B. Akamatsu, J. Hénoc and P. Hénoc., J. Appl. Phys., 52, 7245(1981)

[Allen'55] L. C. Allen., Phys. Rev., 98, 993 (1955)

[Altes'04] A. Altes, R. Heiderhoff and L.J. Balk, J. Phys. D: Appl. Phys. 37, 952 (2004).

[Babras'90] S. Babras, V. G. Bhide, N. R. Rajopadhye and S. V. Bhoraskar, J. Appl. Phys. 67, 2800 (1990)

[Balk'95] L.J. Balk, M. Maywald and R.J. Pylkki, Inst. Phys. Conf. Ser, 146, 655 (1995).

[Bebb'72] H.B. Bebb and E.W. Williams, "Photoluminescence I: Theory", in Semiconductors and Semimetals (R.K. Willardson et A.C. Beer, eds.) Academic Press, NY, 8, 181 – 320, 1972; E.W. Williams et H.B. Bebb, "Photoluminscence II: Gallium Arsenide", ibid, 320 – 392.

[Bernoux et al.] F. Bernoux, J.P. Piel, B. Castellon, C. Defranoux, J.H. Lecat, P. Boher et J.L. Stehlé., Techniques de l'Ingénieur, traité Mesures et Contrôle, R6 490-1.

[Binnig'82] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel., Phys. Rev. Lett. 49, 57(1982).

[Binnig'83] G. Binnig and H. Rohrer., Surf. Sci. 126, 236 (1983).

[Bonnell'01] D.A. Bonnell, Scanning Probe Microscopy and pectroscopy, 2nd Ed., Wiley-VCH, New York, 2001.

[Borries'39] B. Borries and E. Ruska., Naturwissenschaften, 27, 577 (1939).

[Boudjani'95] A. Boudjani, B. Sieber and L. Boudjani., Semicond. Sci. Technol., 10, 1151 (1995).

[Buuren'98] T. van Buuren, L. N. Dinh, L. L. Chase, W. J. Siekhaus, and L. J. Terminello, Phys. Rev. Lett. 80, 3803 (1998).

[Cavalcoli'91] D. Cavalcoli et al., J. Appl. Phys. 70, 2163 (1991).

[Chan'96] D.S.H. Chan et al., IEEE. Trans. Electron Devices, 42, 963 (1995).

[Chelikowsky'76] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen., Phys. Rev. B., 14, 556 (1976).

[Chen'04] J. Chen, T. Sekiguchi, S. Nara and D. Yang., J. Phys.: Condens. Matter 16, S211- S216 (2004).

[Cho'09] C-H. Cho, S-K. Kim, B-H. Kim and S-J. Park., Appl. Phys. Lett., 95, 243108 (2009).

[Dean'82] P.J. Dean "Photoluminescence as a Diagnostic of Semiconductors", Prog. Crystal Growth Charact. 5, 89 – 174, (1982).

[Degen'08] C.L. Degen, Appl. Phys. Lett., 92, 243111/1 (2008).

[Delley'93] B. Delley and E. F. Steigmeier., Phys. Rev. B., 47, 1397 (1993).

[Dimitriadis'81] C. A. Dimitriadis., J. Phys. D : Appl. Phys., 14, 2269 (1981).

[Donolato'96] C. Donolato, R. Nipoti, D. Govoni, G.P. Egeni, V. Rudello, P. Rossi, Materials Science and Engineering: B, 42, 306 (1996).

[Duhayon'06] N. Duhayon., thèse, Université catholique de Leuven, 2006.

[Fulton'87] T.A. Fulton and G.J. Dolan, Phys. Rev. Lett. 59, 109 (1987).

[Gacem'08] K. Gacem, « Contribution à l'étude du transport et du stockage de charges dans des structures contenant des nanocristaux de germanium », thèse de doctorat, université de Reims, 2008.

[Gacem'10] K. Gacem, A. El Hdiy, M. Troyon, I. Berbezier and A. Ronda., Nanotechnology, 21, 065706/1 (2010).

[Goldstein'85] L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin, M. N. Charasse and G. Le Roux., Appl. Phys. Lett., 47, 1099(1985).

[Guermazi'00] S. Guermazi, A. Toureille, C. Grill, B.E. Jani and N. Lakhoua, Journal of physics III, 9, 43 (2000).

[Guermazi'01] S. Geurmazi, H. Guermazi, Y. Milk, B. E. Jani, C. Grill and A. Toureille, Journal of physics III, 16, 45 (2001).

[Hackett'71] W. H. Hackett., J. Appl. Phys., 43, 1649 (1972).

[Herman’55] F. Herman, Proc. IRE, 43, 1703 (1955).

[Herman’96] I.P. Herman, Optical Diagnostics for Thin Film Processing, Academic Press, San Diego, 1996.

[Huang’94] Y. Huang and C.C. Wialliams, J. Vac. Sci. Technol-B, 12, 369 (1994).

[Intel] www.intel.com

[ITRS] The International Technology Roadmap for Semiconductors., www.itrs.net

[Jastrzebski’75] L. Jastrzebski, J. Lagowski and H. C. Gatos., Appl. Phys. Lett., 27, 537 (1975).

[Kanoum’06] M. Kanoum, T. Baron, E. Gautier and A. Souifi., Mater. Sci. Eng., 26, 360 (2006).

[Kazumura'77] M. Kazumura, S. Fujiwara, H. Iwasa and I. Teramoto., IEEE. Trans. Electron Device, 24, 961 (1977)

[Kim’04] T-Y. Kim, N-M. Park, K-H. Kim, G- Y. Sung, Y-W Ok, T-Y. Seong, C-J. Choi, App, Phys, Lett, 85, 5355 (2004).

[Knoll’31] M. Knoll and E. Ruska., Ann. Physik, 12, 607 (1931).

[Leamy'82] H.J. Leamy, J. Appl. Phys. 53, R51 (1982).

[Lee’02] D.T. Lee, P.J. Pelz and B. Bhushan, Rev. Sci. Instrum., 73, 3525 (2002).

[Lutz’99] H. D. Lutz and H. Haeuseler., J. Molercular Structure. 511, 69 (1999).

[Mataré'68] H.F. Mataré, C.W. Laakso, Appl. Phys. Lett. 13, 216 (1968).

[Mo'00] Y-J. Mo, Y-C. Li J-G. Zhao, K-A. Fen, C-Y. Xiao and M-X. Wa., J. Magn. Magn. Mater., 213, 278 (2000).

[Moldovan'07] G. Moldovan, P. Kazemian, P. Edwards, V. K. S. Ong, O. Kurniawan and C. J. Humphreys., Ultramicrosopy, 107, 382 (2007).

[Moore'65] G.E. Moore., Electronics., 38, 114 (1965).

[Munakata'66] C. Munakata, Microlectr. Reliab. 5, 267 (1966).

[Niquet'00] Y. M. Niquet, G. Allan, C. Delerue and M. Lannoo ., App. Phys, Lett., 77, 1182 (2000).

[Nonnenmacher'91] M. Nonnenmacher, M.P. O'Boyle and H.K. Wickramasinghe, Appl. Phys. Lett. 58, 2921 (1991).

[Novotny'95] L. Novotny, D.W. Pohl and P. Regli', Ultramicrosc, 57, 180 (1995)

[O'Haire'04] R. O'Haire, M. Lee and F.B. Prinz, J. Appl. Phys. 95, 8382 (2004)

[Olbrich'98] A. Olbrich, B. Ebersberger and C. Boit, Appl. Phy. Lett. 73, 3114 (1998).

[Ono'02] Y. Ono, K. Yamazaki, M. Nagase, S. Horiguchi, K. Shiraishi and Y. Takahashi., Solid- State Electronics, 46, 1723(2002).

[O'shea'95] S.J. O'Shea, R.M. Atta, M.P. Murrell and M.E. Welland, J. Vac. Sci. Technol. B-13, 1945 (1995).

[Park'01] N. M. Park, C-J. Choi, T-Y. Seong and S-J. Park., Phys. Rev. Lett., 86, 1355 (2001).

[Petroff'82] P.M. Petroff, A.C. Gossard, R.A. Logan et W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 41, 635 (1982).

[Phillips'58] J. C. Phillips., Phys. Rev., 112, 685 (1958).

[Pingree'05] L.S.C. Pingree, E.F. Martin, K.R. Shull and M.C. Heram, IEEE Trans. Nanotechnol., 4, 255 (2005).

[Roblin et al] G. Roblin., Techniques de l'Ingénieur, traité Mesures et Contrôle, R6 712-1.

[Schuppler'94] S. Schuppler, S. L. Friedman, M. A. Marcus, D. L. Adler, Y.-H. Xie, F. M. Ross, T. D. Harris, W. L. Brown, Y. J. Chabal, L. E. Brus and P. H. Citrin, Phys. Rev. Lett. 72,2648 (1994).

[Sekiguchi'96] T. Sekiguchi, B. Shen, T. Watanabe, K. Sumino, Materials Science and Engineering: B, 42, 235(1996).

[Shao'03] R. Shao, S.V. Kalinin and D.A. Bonnell, J. Appl. Phys. 82, 1869 (2003).

[Smaali'07] K. Smaali, «EBIC en champ proche et microscopie à force atomique à pointe conductrice : application à l'étude du transport électronique des boîtes quantiques » thèse de doctorat, Université de Reims, 2007.

[Smaali'08] K. Smaali and M. Troyon., Nanotechnology, 19, 255709 (2008).

[Smith'79] R. A. Smith, "Semiconductors", 2nd Ed., Cambridge University Press, London (1979).

[Sze'07] S. M. Sze, Kwok. K . Ng, Third Edition, John Willey and Sons, Jnc, Editor, 2007.

[Takahashi'94] Y. Takahashi, M. Nagase, H. Namatsu, K. Kurhara, K. Iwdate, Y. Nakajima, S. Horiguchi, K. Murase and M. Tabe, Tech. Dig. Of International Electron Devices Meeting, Washington, 938 (1994).

[Tang'89] I. N. Tang and K. H . Fung., J. Aerosol science., 20, 609(1989).

[Tiwari'94] S. Tiwari, G.D. Pettit, K.R. Milkove, R. Legoues, R.J. Davis and J.M. Woodall, Appl. Phys. Lett. 64, 3536 (1994).

[Tiwari'95] S. Tiwari, F. Rana, W. Chen, K. Chen and H. Hanafi, 53rd Annual Device Research Conference Digest, Charlottesville, 50 (1995).

[Tompkins'93] H. G. Tompkins., Academic Press, Boston (1993).

[Troyon'07] M. Troyon and K. Smaali., Appl. Phys. Lett., 90, 212110 (2007).

[Troyon'07] M. Troyon, K. Smaali, M. Molinari, A. El Hdiy, G. Saint-Girons and G. Patriarche., Semicond. Sci. Technol., 22, 755(2007).

[Usmani'10] F. A. Usmani, M. Hasan., Microelectronics., 41, 395(2010).

[Veendrick'08] H. Veendrick, "Nanometer CMOS ICs", 2008 Springer, ISBN 978-1-4020-8332-7.

[Vinciguerra'00] V. Vinciguerra, G. Franzo, F. Priolo, F. Lacona and C. Spinella., J. App. Phys., 87, 8165(2000).

[Wheeler'82] R.G. Wheeler, K.K. Choi, A. Goel, R. Wisnieff and D.E. Prober, Phys. Rev. Lett. 49, 1674 (1982).

[Yano'93] K. Yano, T. Ishii, T. Hashimoto, T. Kobayashi, F. Murai and K. Seki, Tech. Dig. Of International Electron Devices Meeting, Washington, 541 (1993).

[Young'72] R. Young, J. Ward and F. Scire., Rev. Sci. Instrum. 43, 999 (1972).

Chapitre 2

Utilisation de la technique nano-EBIC pour déterminer la longueur de la diffusion de structures contenant des nanocristaux de Ge

Introduction 46

I- Description des échantillons étudiés 48

II- Obtention des mesures nano-EBIC : spectres et imageries 51

1- Image électrique par nano-EBIC 51

2- Obtention de la longueur de diffusion 55

a- Profil type du courant induit 55

b- Effet de l'énergie primaire sur le profil du courant induit 56

c- Efficacité de collecte 60

d- Modèles permettant l'extraction de la longueur de diffusion effective 62

III-Effets de l'énergie primaire et de la taille des nanocristaux sur la variation de la longueur effective de diffusion 67

1- Effet de l'énergie primaire 67

2- Effet de la taille des nanocristaux de Ge 70

3- Comparaison avec certaines données de la littérature 72

IV- Conclusion 75

Bibliographie 77

ANNEXE 82

Introduction

La longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès, générés dans un élément semiconducteur ou dans un dispositif à base d'éléments semiconducteurs, est l'un des plus importants paramètres physiques contrôlant la fiabilité des dispositifs optoélectroniques au niveau du processus de conversion. La longueur de diffusion contrôle aussi les phénomènes de conduction dans les composants microélectroniques. Ce paramètre est étudié depuis plus de trois décennies [Wittry'67, Hackett'72, Jastrezbski'75, Wu'78, Ioannou'79 '82, Leamy'82, Artz'85, Scheer'89, Fuyuki'81, cavalcoli'91, Cavallini'92, Daniel'95, chernyak'96, Brendel'99, Luke'01, Ong'01, Boudjani'05, Kurniawan'06, Tirpak'06, Sayad'09]. Différentes configurations ont été proposées en ce sens [Wu'02, Chernyak'01, Cavalcoli'91, Daniel'95, Hackett'72, Daniel'01, Miyajima'98, Leamy'82]. L'une des techniques très souvent utilisées pour déterminer ce paramètre est une technique très connue, elle porte le nom de méthode EBIC (Electron Beam Induced Current, ou courant induit par bombardement électronique). Nous avons montré dans le précédent chapitre, que cette technique utilisée en tant que telle ne permet pas d'avoir une bonne résolution dans le cas d'étude de nano-éléments ou nano-composants. Nous avons, pour ce faire, décrit et présenté la technique nano-EBIC que nous utilisons pour la caractérisation de nanostructures. Quant à la théorie de l'EBIC, nous en donnons, en annexe à ce chapitre, un résumé succinct donnant les informations nécessaire à la compréhension du processus.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons essentiellement à la détermination de la longueur effective de diffusion à partir de profils de courant induit par bombardement électronique par l'utilisation de la technique nano-EBIC. Les échantillons utilisés contiennent sur leur surface des nanocristaux (NCs) de Ge non recouverts, de densités et de tailles différentes. La valeur de la longueur de diffusion sera dépendante des caractéristiques de ces nanocristaux.

En premier lieu, nous donnerons une description succincte de la procédure d'élaboration des échantillons utilisés. Puis, nous décrirons aussi brièvement que possible la procédure d'utilisation de la technique nano-EBIC et l'extraction de la longueur effective de diffusion basée sur l'ajustement des points expérimentaux formant le profil du courant induit par des modèles théoriques donnés dans la littérature. Ensuite, nous décrirons les effets d'un

certain nombre de paramètres sur la valeur et l'évolution de la longueur effective de diffusion. Parmi ces paramètres, on cite l'énergie d'accélération des électrons primaires et la taille des nanocristaux de Ge. L'évolution de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire n'a fait l'objet d'études spécifiques dans la littérature que dans de très rares cas. C'est la raison pour laquelle la fin de ce chapitre est consacrée à la comparaison de nos résultats avec les rares données de la littérature, notamment celles de Jastrzebski et de Miyajima [Jastrzebski'75 et Miyajima'98].

I- Description des échantillons étudiés

Les échantillons utilisés qui contiennent des nanocristaux non recouverts en leur surface ont été réalisés par un processus appelé processus de cristallisation /démouillage [Berbezier'06, Danilson'06, Legrand'02, Karmous'06, Szkutnik'08]. Ce processus est basé sur l'effet de cristallisation à haute température [Ono'99, Nuryadi'00] ; une couche amorphe d'un matériau voulu (Si ou Ge) est déposée sur une cible (une couche de Si/SiO_2) puis tout le système est recuit à une haute température. Sous l'effet de cette température élevée, la matière s'agglomère créant ainsi des nanocristaux. L'épaisseur de la couche amorphe déposée avant recuit contrôle la taille et la densité des nanocristaux [Berbezier'06, Szkutnik'08]. Plus la couche amorphe est épaisse, plus grande est la taille des nanocristaux.

Les échantillons ont été élaborés à l'Institut « Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence » (IM2NP) suivant un procédé dont nous donnons ici un aperçu. Pour plus de détail, voir [Szkutnik'08] :

- Le substrat de silicium orienté (001), dopé (n), est nettoyé par une solution HF pour enlever la couche d'oxyde natif. Par la suite, on procède à la croissance rapide (Rapid thermal annealing – RTA en anglais) d'une couche amorphe de 5 nm d'oxyde de silicium. Cette partie est faite à STMicroelectronics. La suite de l'élaboration se fait à l'IM2NP.
- Avant tout dépôt, la structure Si/SiO_2 est d'abord nettoyée chimiquement en utilisant une solution de péroxyde sulfurique (H_2SO_4:H_2O_2 (3:1)) et de péroxyde acidique (HCl :H_2O_2 : H_2O (1 :1 :20)) [Berbezier'06, Karmous'06, Szkutnik'08]. Ensuite, la structure est introduite dans la chambre d'épitaxie pour être traitée thermiquement à 700°C pendant 30 minutes à l'intérieur de la chambre d'épitaxie sous-ultra vide (10^{-10} Torr). Ce traitement est pratiqué pour avoir une surface propre.
- Puis une couche de germanium amorphe d'épaisseur *h* (en nm) est déposée par épitaxie par jet moléculaire à température ambiante sous ultra-vide (10^{-11} Torr). Finalement, l'échantillon subit un recuit in-situ à 700 °C pendant 30 min provoquant la formation de nanocristaux. Ce processus est illustré à la figure 2-1.

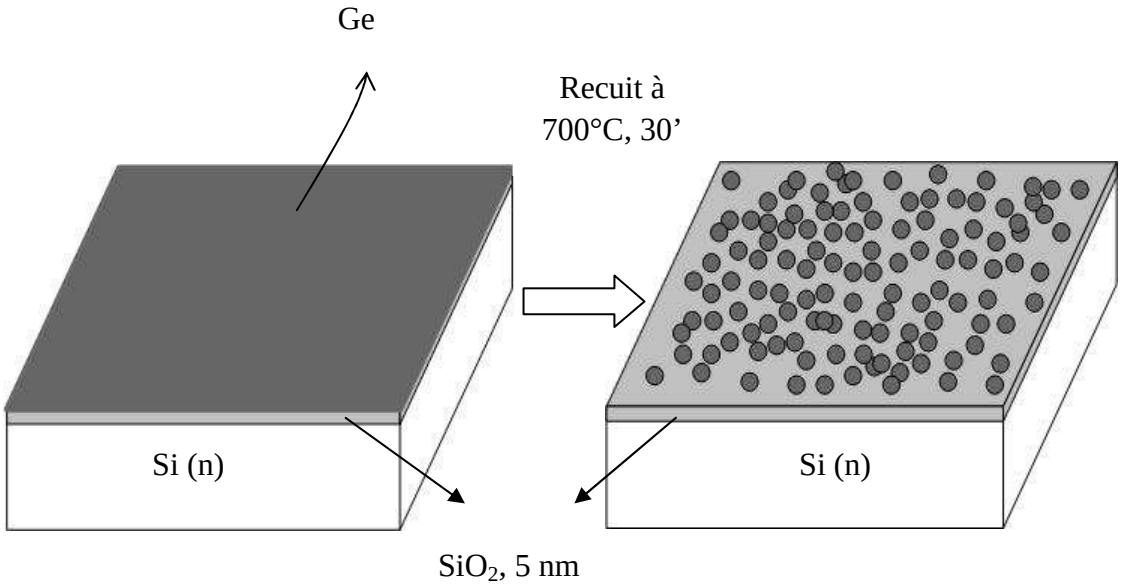


Figure 2-1 : Illustration du procédé de synthèse des nanocristaux de Ge par le processus demouillage/cristallisation.

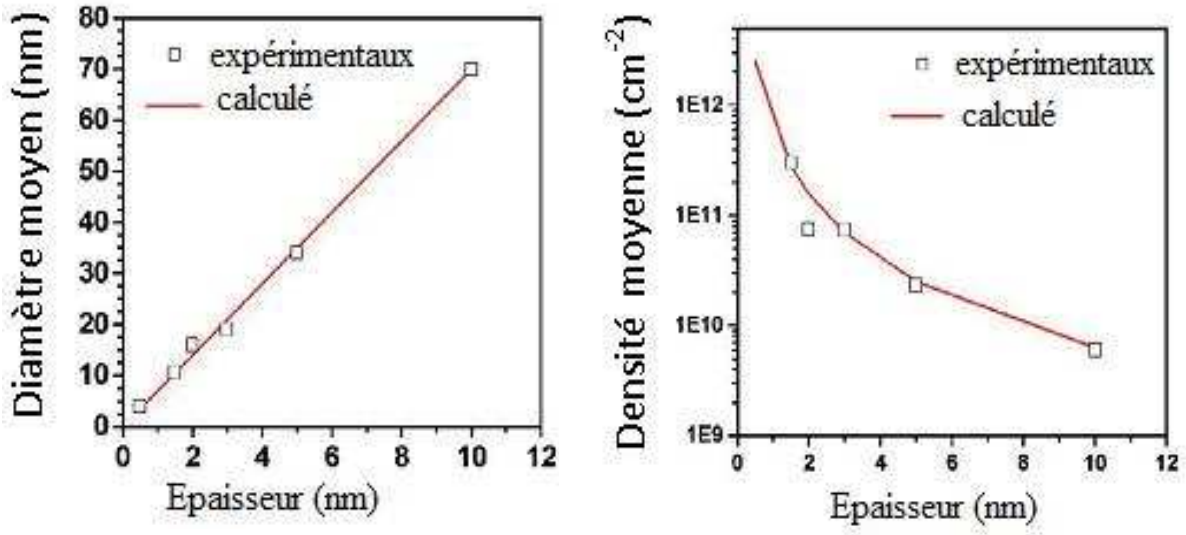


Figure 2-2 : Evolution de la taille (Φ) et de la densité (d) des nanocristaux de Ge en fonction de l'épaisseur (h) de la couche amorphe de Ge [Szkutnik'08].

La figure 2-2 présente les relations entre la taille (Φ) et la densité (d) des nanocristaux en fonction de l'épaisseur de la couche de Ge. La relation entre la taille moyenne des nanocristaux de Ge et l'épaisseur (h) de la couche amorphe de Ge est $\Phi = 7x\ h$, alors que l'expression donnant la densité des nanocristaux est $d = 6x10^{-3}/h^2$ [Szkutnik'08].

Afin de pouvoir estimer la densité des nanocristaux à la surface, nous avons réalisé des images topographiques par AFM en mode contact. La figure 2-3 présente une image topographique type d'un échantillon contenant des NCs de forme sphérique de Ge ayant un diamètre moyen de 50 nm suite à un dépôt de 8 nm d'épaisseur de Ge amorphe. La densité a été estimée à $\sim 10^{10}$ cm^{-2}.

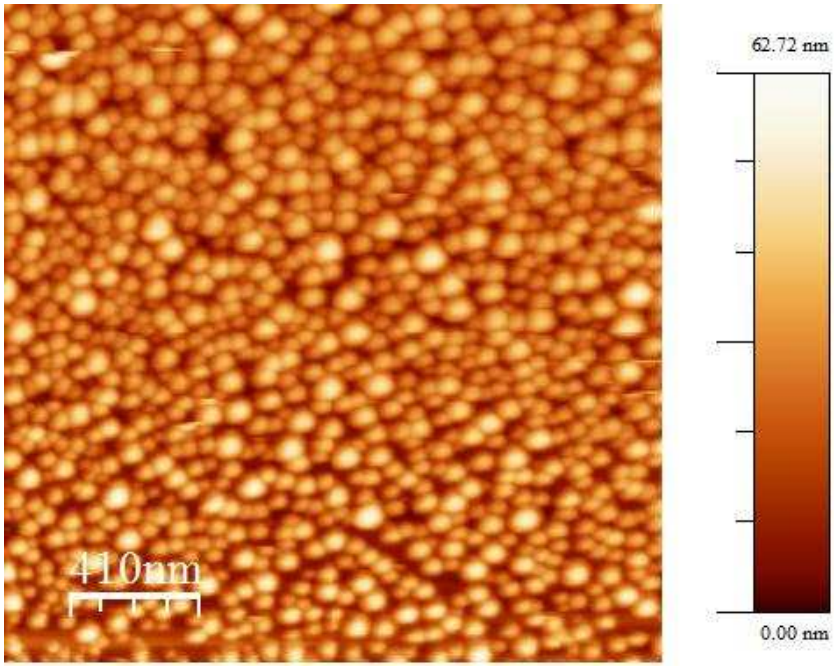


Figure 2-3 : Image topographique d'un échantillon contenant des NCs de Ge de diamètre moyen égal à 50 nm.

Dans cette étude, nous utilisons deux échantillons dont les caractéristiques sont résumées au tableau 2-1.

Nom d'échantillon	Epaisseur de Ge amorphe (nm)	Taille moyenne des NCs de Ge (nm)	Densité (cm^{-2})
NC_{50}	8	50	$\sim 10^{10}$
NC_{70}	12	70	$6x10^{9}$

Tableau 2-1 : Caractéristiques des nanocristaux utilisés dans l'étude.

II- Obtention des mesures nano-EBIC : spectres et imageries

Comme nous l'avons signalé dans le chapitre précédent, la technique nano-EBIC a montré sa bonne résolution (~20 nm) dans l'imagerie de boîtes quantiques (Qdots) [Smaali'08]. Cette technique, appelée aussi EBIC en champ proche (NF-EBIC) permet aussi non seulement d'étudier le transport local à travers des nanocristaux (NCs), mais aussi le mécanisme de rétention de charges dans un NC individuel de Ge [Gacem'10]. Dans ce qui suit, nous décrivons donc brièvement une image électrique (ou EBIC) typique obtenue par cette technique, et par la suite nous nous intéresserons à la mesure de la longueur effective de diffusion.

1- Image électrique par nano-EBIC

Les figures 2-4 a et b montrent deux images typiques obtenues sur l'échantillon NC_{50} acquises simultanément; l'image électrique et son image topographique, respectivement. L'image EBIC est réalisée avec un faisceau électronique ayant une énergie primaire de 5 keV et un courant sonde de 1.5 nA. Le balayage de la surface ligne par ligne est effectué par le

mouvement du piézoélectrique déplaçant l'échantillon avec une fréquence de 0.5 Hz. Et le courant induit est recueilli par une pointe conductrice en silicium couvert de diamant dopé p ayant une faible résistivité (0.003 à 0.005 Ω×cm).

L'image topographique, dont le rôle ici est l'identification des zones participant au transport électrique dans le cas d'images nano-EBIC ou C-AFM, montre bien une forme circulaire relativement régulière dont la taille est d'environ 50 nm. Ce qui permet de constater un fort contraste montrant les positions des nanocristaux de Ge. Le courant induit passe préférentiellement à travers ces NCs. Néanmoins, on doit relever que les images électrique et topographique ne sont pas parfaitement superposables. L'image du courant induit semble être légèrement décalée par rapport à l'image topographique. Ceci est un artefact probablement du au fait que le contact ponctuel qui doit être un bon conducteur n'est pas exactement situé à l'extrême bout de la pointe AFM, mais légèrement décalé. Ceci peut probablement être expliqué par la présence de petits grains formés à l'extrémité de la pointe lors du processus de fabrication.

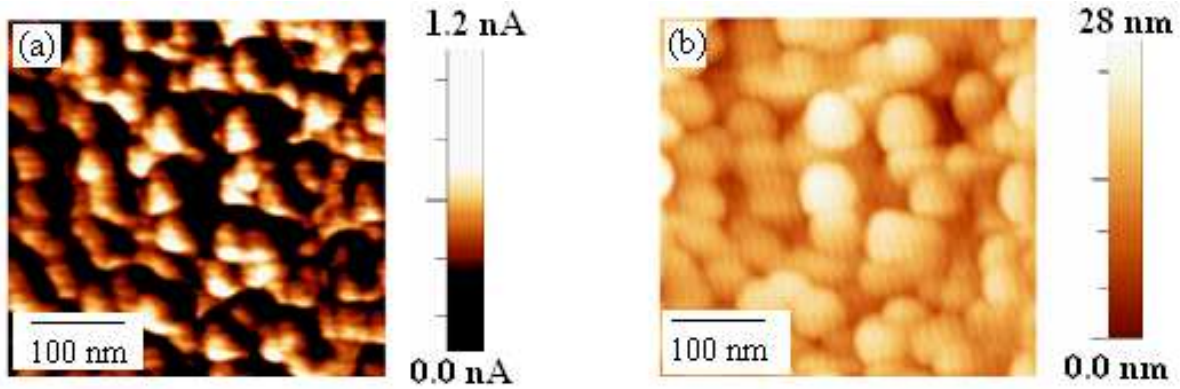


Figure 2-4 : Images obtenues sur l'échantillon NC_{50}. a) image électrique nano EBIC ; b) image topographique obtenue simultanément avec l'image EBIC.

Pour savoir quel type de porteurs de charge est impliqué dans cette expérience, le processus de conduction du contact pointe AFM/échantillon doit être expliqué. En effet, la nature du nano-contact entre la pointe AFM et la surface de l'échantillon contrôle le type de

porteurs de charges traversant le système. Dans cette étude, la pointe AFM est en diamant dopé p, formant une nano-hétérojonction avec la surface de l'échantillon. Pour mieux savoir quel type de porteur est collecté par la pointe AFM, nous avons besoin de considérer le diagramme de bandes d'énergie. Ici, la couche superficielle d'oxyde natif, qui couvrirait les nanocristaux de Ge a été négligée en raison de sa très faible épaisseur (~1nm) [Morita'90].

	Dopage (cm^{-3})	Gap (eV)	Affinité électronique (eV)	Travail de sortie (eV)
La pointe de diamant dopé p	$7x10^{17}$- $4x10^{18}$	5.45	2.7	~ 6.2
NCs de Ge		~ 0.67	4.13	
Oxyde de silicium		~ 9.8	1.1	
Substrat silicium dopé type n	~$5x10^{18}$- 10^{19}	1.12	4.01	~4.15 - 4.1

Tableau 2-2 : Quelques caractéristiques de la pointe diamant, des nanocristaux de Ge, de l'oxyde silicium et du substrat de silicium.

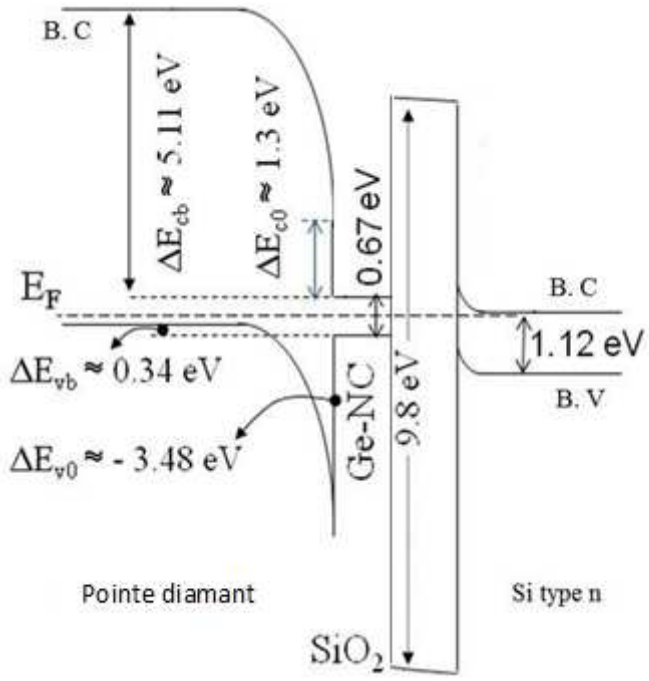


Figure 2-5 : Diagramme de bandes d'énergie lorsque le contact pointe/échantillon se trouve en équilibre thermodynamique : la pointe AFM est considérée en contact avec un nanocristal de Ge.

Le tableau 2-2 donne les caractéristiques des différents éléments (pointe diamant, oxyde, NC et Si) et la figure 2-5 donne le diagramme de bandes d'énergie du nanocontact lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint. Les discontinuités de bandes contrôlent à la fois le type de porteurs de charges impliqués et l'amplitude du courant. La plupart des données qui nous ont permis de calculer les différents paramètres mentionnés sur la figure 2-5 ont été extraits des références [Mathieu'04, Geis'91, Niquet'00]. Les affinités électroniques du Si et du diamant sont respectivement 4.05 et 2.7 eV et leurs bandes interdites sont 1.12 et 5.45 eV. Le niveau de Fermi du substrat de silicium dopé n (~5×10^{18} cm^{-3} et ~5×10^{18} cm^{-3}) est très proche de sa bande de conduction (< 50 meV), alors que le niveau de Fermi de la pointe diamant dopé p est très proche de la bande de valence à cause de la très faible densité intrinsèque du diamant et de la très faible résistivité de la pointe AFM (résistivité de l'ordre de 0.003 – 0.005 Ω×cm). Dans cette situation, le travail de sortie de la pointe AFM est bien

plus grand que celui du substrat de silicium et du Ge. Tenant compte du fait que les affinités du Si et du Ge sont plus grandes que celle du diamant, avec une différence entre les affinités plus faible que la différence des largeurs de bandes interdites, ceci empêche les électrons de se mouvoir à travers le nano-contact. Par contre la courbure des bandes de valence du contact nanocristal-pointe favorise le passage des trous. Par conséquent, la conduction électrique à travers le système et le processus de piégeage dans les nanocristaux sont essentiellement gouvernés par les trous. Etant donné que durant les expériences de nano-EBIC, le courant induit est dû aux porteurs minoritaires (ici les trous), il n'y a pas de piégeage d'électrons dans les NCs, à cause de la courbure vers le haut de la bande de conduction du Si et de la large hauteur de barrière au niveau des bandes de conduction. Finalement, les trous sont impliqués à la fois dans les processus du transport et de piégeage.

2- Obtention de la longueur de diffusion

a- Profil type du courant induit

Comme nous l'avons montré dans le premier chapitre (dans la présentation du système AFM-MEB) traitant du principe de mesure de la longueur de diffusion, La longueur effective de diffusion est extraite à partir de la modélisation du profil du courant induit. Ce dernier est collecté à la surface de l'échantillon par la pointe conductrice de l'AFM lorsque le faisceau d'électrons décrit une ligne perpendiculaire à l'axe du microlevier et très proche de la pointe. Nous rappelons que pour la mesure du profil du courant induit, la pointe et l'échantillon restent immobiles.

Un profil typique de courant induit, obtenu sur l'échantillon NC_{70} sous une énergie primaire de 7 keV et un courant de sonde de 2.15 nA, est présenté à la figure 2-6. Le balayage en ligne du faisceau se fait de la gauche vers la droite, et la partie centrale correspondant au maximum du courant collecté désigne la position de la pointe AFM. On constate que la courbe est relativement symétrique de part et d'autre du maximum tant que l'énergie primaire n'est pas trop élevée (Cf paragraphe suivant). Pour un échantillon donné, le profil du courant induit dépend bien évidemment des caractéristiques de l'échantillon étudié et aussi du courant primaire (énergie, courant). Un point important dans cette étude est qu'aucune polarisation n'est appliquée à l'échantillon, seul le champ interne dû aux courbures de bandes gère la séparation des paires électrons-trous et contrôle le processus de conduction.

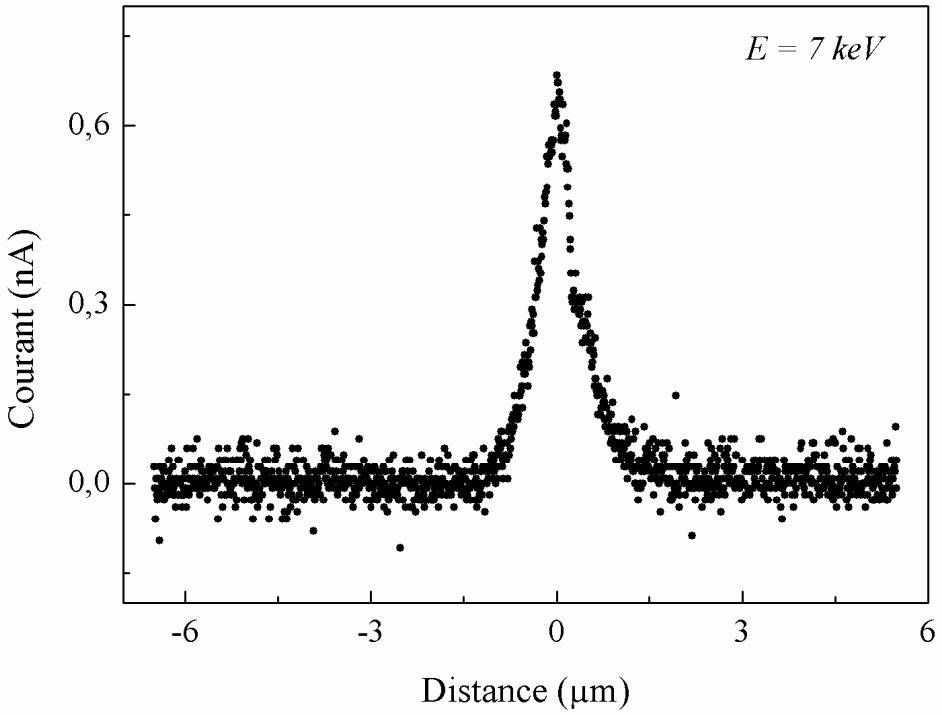


Figure 2-6: Profil du courant induit collecté pour l'échantillon NC_{70}.

b- Effet de l'énergie primaire sur le profil du courant induit

Nous avons étudié l'effet de l'énergie primaire sur l'évolution du profil du courant induit. Ces mesures ont été réalisées sur deux échantillons contenant sur leur surface des nanocristaux non recouverts de Ge : NC_{50} et NC_{70}. L'énergie du faisceau électronique variant de 5 keV à 17 keV et pour cet intervalle d'énergie, le courant primaire varie de 1.5 nA à 4 nA. Les figures 2-7 a et b montrent les profils du courant induit en fonction de l'énergie primaire pour les échantillons NC_{50} et NC_{70}, respectivement.

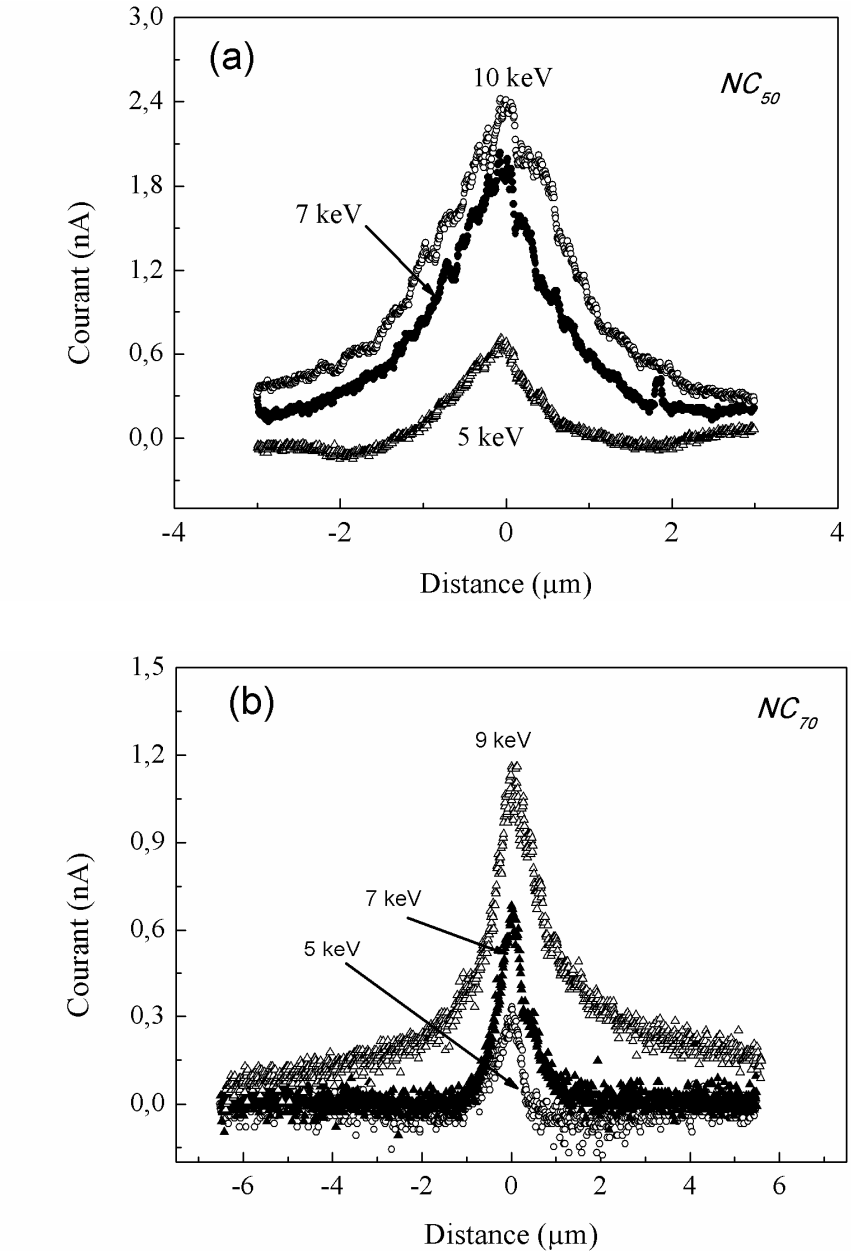


Figure 2-7: Effet de l'énergie du faisceau sur le profil du courant induit obtenu sur l'échantillon : (a) NC_{50}, (b) NC_{70}.

Pour les deux échantillons, le profil du courant induit augmente en intensité et s'élargi lorsque l'énergie primaire augmente, puis ce profil s'atténue sensiblement en intensité et présente un léger rétrécissement pour les énergies élevées (voir figure 2-8).

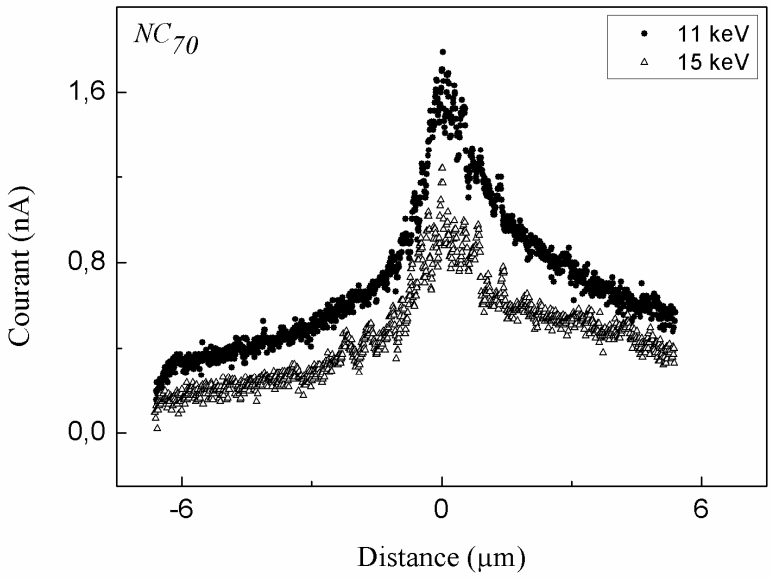


Figure 2-8 : Effet des valeurs élevées de l'énergie sur le profil du courant induit pour NC_{70}.

Remarquons que le profil du courant induit présente par moments une légère dissymétrie pour les énergies primaires élevées. Lorsque la sonde électronique s'éloigne de la pointe AFM, le courant chute mais pas dans les mêmes proportions que lors de la montée. Cette dissymétrie a déjà été observée dans le cas du GaAs [Smaali'08], mais elle était plus forte que dans notre cas, puisque le courant gardait une valeur relativement constante. Ce phénomène, connu dans les semiconducteurs composés (InP, GaAs,…), a été lié à la contribution du photocourant résultant du processus de réabsorption des recombinaisons radiatives [Guermazi'96, Guermazi'01, Smaali'08]. En effet, lors d'une recombinaison radiative bande à bande, les photons générés peuvent être absorbés créant ainsi de nouvelles paires électron – trou si leur énergie reste suffisante. Ces charges créées participent à leur tour au courant induit. Peut-on considérer ce phénomène de recombinaison dans notre cas ? Il nous semble que non. Car d'abord nous pensons que ce phénomène dû aux recombinaisons radiatives n'a pas lieu d'être puisque nous utilisons un substrat de Si (semiconducteur à gap indirect). Ce phénomène pourrait être lié au fait qu'à haute énergie, le volume d'interaction est tellement grand que le courant collecté sature à cause de l'accumulation de charge dans les

NCs du NC_{70}. Signalons par ailleurs, que ce phénomène n'a pas été observé dans l'échantillon NC_{50}.

La figure 2-9 montre l'évolution du maximum du courant induit (valeur du courant correspondant à la position de la pointe AFM) obtenu dans l'échantillon NC_{70} en fonction de l'énergie. Le courant maximum augmente puis décroît après être passé par un maximum pour une énergie primaire de 12 keV. Ce comportement a été largement mis en évidence dans la littérature est d'ailleurs utilisé pour déterminer la longueur de diffusion en comparant cette évolution avec celle prévue par des modèles adaptés au cas d'une électrode de collection plane semi-infini dans le cas d'un contact Schottky [Wu'78, Chi'79, Yakimov'08]. L'utilisation de tels modèles nécessitent de faire un certain nombre d'hypothèses, notamment sur la vitesse de recombinaison, la largeur de la zone de charge d'espace, etc.

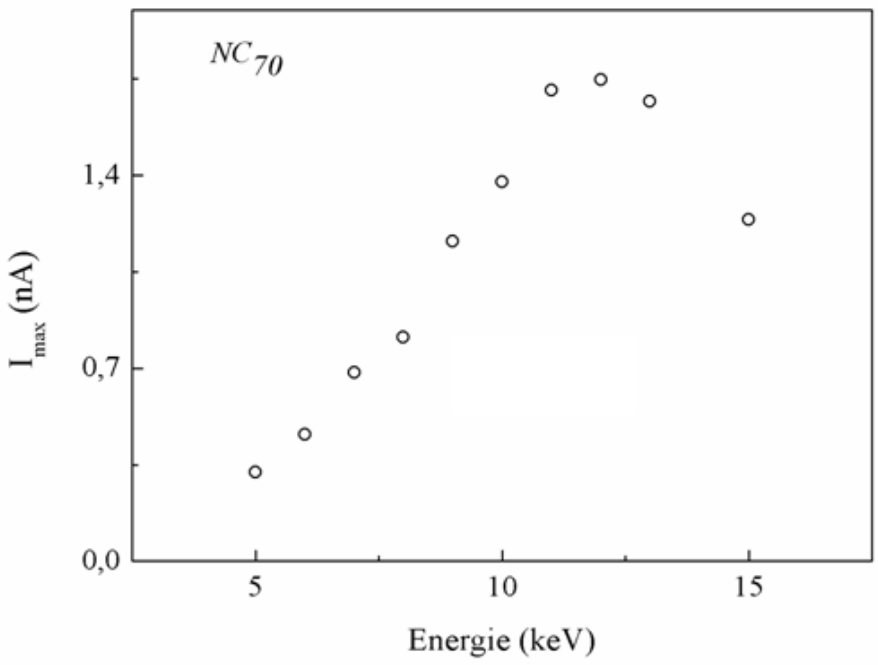


Figure 2-9: Evolution du maximum du courant induit en fonction de l'énergie des électrons primaires pour l'échantillon NC_{70}.

Pour les faibles énergies, l'augmentation du courant maximum collecté quand l'énergie augmente s'explique par l'augmentation et l'élargissement du volume d'interaction qui s'accompagne d'une augmentation du nombre de paires électrons – trous générées. L'augmentation de l'énergie incidente s'accompagne également d'une augmentation de la profondeur de pénétration et donc, pour une certaine valeur de l'énergie, certains porteurs se recombinent avant d'atteindre le contact car devant effectuer un parcours supérieur à la longueur de diffusion. Il en résulte une diminution du courant collecté. D'un autre côté, il faudra tenir compte de l'effet de la taille du contact sur cette évolution du profil du courant induit. En effet, pour ce qui nous concerne, nous utilisons un nano-contact (déjà décrit dans le chapitre précédent) et de ce fait, l'éloignement du centre de génération du nano-contact et la distribution aléatoire des dits porteurs font que l'efficacité de collecte se trouve atténuée.

c- Efficacité de collecte

L'efficacité de collecte est définie par :

$$\eta = \frac{G_{\exp}}{G_{th}} \tag{2-1}$$

avec $G_{th} = \frac{E(1-f)}{E_i}$ et $G_{\exp} = \frac{I_{EBIC}}{I}$

où *f* est le facteur de rétrodiffusion.

Dans cette étude, nous avons déterminé l'efficacité de collecte η par l'expression suivante [Yakimov'07] afin de mettre en exergue son évolution en fonction de l'énergie primaire :

$$\eta = \frac{I_{EBIC}.E_i}{I.E.\lambda} \tag{2-2}$$

Où I_{EBIC} est le maximum du courant induit, E_i est l'énergie moyenne nécessaire à la création d'une paire électron-trou (dans le cas du Si, E_i ~ 3,6 eV), E est l'énergie primaire, I est le courant primaire et λ est la fraction de l'énergie primaire absorbée par l'échantillon bombardé (pour Si λ ~ 0,9).

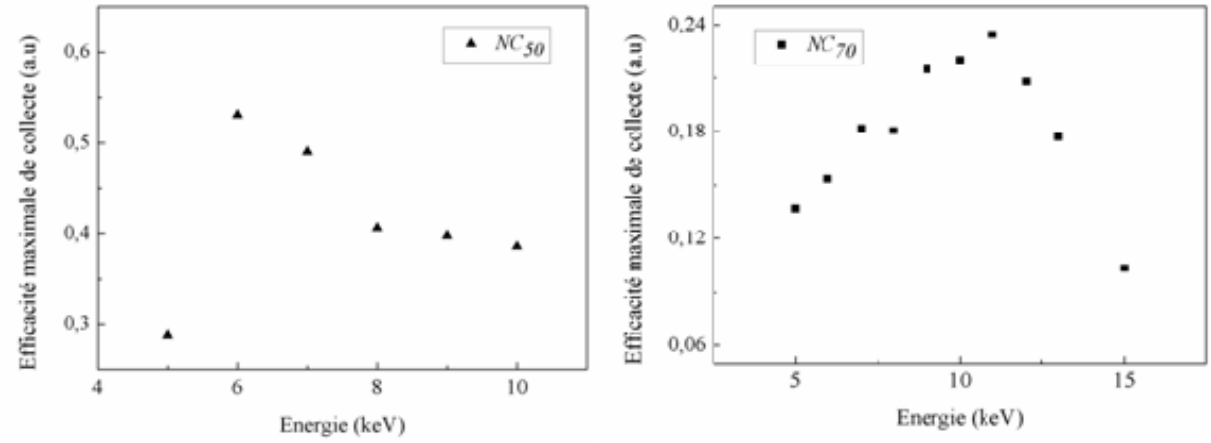


Figure 2-10 : Evolution du maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour les deux échantillons étudiés (NC_{50} et NC_{70}).

La figure 2-10 présente la variation du maximum d'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour les deux échantillons étudiés. De prime abord, ce résultat, obtenu dans le cas d'un nano-contact, est similaire à des résultats obtenus par la technique EBIC classique [Yakimov'07, Maurice'93, Wu'78, Leamy'82, Grümbaum'95, Ballutaud'02, Yakimov'08], bien que la configuration de notre dispositif expérimental soit différente. Sur la base des données rapportées dans ces références, il semblerait que l'évolution de η telle qu'elle est représentée dans la figure 2-10, serait affectée par la présence d'une faible longueur de diffusion en volume et/ou par une vitesse de recombinaison en surface élevée [Maurice'93, Wu'78, Leamy'82, Ballutaud'02]. A priori, la longueur de diffusion que nous allons déterminer serait donc faible. Cependant, du fait que la configuration de notre technique de mesure, par nano-contact, est très différente de celles qui ont permis de donner des expressions analytiques de l'efficacité de collecte en fonction des paramètres cités ci-dessus (longueur de diffusion, vitesse de recombinaison en surface, dopage,…), nous ne pouvons procéder de même. Nous allons donc choisir, parmi les modèles donnés dans la littérature, l'expression analytique qui permet d'extraire la longueur de diffusion effective qui dépend de la vitesse de recombinaison en surface et qui n'est pas égale à la vraie longueur de diffusion, c'est-à-dire celle des porteurs diffusant dans le volume.

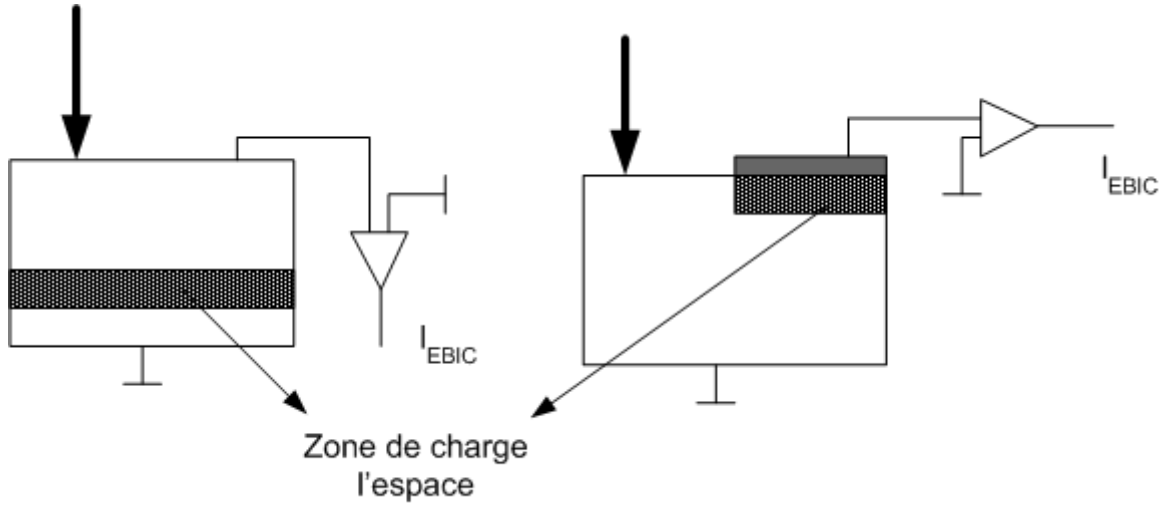
d- Modèles permettant l'extraction de la longueur de diffusion effective

La longueur de diffusion effective (L_{eff}) s'obtient par ajustement du profil de courant induit expérimental avec celui donné par des modèles théoriques. Les modèles proposés dans la littérature sont basés sur la résolution de l'équation de diffusion en fonction des conditions expérimentales et conditions aux limites. Nous allons tester les différentes expressions analytiques et choisir celle qui ajuste au mieux nos mesures expérimentales bien que nous utilisions un nano-contact et que notre configuration nécessite probablement une analyse bi-dimensionnelle qui doit tenir compte de la position du point d'impact du faisceau par rapport à celle de la pointe AFM.

Nous présentons les deux configurations utilisées en EBIC classique et les modèles utilisés pour l'extraction de la longueur de diffusion :

- *Configuration perpendiculaire*

Dans cette configuration, le faisceau électronique bombarde perpendiculairement la surface de l'échantillon, et la jonction se trouvant parallèle avec la surface comme dans la figure 2-11.



Jonction p-n *jonction Schottky*

Figure 2-11 : Illustration de la configuration perpendiculaire en EBIC classique dans le cas d'une jonction p-n et d'une jonction Schottky.

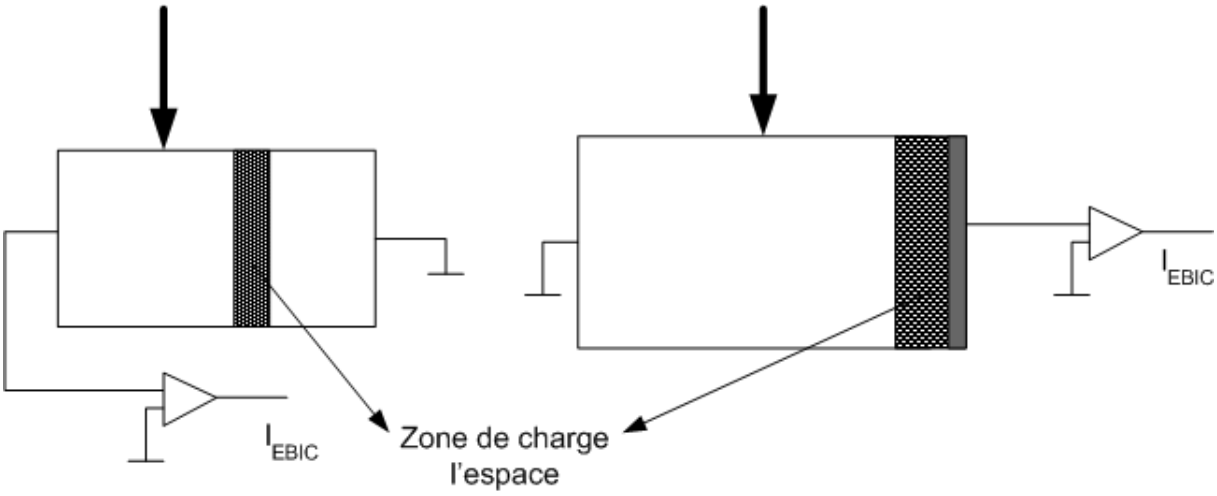
Dans ce cas, l'expression analytique du courant induit proposée dans la littérature est la suivante [Wu'02, Chernyak'01, Cavalcoli'91, Daniel'95] :

$$I_{EBIC} = I_{max} x^m e^{-x/L_{eff}} \quad (2\text{-}3)$$

où *m* est un coefficient de correction représentant l'écartement ou la déviation des profils du courant induit de l'expression exponentielle simple. Ce coefficient semble dépendre à la fois de la vitesse de recombinaison en surface [Ioannou'82, Kurniawan'06] (avec une vitesse de recombinaison nulle *m* =- 0.5, et dans le cas d'une vitesse infinie *m* = -1.5). *x* est la distance entre le faiscau et le contact.

- *Configuration parallèle*

La figure 2-12 illustre la configuration parallèle. Le faisceau électronique arrive parallèlement à la jonction.



Jonction p-n *jonction Schottky*

Figure 2-12: Illustration d'une configuration parallèle.

Les modèles de courant induit donnés dans la littérature sont les suivants :

$$I_{EBIC} = I_{max} e^{-x/L_{eff}} \quad \text{[Daniel'01, Miyajima'98, Leamy'82]} \tag{2-4}$$

$$I_{EBIC} = I_{max} e^{-\left(x/L_{eff}\right)^2} \quad \text{[Guermazi'96, '00,'01]} \tag{2-5}$$

$$I_{EBIC} = I_{max} \left(L_{eff}/x\right)^m e^{-x/L_{eff}} \quad \text{[Zhu'03]} \tag{2-6}$$

Rappelons que l'exposant *m* dépend de la vitesse de recombinaison en surface et de l'énergie primaire [Zhu'03].

- *Obtention de la longueur effective de diffusion dans le cadre du nano-EBIC*

Les expressions citées ci-dessus, ont été utilisées pour ajuster les profils expérimentaux que nous avons obtenus pour les deux échantillons étudiés. Les résultats de ces ajustements sont donnés à la figure 2-13. Nous avons ajouté aux modèles un courant constant I_0, qui tient compte du bruit de fond. On peut remarquer que l'accord entre les courbes théoriques et la courbe expérimentale est particulièrement mauvais pour les modèles $e^{-\left(x/L_{eff}\right)^2}$ et $\left(L_{eff}/x\right)^m . e^{-x/L_{eff}}$. Par contre, la formule $e^{-x/L_{eff}} + I_0$ (courbe jaune) est plus proche de la courbe expérimentale.

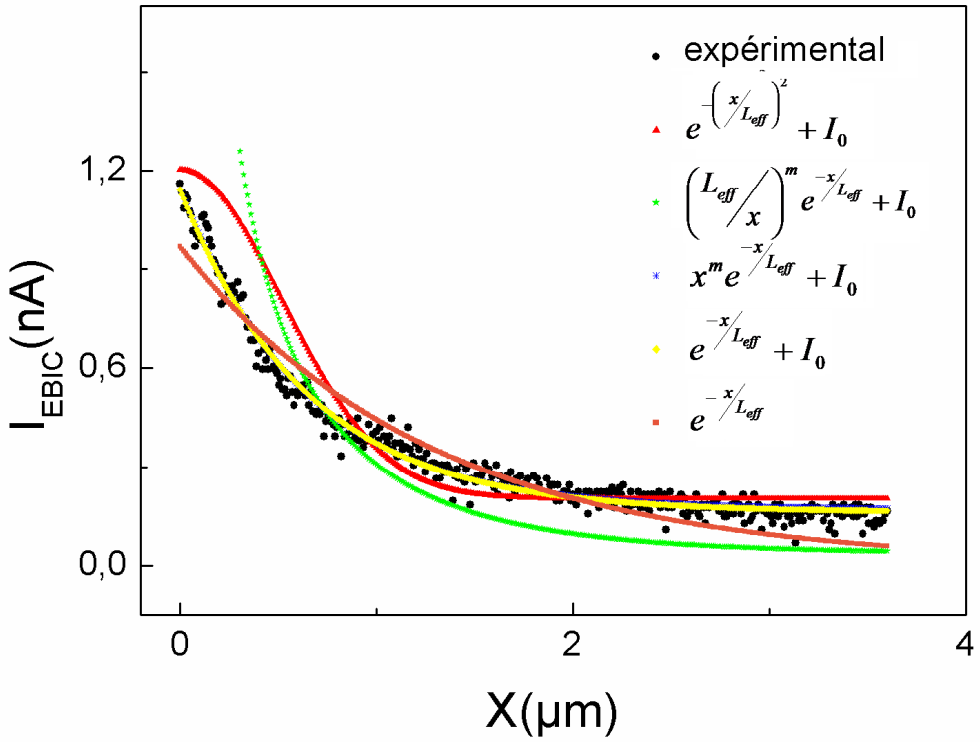


Figure 2-13: Données types montrant l'ajustement des points expérimentaux par des modèles analytiques donnés dans la littérature.

D'ailleurs, cette dernière expression semble être la mieux adaptée à nos mesures quelle que soit l'énergie primaire utilisée. C'est pourquoi, dans ce qui suit, nous donnerons des longueurs de diffusion extraites de nos résultats par l'application de ce modèle. La figure 2-14 confirme notre choix. Celle-ci illustre l'ajustement de profils de courant induit pour les deux échantillons.

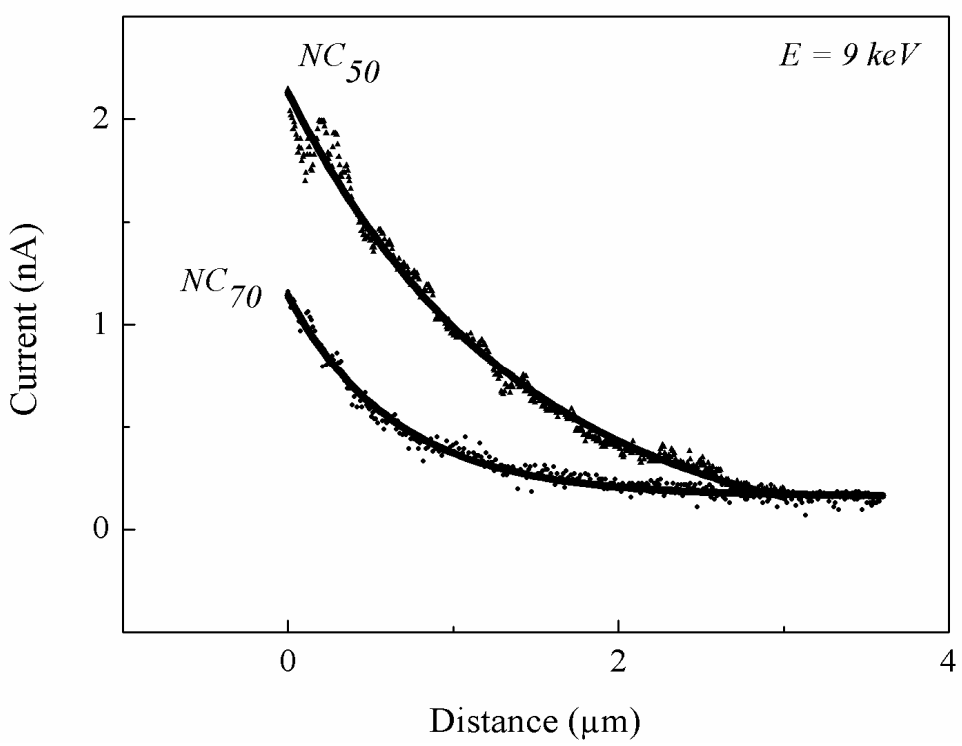


Figure 2-14 : Illustration de l'ajustement des profils du courant induit par le modèle choisi pour les deux échantillons NC_{50} et NC_{70}.

La longueur effective de diffusion sera donc déterminée pour chaque échantillon et sera étudiée en fonction de paramètres tels que l'énergie primaire, la taille et densité des nanocristaux. Il est à signaler qu'à notre connaissance, il n'y a pas dans la littérature d'articles traitant de l'évolution de la longueur de diffusion en fonction de l'énergie à l'exception des références [Jastrzebski'75, Miyajima'98]. Nous comparerons nos résultats avec les leurs à la fin de ce chapitre.

III- Effets de l'énergie primaire et de la taille des nanocristaux sur la variation de la longueur effective de diffusion

1- Effet de l'énergie primaire

L'idée de départ était de chercher comment accéder à la « vraie » longueur de diffusion, c.à.d. à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en volume. La lecture de l'article de Jastrzebski [Jastrzebski'75] montrant que L_{eff} varie avec l'énergie des électrons primaires suivant une loi qui permet de déterminer la longueur de diffusion en volume nous a amené à procéder à cette étude. En effet, l'expression analytique donnée par Jastrzebski *et al.* [Jastrzebski'75] et permettant d'accéder à la longueur réelle de diffusion, est :

$$L_{eff}^2 = L_r^2\left[1-\frac{S}{1+S}\exp\left(-z/L_r\right)\right] \qquad (2\text{-}7)$$

où L_{eff} est la longueur de diffusion effective, L_r la longueur réelle de diffusion, $S = V_S\frac{\tau}{L}$ est la vitesse normalisée de recombinaison en surface, V_S est la vitesse de recombinaison en surface, τ est la durée de vie, L est la longueur de diffusion en volume et z est la profondeur du volume de génération.

A partir de cette relation, et pour des valeurs élevées de S, L_{eff} présenterait une saturation correspondant à la valeur de L_r. Ce que montre la figure suivante :

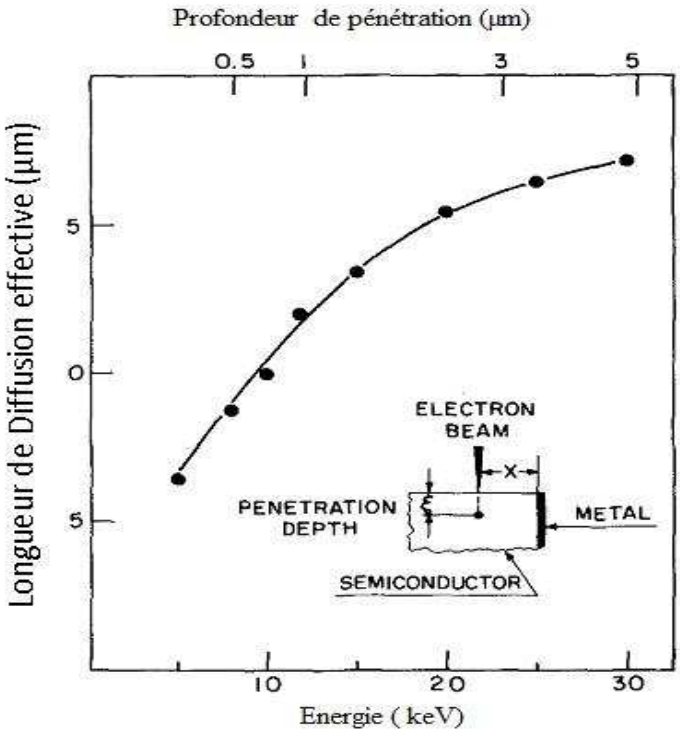


Figure 2-15 : Variation de la longueur effective de diffusion en fonction de l'énergie primaire selon la référence [Jastrzebski'75].

Sur la base de cette étude, nous avons procédé à des mesures réalisées sur les deux échantillons contenant sur leur surface des nanocristaux de Ge, NC_{50} et NC_{70}. L'énergie d'accélération des électrons incidents varie de 5 keV à 20 keV et le courant primaire de 1.5 nA à 4 nA. La variation de la longueur de diffusion est présentée à la figure 2-16 pour les deux échantillons.

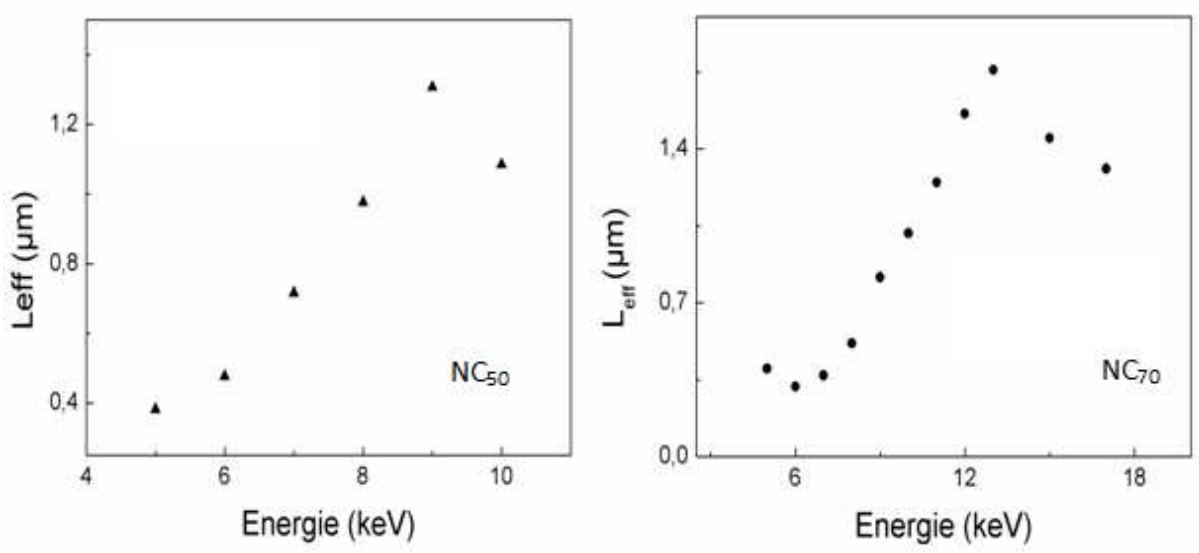


Figure 2-16: Influence de l'énergie du faisceau sur la longueur de diffusion effective.

L'évolution de la longueur de diffusion effective (L_{eff}) en fonction de l'énergie primaire révèle deux effets importants. D'abord L_{eff} augmente avec l'énergie primaire, atteint un maximum, puis diminue. Puis, l'énergie seuil correspondant au maximum de L_{eff} n'est pas la même pour les deux échantillons ; elle est de l'ordre de 9 keV correspondant à $L_{eff\ max}$ = 1.3 µm pour NC_{50}, et ~13 keV correspondant à $L_{eff\ max}$ = 1.7 µm pour NC_{70}.

L'augmentation de L_{eff} à faible énergie est attendue, car la génération de charges se fait près de la surface et l'effet de la vitesse recombinaison à la surface est très important. Au fur et à mesure que l'énergie primaire augmente, l'effet de la vitesse de recombinaison devient moindre, et de ce fait L_{eff} augmente. Pour une certaine valeur d'énergie primaire, L_{eff} entame sa décroissance car le volume de génération est bien loin de la surface de telle sorte que les porteurs se recombinent avant d'atteindre le nano-contact. Remarquons que nos résultats ne sont pas tout à fait similaires aux rares résultats trouvés dans la littérature [Jastrzebski'75, Miyajima'98]. Peut-être parce que le maximum dépendrait de la taille du contact et que de ce fait il apparaîtrait à des énergies beaucoup plus élevées pour des contacts macroscopiques. Une comparaison approfondie sur ce point sera donnée à la fin de ce chapitre.

Par ailleurs, le maximum de L_{eff} apparaît à deux énergies différentes pour les deux échantillons étudiés. Ce dernier phénomène est évidemment directement lié à la taille des nanocristaux que nous expliciterons au paragraphe suivant. Nous verrons aussi que la valeur

elle-même de la longueur de diffusion effective pourrait être affectée par la taille des nanocristaux en surface de l'échantillon étudié.

2- Effet de la taille des nanocristaux de Ge

Le fait que la mesure du profil du courant induit se fait dans notre cas très localement par l'intermédiaire de la pointe conductrice d'un AFM, et que par conséquent cette mesure se trouve dépendante de la zone de déplétion locale formée sous le nano-contact, il nous a semblé utile d'étudier l'effet de la taille des nanocristaux sur cette mesure. L'évolution de la longueur de diffusion effective pour les deux échantillons est présentée à la figure 2-17.

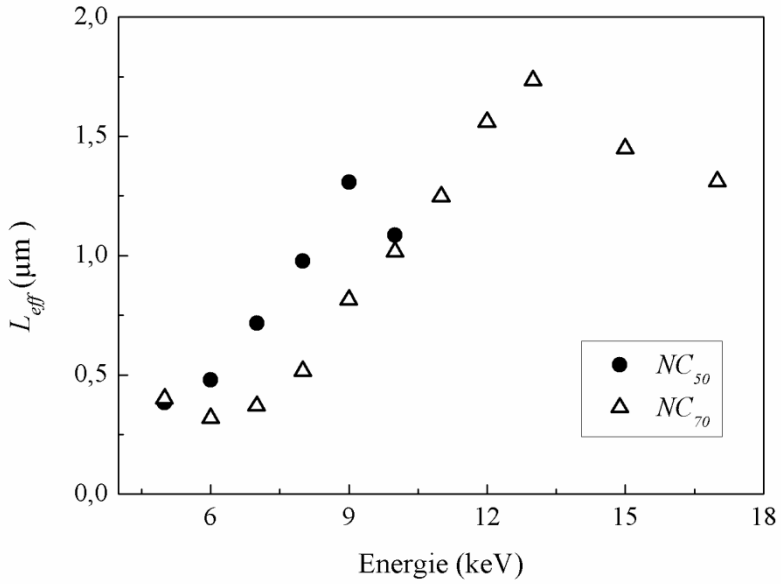


Figure 2-17 : Variation de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire pour les deux échantillons NC_{50} et NC_{70}.

On peut remarquer dans cette figure que la taille des nanocristaux affecte la valeur de L_{eff}. Pour des énergies inférieures à ~ 10 keV, L_{eff} pour l'échantillon NC_{50} est plus grande que celle de l'échantillon NC_{70}. Ceci peut être expliqué par la différence de la vitesse de recombinaison en surface en raison de l'efficacité de piégeage des nanocristaux. En effet, des nanocristaux de petite taille piègent moins de charges que ceux ayant une grande taille

[Park'03, El Hdiy'08, Gacem'10] et de ce fait, les charges ont plus de chance de parcourir de grandes distances avant leur collecte dans le cas de NCs de petite taille. Cela signifie que la vitesse de recombinaison en surface est plus petite pour des nanocristaux de petite taille. En plus, dans le cas de l'échantillon NC_{50}, à une distance donnée séparant la pointe AFM du faisceau, un fort courant est collecté par la pointe AFM donnant un profil plus large que dans le cas de l'échantillon NC_{70}. En d'autres termes, dans cette situation, nous nous attendons à déterminer des longueurs de diffusion effectives plus grandes pour NC_{50} que pour NC_{70}. Pour plus de clarté, nous avons comparé dans la figure 2-18, des profils des deux échantillons obtenus à une énergie d'accélération de 7 keV.

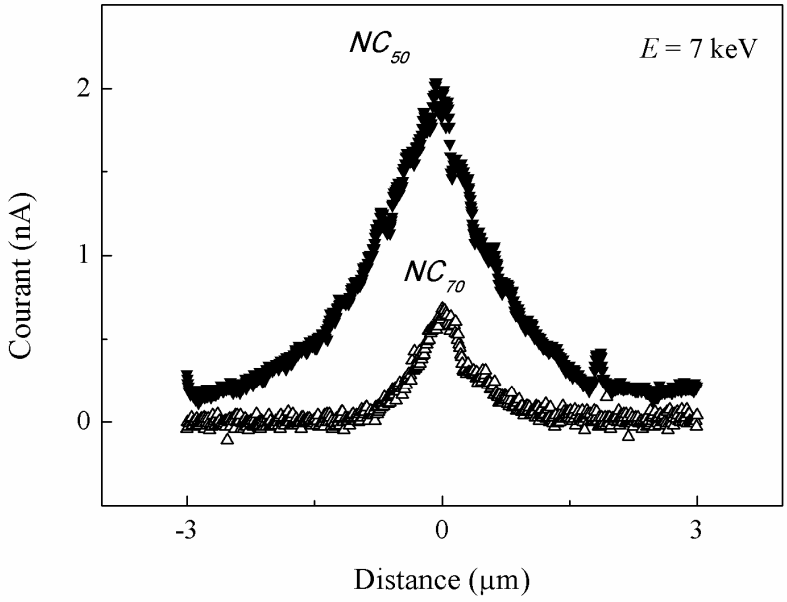


Figure 2-18: Comparaison de profils EBIC obtenus à 7 keV sur les deux échantillons NC_{50} et NC_{70}.

Cette figure montre que la valeur maximale du profil du courant EBIC pour l'échantillon NC_{70} est plus petite que celle correspondant à l'échantillon NC_{50}. De plus le profil EBIC de l'échantillon NC_{70} est moins large que celui de l'échantillon NC_{50}, avec pour conséquence une longueur de diffusion effective moins grande. Le fait que l'intensité maximale est plus petite pour l'échantillon NC_{70} souligne le rôle que jouent les nanocristaux

sur les effets de recombinaison en surface et donc sur la variation de la longueur effective de diffusion des porteurs générés.

Nous avons constaté dans la figure 2-14 que le maximum de L_{eff} est obtenu à deux énergies différentes. Dans le cas de l'échantillon NC_{70}, le maximum de L_{eff} est obtenu à une énergie relativement élevée par rapport à celle de l'échantillon NC_{50}. Ceci peut être expliqué par l'effet de la taille de la zone de déplétion formée sous le contact (voire sous le nanocristal), qui est plus grande dans le cas de nanocristaux de grande taille. En effet, on peut s'attendre à avoir une grande zone de déplétion dans le cas de l'échantillon NC_{70} que dans le cas de NC_{50}.

On peut se poser la question sur le rôle que pourrait jouer la densité de ces nanocristaux sur la valeur et l'évolution de la longueur effective de diffusion. Effectivement, on peut penser que la densité pourrait affecter L_{eff}, mais nous constatons que pour les échantillons étudiés, la proportion en surface occupée par les nanocristaux est à peu près la même et elle est de l'ordre de 27 à 29 %, et que par conséquent, nous pensons que le rôle de l'effet de la densité, s'il existe, est négligeable.

3- Comparaison avec certaines données de la littérature

Comme nous l'avons indiqué avant, il existe à notre connaissance peu de données montrant l'évolution de la longueur effective de diffusion en fonction de l'énergie des électrons primaires. Les seuls papiers ayant étudié ce phénomène sont ceux de Jastrzebski *et al*. et de Miyajima *et al.* [Jastrzebski'75, Miyajima'98]. Les premiers ont effectué la mesure sur un échantillon de GaAs avec un contact semi-infini vertical, et leurs résultats sont présentés à la figure 2-15. Ils ont montré expérimentalement par l'utilisation de la technique classique et dans le cas de la configuration parallèle (l'électrode de contact est parallèle à l'axe du faisceau électronique), que la mesure de la longueur effective de diffusion augmente avec l'énergie et semble atteindre une valeur constante définie comme étant la longueur de diffusion en volume (voir figure 2.15). Ces auteurs expliquent que l'augmentation de L_{eff} avec l'énergie primaire reflète la diminution de l'influence des effets de recombinaison en surface lorsque la profondeur de pénétration augmente [Jastrzebski'75].

Quant à Miyajima *et al.*, dans un travail réalisé sur une jonction p-n de GaN, ils ont aussi montré dans le cas d'un contact semi-infini dans la configuration perpendiculaire (l'électrode de contact se trouve perpendiculaire au faisceau électronique), que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires augmente constamment avec l'énergie primaire dans l'intervalle [5 keV, 30 keV] en considérant la valeur mesurée à 30 keV comme longueur de diffusion en volume sans aucune justification (voir figure 2-19).

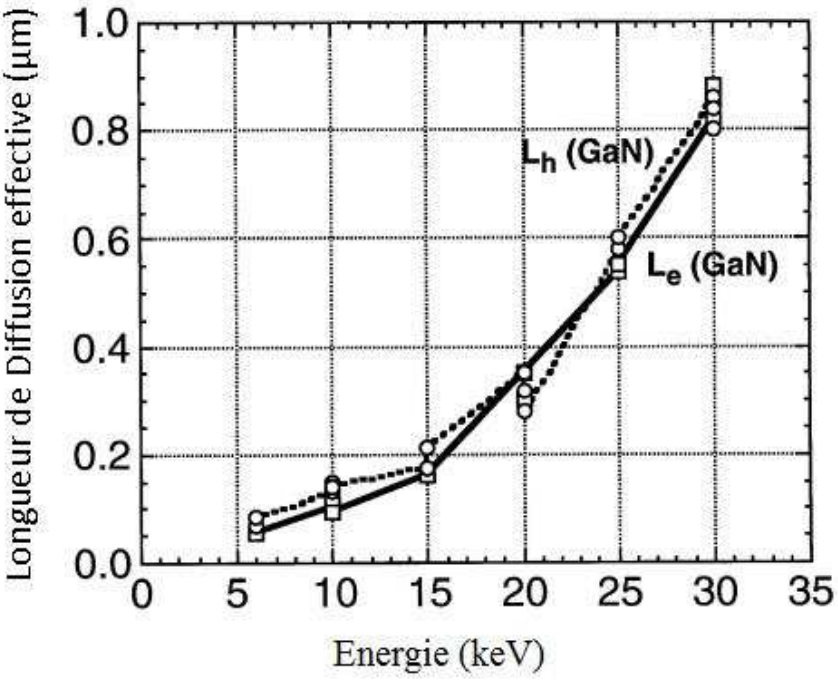


Figure 2-19: Variation de la longueur effective de diffusion pour les électrons et les trous selon la référence [Miyajima'98].

Nos résultats ne sont pas en accord avec ces deux études. En effet, nous avons montré que L_{eff} augmente avec l'énergie d'accélération des électrons, puis diminue ensuite à une certaine valeur.

Deux hypothèses peuvent être avancées pour expliquer cette différence :

- La dimension de la taille du contact pourrait avoir un effet. En effet les deux mesures citées ont été faites par l'intermédiaire d'un contact macroscopique.

Un petit contact implique une zone de déplétion étroite et donc une efficacité de collecte moindre.

- ou bien les auteurs cités ci-dessus n'ont pas fait leur mesure à des énergies suffisamment élevées pour mettre en évidence l'apparition éventuelle d'un passage de *Leff* par un maximum.

Pour bien comprendre ce qui se passe dans notre cas, il nous faudrait procéder soit à une étude théorique aboutissant à la résolution des équations de continuité, ou bien procéder à une étude de simulation simplifiée pour acquérir un début de compréhension du phénomène. Il nous a semblé que la moins difficile des deux est la simulation, car une résolution des équations de continuité nécessite l'expression mathématique des conditions aux limites, et surtout de faire des hypothèses sur un certain nombre de paramètres inconnus (distribution du champ au tour et sous le nano-contact, vitesse de recombinaison en surface,…etc). C'est pourquoi, dans le chapitre qui suit, nous donnerons les procédures détaillées et suivies pour l'analyse du profil du courant EBIC collecté par un nano-contact, ainsi que l'extraction de la longueur de diffusion effective suivant les hypothèses introduites dans l'algorithme de calcul.

IV- Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés essentiellement à la mesure de la longueur de diffusion effective sur des échantillons contenant en leur surface des nanocristaux. Après avoir donné une description succincte des échantillons utilisés, des résultats nano-EBIC ont été présentés soit sous forme d'images ou de profils. Pour extraire la longueur de diffusion, il fallait d'abord et avant tout donner le type de porteurs responsables du courant EBIC. Nous devions le faire à cause de la nature du nano-contact établi entre la pointe et la surface de l'échantillon étudié. La présentation d'un diagramme énergétique a permis de mieux cerner la nature des porteurs mis en cause dans le processus de collecte. Par la suite, des modèles analytiques servant à ajuster les points expérimentaux des profils nano-EBIC pour la détermination de la longueur effective de diffusion ont été présentés bien que ces modèles aient été utilisés dans le cas de l'EBIC standard. Le choix a été fixé sur le modèle ajustant au mieux nos mesures.

Une fois la longueur de diffusion effective déterminée, nous avons montré l'influence de l'énergie primaire et la taille des nanocristaux sur la longueur de diffusion effective. Pour ce qui concerne l'effet de l'énergie primaire, nous avons montré que L_{eff} augmente, passe par un maximum, puis diminue contrairement à certaines études antérieures décrites au dernier paragraphe. La taille (ou diamètre moyen) des nanocristaux a aussi son effet sur la longueur effective de diffusion. En effet, nous avons vu que L_{eff} est plus petite pour des nanocristaux de grande taille dans la partie ascendante de la courbe (domaine des faibles énergies) et nous avons expliqué que ce phénomène est lié au processus de piégeage ; un fort piégeage correspond à une grande vitesse de recombinaison de surface et donc conduit à une L_{eff} plus petite.

Nous avons également constaté que les maximums de L_{eff} sont différents. Pour NC_{70}, le maximum est atteint vers 13 keV indiquant que la collecte des porteurs est toujours efficace contrairement à l'échantillon NC_{50} pour lequel le maximum est atteint pour 9 keV. Cet effet est lié à la dimension plus importante de la zone de déplétion des nanocristaux de plus grande dimension ; nous verrons au chapitre 3 que la simulation numérique vérifie ce point.

Comme nous l'avons signalé, il s'avère que seuls 2 articles (à notre connaissance) l'un datant de 1975 et l'autre de 1998 traitent de l'évolution de L_{eff} avec l'énergie des électrons incidents. Seul notre résultat expérimental met en évidence que L_{eff} décroît au-delà d'un certain seuil d'énergie incidente. Nous allons voir dans le chapitre suivant que la simulation numérique confirme notre résultat expérimental.

Bibliographie

[Artz'85] B. E. Artz., J. Appl. Phys. 57, 2886 (1985).

[Ballutaud'02] D. Ballutaud, A. Rivière, M. Rusu, S. Bourdais and A. Slaoui, Thin Sol. Films, 403-404, 549 (2002).

[Berbezier'06] I. Berbezier, A. Karmous, A. Ronda, A. Sgarlata, A. Balzarotti, P. Castrucci, M. Scarselli, and M. De Crescenzi, Appl. Phys. Lett. 89, 063122 (2006).

[Berz'76] F. Berz et H.K. Kuiken, Solid State Electronics, 19 (1976) 437.

[Boersama'84] J. Boersma, J. J. E. Indenkleef and H. K. Kuiken, Journal Engineering Math, 18, 315 (1984).

[Boudjani'95] A. Boudjani, B. Sieber and L. Boudjani., Semicond. Sci. Technol., 10, 1151 (1995).

[Boudjani'05] A. Boudjani., Semicond. Sci. Technol., 20, 175 (2005).

[Brendel'99] R. Brendel and U. Rau., J. Appl. Phys., 85, 3634 (1999).

[Brown'10] G. Brown, V. Faifer, A. Pudov, S. Anikeev, E. Bykov, M. Contreras and J. Wu., Appl. Phys. Lett., 96, 22104 (2010).

[Cavalcoli'91] D. Cavalcoli et al., J. Appl. Phys. 70, 2163 (1991).

[Cavallini'92] A. Cavallini, B. Fraboni and D. Cavalcoli., J. Appl. Phys., 71, 5964 (1992).

[Chan'95] D.S.H. Chan et al. IEEE. Trans. Electron Devices, 42, 963 (1995).

[Chen'08] B. Chen, J. Chen, T. Sekiguchi, A. Kinoshita, H. Matsuhata, H. Yamaguchi, I. Nagai and H. Okumura., J. Mater Sci: Mater Electron (2008).

[Chernyak'96] L. Chernyak, A. Osinsky, H. Temkin, J.W. Yang, Q. Chen and M. Asif Khan., Appl. Phys. Lett. Vol. 69, no. 17, pp. 2531-2533, 1996.

[Chernyak'01] L. Chernyak, A. Osinsky and A. Schulte., Solid. State electron., 45, 1687 (2001).

[Chi'79] J.Y. Chi and H.C. Gatos, J. Appl. Phys. 50, 3433 (1979).

[Daniel'01] S. H. Daniel, V. K. S. Ong et C. H. Jacob, IEEE Transactions On Electron Devices, 48, 332 (2001).

[Daniel'95] S. H. Daniel, V. K. S. Ong and C. H. Jacob, IEEE transactions On Electron Devices, 42, 963 (1995).

[Danilson'06] D.T. Danielson, D.K. Sparacin, J. Michel, L.C. Kimerling, J. Appl. Phys., 100, 83507 (2006).

[Donolato'84] C. Donolato, IEEE Trans. Electron Devices, 31, 21 (1984).

[Donolato'85] C. Donolato, Solid State Electronics, 28 (1985) 1143.

[El Hdiy'08] A. El Hdiy, K. Gacem, M. Troyon, A. Ronda, F. Bassani and I. berbezier, J. Appl. Phys., 104, 063716/1 (2008).

[Gacem'10] K. Gacem, A. El Hdiy, M. Troyon, I. Berbezier and A. Ronda, Nanotechnol., 21, 065706/1 (2010).

[Geis'91] M. W. Geis, J. A. Gregory, and B. B. Pate, IEEE Trans. Electron. Dev., 38, 619 (1991).

[Grümbaum'95] E. Grünbaum, E. Napchan, Z. Barkay, K. Barnham, J. Nelson, C. T. Foxon, J. S. Roberts and D. B. Holt, Semicond. Sci. Technol., 10, 627 (1995).

[Guermazi'96] S. Guermazi, A. Toureille, C. Grill, B. El Jani and N. Lakhoua., Journal of physics III, 6, 481 (1996).

[Guermazi'00] S. Guermazi, A. Toureille, C. Grill, B.E. Jani et N. Lakhoua, Journal of physics III, 9, 43 (2000).

[Guermazi'01] S. Geurmazi, H. Guermazi, Y. Milk, B. E. Jani, C. Grill and A. Toureille, Journal of physics III, 16, 45 (2001).

[Hackett'72] W. H. Hackett., J. Appl. Phys., 43, 1649 (1972).

[Ioannou'79] D. E. Ioannou and S. M. Davidson., J. Phys. D: Appl. Phys., 12, 1339 (1979).

[Ioannou'82] D. E. Ioannou and C. A. Dimitriadis, IEEE Transactions On Electron Devices, 29, 445 (1982).

[Jastrzebski'75] L. Jastrzebski, J. Lagowski and H. C. Gatos., Appl. Phys. Lett., 27, 537 (1975).

[Franc'98] J. Franc, E. Belas, A. L. Toth, Y. M. Ivanov, H. Sitter, P. Moravec and P. Höschl., Semicond. Sci. Technol., 13, 314 (1998).

[Fuyuki'81] T. Fuyuki and H. Matsunami., J. Appl. Phys., 52, 3428 (1981).

[Guermazi'96] S. Guermazi, A. Toureille, C. Grill, B.E. Jani et Lakhoua, J. Phys. III, 6, 481 (1996).

[Guermazi'01] S. Guermazi, H. Guermazi, Y. Mlik, B.E. Jani, C. Grill et A. Toureille, Europ. Phys. J. Appl. Phys. 16, 45 (2001).

[Karmous'06] A. Karmous, I. Berbezier,and A. Ronda, Phys. Rev B., 73, 075323 (2006).

[Kuiken'85] H.K. Kuiken et C.V. Odorp, J. Appl. Phys., 57, 2077(1985).

[Kurniawan'06] O. Kurniawan, V. K. S. Ong., IEEE Trans. Elec. Dev., 53, 2358 (2006).

[Legrand'02] B. Legrand, V. Agache, T. M´ elin,J.P.Nys,V.Senez, D.Stiévenard, J. Appl. Phys., 91, 106 (2002).

[Leamy'82] H.J. Leamy, J. Appl. Phys., 53, R51 (1982).

[Luke'01] K. L. Luke., J. Appl. Phys., 90, 3413 (2001).

[Lu'08] H. Lu, D. Cao, X. Xiu, Z. Xie, R. Zhang, Y. Zheng and Z. Li., Solid State Electronics., 52, 817 (2008).

[Mathieu'04] Henry Mathieu., 5e édition, DUNOD, (2004).

[Matoussi'03] A. Matoussi, T. Boufaden, S. Guermazi, D. Eljani, Y. Mlik and A. Toureille., Phys. Stat. Sol(b)., 240, 160(2003).

[Maurice'93] J.L. Maurice, J. Phys. III, France 3, 603 (1993).

[Miyajima'98] T. Miyajima, M. Ozawa, T. Asatsuma, H. Kawai and M. Ikeda., J. Cryst. Growth., 189/190,768(1998).

[Morita'90] M. Morita, T. Ohmi, E. Hasegawa, M. Kawakami et M. Ohwada, J. Appl. Phys. 68, 1272 (1990).

[Niquet'00] Y. M. Niquet, G. Allan, C. Delerue, and M. Lannoo, Appl. Phys. Lett., 77, 1182(2000).

[Nuryadi'00] R. Nuryadi, Y. Ishikawa, and M. Tabe, Appl. Surf. Sci. 159, 121 (2000).

[Ong'00] V. K. S. Ong and D. Wu, Solid State Electtronics., 44, 1585 (2000).

[Ong'01] V. K. S. Ong and D. Wu., IEEE Trans. Electron. Dev., 48, 332(2001).

[Ono'99] Y. Ono, M. Nagase, M. Tabe, and Y. Takahashi, Jpn. J. Appl. Phys., Part 2 38, L789 (1999).

[Park'03] N-M. Park, S-H. Jeon, H-D. Yang, H. Hwang, S-J. Park, S-H. Choi, Appl. Phys. Lett., 83, 1014 (2003).

[Sayad'09] Y. Sayad, A. Kaminski, D. Blanc, A. Nouiri and M. Lemiti., Superlattices. Micro., 45, 393(2009).

[Scheer'89] R. Scheer, M. Wilheim and H. J. Lewerenz., J. Appl. Phys., 66, 5412(1989).

[Schroder'98] D.K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization, 760 (1998).

[Seidel'77] T. E. Seidel, S. E. Haszko and D. M. Maher., J. Appl. Phys., 48, 5038(1977).

[Smaali'07] K. Smaali, J. Fauré, A. El Hdiy and M. Troyon, Ultramicroscopy, 108, 605 (2008).

[Smaali'08] K. Smaali and M. Troyon., Nanotechnology., 19, 155706(2008).

[Szkutnik'08] P. D. Szkutnik, A. Karmous, F. Bassani, A. Ronda, I. Berbezier, K. Gacem, A. El Hdiy and M. Troyon, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 41, 103 (2008).

[Tirpak'06] O. Lopatiuk-Tirpak, L. Chernyak, F. X. Xiu, J. L. Lui, S. Jang, F. Ren, S. J. Pearton, K. Gartsman, Y. Feldman, A. Osinsky, and P. Chow., J. Appl. Phys., 100, 086101(2006).

[Yakimov'07] E.B. Yakimov, S.S. Borisov and S.I.. Zaitsev, Semicond., 41, 411 (2007).

[Yakimov'08] E.B. Yakimov, P.S. Vergeles, A.Y. Polyakov, N.B. Smirnov, A.V. Govorkov, I.H Lee, C.R. Lee and S.J. Pearton, Appl. Phys. Lett. 92, 042118/1 (2008).

[Y. Chi'78] Jim Y. Chi and Harry C. Gatos, J. Appl. Phys. 50(5), 3433 (1979).

[Wittry'67] D. B. Wittry and D. F. Kyser., J. Appl. Phys., 38, 375 (1967).

[Wu'78] C.J. Wu and D.B. Wittry, J. Appl. Phys., 49, 2827 (1978).

[Zhu'03] S. Q. Zhu, E. I. Rau and F. H. Yang., Semicond. Sci. Technol., Vol. 18, 361(2003).

ANNEXE

Description

Le principe du courant induit par un faisceau d'électrons repose sur un processus de collecte, par une jonction, des porteurs minoritaires en excès créés par l'impact d'un faisceau d'électrons sur un semiconducteur. Un faisceau d'électrons, lors de sa pénétration dans un semiconducteur, perd une partie de son énergie en créant des paires électron-trou par ionisation par impact. En l'absence de champ électrique, les porteurs de charge diffusent sous l'effet du gradient de leur concentration pour parcourir une distance appelée longueur de diffusion L, pendant un temps $\boldsymbol{\tau}$ appelé durée de vie, avant de se recombiner. En présence d'un champ électrique local ou externe (créé par l'application d'une tension de polarisation), les paires générées sont séparées pour donner naissance à un courant.

Dans cette annexe, nous utilisons le cas d'une jonction Schottky. Dans une diode Schottky se trouvant à l'équilibre thermodynamique, une zone de charge d'espace (ou zone de déplétion) est formée du côté semiconducteur. Le courant d'émission du métal vers le semiconducteur est compensé par un courant de diffusion du semiconducteur vers le métal engendré par des électrons de la bande de conduction ayant réussi à franchir la barrière de potentiel créée par la zone de charge d'espace.

La pénétration du faisceau d'électrons dans l'échantillon, crée des paires électrons – trous dans un volume de génération qui peut couvrir une partie ou la totalité de la zone de charge d'espace. Les porteurs créés dans cette zone désertée se séparent sous l'effet du champ électrique interne et sont presque totalement collectés. Sont collectés aussi ceux créés dans la zone neutre du semiconducteur à une distance, égale à la longueur de diffusion, de la zone désertée. Les densités d'électrons Δn et de trous Δp excédentaires sont égales. Ces concentrations excédentaires restent négligeables devant celles des dopants dans l'hypothèse d'un régime de "faible injection". Ainsi, la concentration en porteurs majoritaires n'est pratiquement pas modifiée. Par contre, la concentration en porteurs minoritaires augmente de façon importante. L'excèdent de porteurs minoritaires va alors se propager sous l'effet du champ électrique. En conséquence, le courant qui en résulte est régi par les porteurs minoritaires en excès. Ce courant, détecté par un circuit extérieur module lors du balayage du faisceau, point par point, le balayage de l'écran cathodique du MEB pour former une image.

Selon la façon de positionner la jonction Schottky par rapport à la direction du faisceau d'électrons on distingue deux types de configurations particulières : configuration perpendiculaire ou parallèle au faisceau :

Dans le cas d'une configuration perpendiculaire (voir figure 2-11), l'axe du faisceau électronique est perpendiculaire à la jonction. Cette configuration permet d'imager la répartition des défauts électriquement actifs [Kazumura'77, Chan'96, Boudjani'95, Cremadesa'97, Seidel'77, Lu'08, Chen'08]. Elle permet également d'accéder aux mesures de longueurs de diffusion du matériau [Dimitriadis'81, Cavalcoli'91, Chernyak'01, Wu'78, Brown'10].

Dans le cas d'une configuration parallèle (voir figure 2-12), le faisceau arrive parallèlement à la jonction. Le courant EBIC collecté dépend de l'environnement immédiat du point d'impact du faisceau. Il contient des informations sur la façon dont les porteurs sont générés en ce point et transportés à travers le système. Cette géométrie est utilisée entre autre pour mesurer la longueur de diffusion [Jastrzebski'75, Leamy'82, Guermazi'01, Franc'98, Ong'01, Matoussi'03].

Equations de diffusion

Dans un semiconducteur soumis à un faisceau électronique, les électrons ou trous en excès diffusent dans le matériau jusqu'à ce ils rencontrent un centre de recombinaison où ils se thermalisent. L'évolution de ce régime hors équilibre est décrite par les équations de continuité (ou de diffusion).

En présence d'un champ électrique $\vec{E}$ interne ou généré, le vecteur densité de courant $\vec{J}$ est donné par :

$$\overrightarrow{\mathrm{J_n}} = q\mu_n n\vec{E} + qD_n \overrightarrow{grad(n)} \qquad \text{(A-1)}$$

$$\overrightarrow{J_p} = q\mu_p p\vec{E} - qD_p \overrightarrow{grad(p)} \qquad \text{(A-2)}$$

où μ représente la mobilité des porteurs de charges et D leur coefficient de diffusion, n et p représentent respectivement les densités des électrons et des trous.

Les variations au cours du temps des densités des électrons et des trous sont données respectivement par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{q} div\left(\overrightarrow{J_n}\right) \tag{A-3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{1}{q} div\left(\overrightarrow{J_p}\right) \tag{A-4}$$

G_n et G_p ($cm^{-3}\ s^{-1}$) sont les taux (ou vitesses) de génération des électrons et des trous, respectivement. Et R_n et R_p ($cm^{-3}\ s^{-1}$) sont leurs vitesses effectives de recombinaison.

En régime de « faible injection », et étant donné que les centres qui jouent un rôle important dans le processus de recombinaison introduisent des niveaux d'énergie voisins du milieu de la bande interdite, les taux de recombinaison électron-trou sont donnés par :

$$R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \qquad \text{et} \qquad R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \tag{A-5}$$

Dans le cas d'un régime permanent (stationnaire), et en l'absence de champ électrique les équations de continuité pour un semiconducteur type p et pour un semiconducteur type n sont données respectivement par :

$$D_n div\left(\overrightarrow{grad\left(n\left(\vec{r}\right)\right)}\right) - \frac{\Delta n\left(\vec{r}\right)}{\tau_n} = 0 \tag{A-6}$$

$$D_p div\left(\overrightarrow{grad\left(p\left(\vec{r}\right)\right)}\right) - \frac{\Delta p\left(\vec{r}\right)}{\tau_p} = 0 \tag{A-7}$$

Ces équations d'évolution sont d'une grande importance car elles sont la base de toutes les théories relatives à la technique EBIC [Donolato'85]. Elles permettent notamment d'estimer la longueur de diffusion des porteurs minoritaires et d'identifier les variations de contraste dans les images EBIC.

Néanmoins, la résolution de ces équations nécessite la connaissance des conditions aux limites. Dans le cas de l'EBIC classique, ces équations se réduisent à une dimension du

fait de la géométrie de l'électrode collectrice qui généralement est considérée semi-infinie. Pour ce qui concerne notre technique, le contact a une dimension finie qui peut être de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres, voire moins. Ceci pose le problème de la définition du nombre de coordonnées et des conditions aux limites.

Chapitre 3
Simulation Monte Carlo de la technique nano-EBIC

Symboles 88

Introduction 89

I- Rappel sur l'interaction électron - matière 91

1- Collision élastique 91

2- Collision inélastique 92

II- Simulation de la trajectoire de l'électron incident à l'intérieur de la cible 94

1- Détermination des directions prises par l'électron incident dans le matériau cible 95

2- Distance entre collisions de l'électron primaire à l'intérieur du matériau cible 96

3- Transfert d'énergie de l'électron incident 97

4- Création et diffusion de charges 99

a- Nombre de paires électron-trou créées par collision 99

b- Diffusion de la charge créée 100

5- Mise en œuvre d'un algorithme pour simuler les trajectoires de l'électron incident et des charges générées ainsi que leur collecte 102

a- Simulation de la trajectoire de l'électron incident 102

b- Simulation des trajectoires de la charge créée et de sa collecte 104

III- Test de la simulation de la procédure nano- EBIC 107

1- Influence du numéro atomique du matériau cible 107

2- Influence de l'angle d'inclinaison sur le volume de génération 109

3- Présentation des résultats de la simulation nano-EBIC 109

a- Un nano-contact pour la collecte du courant induit 109

b- Quelques résultats préliminaires sur la simulation du profil de l'efficacité de collecte 111

IV- Conclusion 116

Bibliographie 117

Symboles

θ	Angle de diffusion longitudinale de l'électron incident.
φ	Angle de diffusion azimutale de l'électron incident.
γ	Angle de diffusion longitudinale de la charge générée.
β	Angle de diffusion azimutale de la charge générée.
α	Paramètre d'écrantage de la diffusion.
Z	Numéro atomique.
A	Poids atomique.
E	Energie instantané de l'électron incident.
E0	Energie initiale de l'électron incident.
Ee-h	Energie d'ionisation.
λ_T	Libre parcours moyen de l'électron incident.
Na	Nombre d'Avogadro.
ρ	Densité du matériau.
σ_E	Section efficace élastique totale.
l	Libre parcours moyen de la charge créée.

Introduction

Dans le chapitre 2, nous avons présenté la détermination de la longueur de diffusion effective des porteurs minoritaires générés par l'utilisation de la technique nano-EBIC (ou NF-EBIC : EBIC en champ proche). Bien que nous ayons proposé quelques explications dans le chapitre précédent sur la variation de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire, il nous a semblé que ces explications n'étaient pas tout à fait suffisantes à la compréhension de ce phénomène. Pour bien comprendre l'évolution de la longueur de diffusion en fonction de l'énergie primaire, nous développerons dans ce chapitre un algorithme de simulation Monte-Carlo 3-dimensions. Pour simplifier les étapes de calculs, nous allons, dans notre démarche, ignorer l'effet des nanocristaux, voire leur présence à la surface ainsi que la couche d'oxyde de silicium natif à la surface de l'échantillon étudié. Nous considérerons donc un simple substrat de silicium en contact avec une nano-électrode pour la collecte des porteurs générés sous bombardement électronique. Rappelons que la simulation Monte-Carlo utilise principalement des nombres aléatoires comme moyens de prédiction de l'intensité des différents évènements et aussi comme moyen de sélection entre les différents processus de diffusion [Joy'91, Chakarova'96]. Plusieurs travaux ont été consacrés à la simulation Monte-Carlo [Bishop'76, Love'77, Liljequist'83, Reimer'86, Joy'88, 89&91, Newbury'86, Shimizu'92, Holt'93]. Nous nous en sommes inspirés pour effectuer notre étude par l'utilisation du logiciel Matlab.

Nous commençons ce chapitre par la présentation d'un bref rappel sur les interactions entre un électron énergétique avec un matériau quelconque. Le mouvement d'un électron incident dans un solide et son énergie perdue le long de son déplacement sont évoqués. Par la suite, nous présenterons comment des charges sont créées et comment elles diffusent à l'intérieur du matériau supposé dépourvu de défauts. Notons que la collecte du courant induit est conditionnée par l'état de la surface de l'échantillon bombardé. L'état de la surface peut être caractérisé par la vitesse de recombinaison en surface. A ce titre, nous en avons tenu compte. Dans l'étude de simulation qui sera présentée dans le présent chapitre, nous considérons qu'il n'y a pas de recombinaison en surface. Ceci signifie que la vitesse de recombinaison en surface est infinie. . Celle-ci a évidemment une grande importance et son influence est reportée, ainsi que d'autres paramètres, au chapitre suivant. Donc dans tout ce qui suit, nous maintenons une vitesse de recombinaison en surface infinie.

Dans le dernier paragraphe de ce chapitre, nous donnerons des résultats préliminaires concernat l'influence de l'angle d'inclinaison du faisceau électronique par rapport à la surface de l'échantillon et l'effet de la forme de la zone de déplétion. Pour cela, nous utiliserons deux angles d'inclinaison 60° et 0°, et deux formes de la zone de déplétion : cylindrique et demi-sphérique.

I- Rappel sur l'interaction électron - matière

Dans ce paragraphe, nous rappellons très succinctement les processus résultant d'une interaction entre un électron énergétique et un matériau cible. Ce rappel oriente le lecteur vers notre objectif principal, à savoir la perte d'énergie de l'électron incident et la création puis la diffusion des porteurs créés. Pour une étude détaillée sur ces évènements, voir les références [Bishop'76, Love'77, Liljequist'83, Reimer'86, Joy'88, 89&91, Newbury'86, Shimizu'92, Holt'93, Bentabet'06, Rouabah'09].

Lorsqu'un électron incident pénètre l'échantillon cible, différents processus se produisent donnant naissance à plusieurs évènements quantifiables. En effet, avant que cet électron ne perde complètement son énergie ou émerge de l'échantillon, il subit des centaines voire des milliers d'évènements regroupés globalement dans deux processus : les diffusions élastique et inélastique [Seiler'84]. Les évènements quantifiables traduisant la réponse d'interaction d'un électron incident avec un matériau cible se traduisent généralement par une émission d'électrons secondaires d'énergie faible, d'électrons rétrodiffusés, d'électrons transmis et des photons (rayons X, par exemple). Le lieu de l'ensemble de ces interactions est appelé : volume d'interaction ou "poire" d'interaction (volume de génération) qui dépend principalement de l'énergie incidente et des propriétés physico-chimiques de la cible.

1- Collision élastique

Lors d'une interaction élastique, l'électron primaire interagit avec les atomes du matériau. Il ne perd pas ou peu d'énergie, mais il subit une diffusion élastique, c'est-à-dire que sa direction change sans perte d'énergie. La figure 3-1 montre un processus de collision élastique.

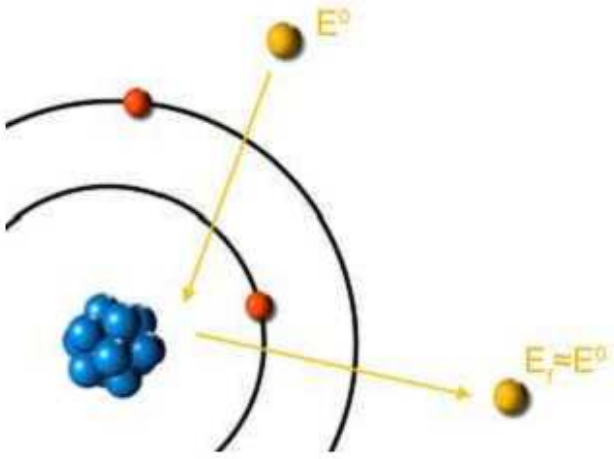


Figure 3-1 : Illustration de l'interaction élastique entre un électron et un atome de la cible.

2- Collision inélastique

L'interaction est inélastique lorsqu'un électron primaire interagit avec les électrons des atomes du matériau. Cette interaction est illustrée à la figure 3-2. L'électron primaire perd progressivement son énergie pour une grande part par transfert aux électrons des orbites atomiques et pour une moindre part par perte radiative lors de l'interaction avec le noyau (le rayonnement de freinage ou Bremsstrahlung). Plus le transfert est important, plus l'angle de diffusion est important.

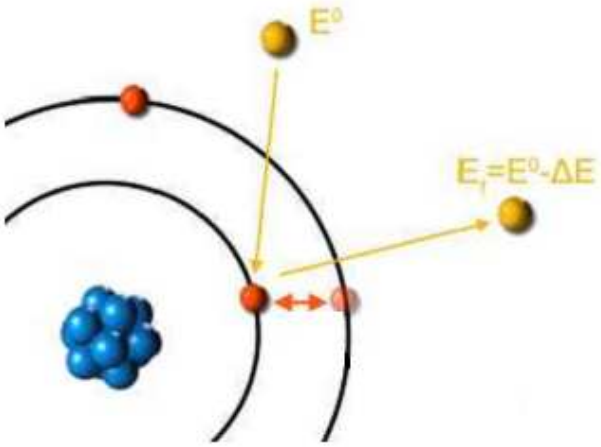


Figure 3-2 : Illustration de l'interaction inélastique entre un électron et le matériau cible.

Cette interaction donne naissance à une grande variété de processus utiles. Il s'agit principalement de l'émission électronique secondaire, de l'émission X, de la cathodoluminescence, des plasmons, des phonons, ainsi que de la création de paires électron - trou.

La figure 3-3 qui suit, illustre les différents mécanismes résultant du processus d'interaction électron – matière.

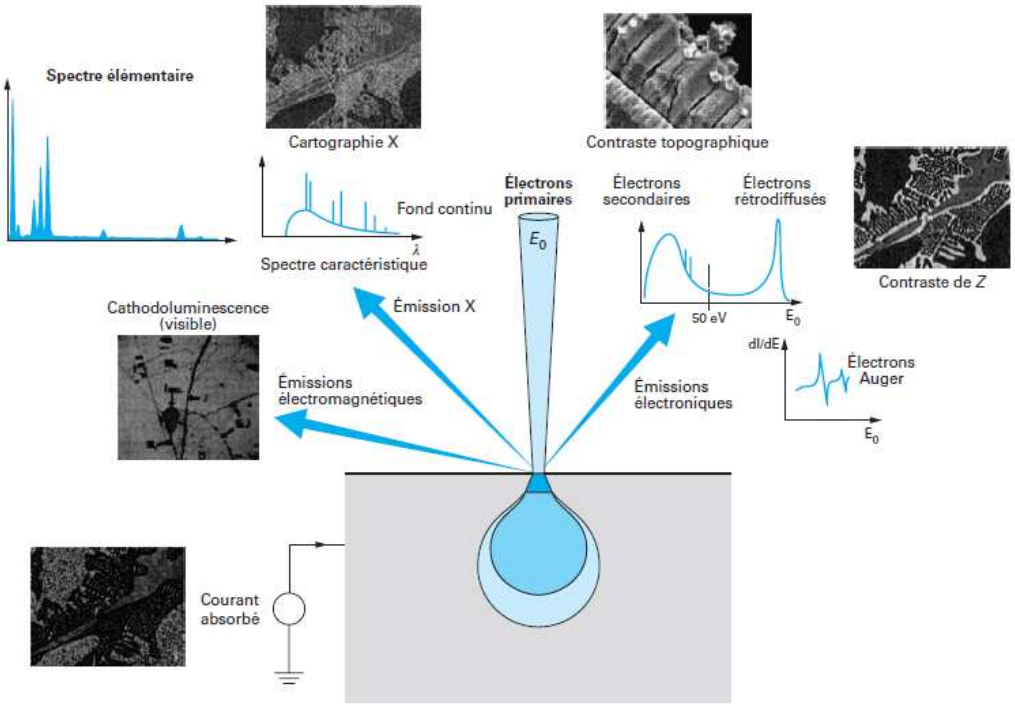


Figure 3-3 : Principales émissions électroniques et électromagnétiques dues aux interactions d'un faisceau d'électrons avec un échantillon cible [Paqueton *et al.*]

II- Simulation de la trajectoire de l'électron incident à l'intérieur de la cible

L'étude de simulation traitant de l'interaction électron – matière est bien connue et bien détaillée dans plusieurs papiers [Berger'64, Bishop'76, Love'77, Newbury'86, Reimer'86, Joy'89, Shimizu'92]. Dans cette étude, nous en définissons la notre en nous aidant des études antérieures en y ajoutant et en détaillant le rôle que pourraient prendre certains paramètres physiques (vitesse de recombinaison en surface, longueur de diffusion, libre parcours moyen, temps de relaxation,…) ou géométriques (taille et forme du contact et de la zone de déplétion sous le contact,…) sur la forme et l'intensité du courant collecté.

Afin de mieux décrire ou de s'approcher des résultats expérimentaux par les calculs de simulation Monte-Carlo, il est nécessaire d'avoir au moins deux informations principales, à savoir : (i) les angles à travers lesquels l'électron est dévié lors de la traversée de l'échantillon, (ii) une estimation de la distance parcourue par l'électron avant de changer une nouvelle fois de direction sous une énergie incidente donnée (car à chaque choc, il perd une partie –qui reste faible- de son énergie). La simulation à laquelle nous procédons ne donnera qu'une « image » approximative des observations expérimentales. D'ailleurs, il faudra tenir compte du fait que la procédure de simulation est faite sur quelques hypothèses simplificatrices. En voilà deux significatives : (i) on suppose que l'on est en présence de diffusions élastiques dans la détermination du pas pris par l'électron dans son déplacement dans l'échantillon, (ii) l'électron est supposé perdre son énergie de façon progressive et continue, et non de façon discrète comme dans le cas d'une diffusion inélastique. Les calculs et les expressions que nous allons présenter dans la suite sont donnés dans le cadre de diffusions élastiques.

1- Détermination des directions prises par l'électron incident dans le matériau cible

Lorsqu'un électron incident interagit avec l'atome et l'électron du matériau, cet électron va être dévié de sa direction initiale de mouvement. La déviation dépend du type de l'interaction. Avec la collision élastique, l'angle de déviation varie typiquement de 5° à 180°. Cependant, dans le cas de la collision inélastique il dépend de l'énergie perdue. Plus l'énergie perdue est grande, plus l'angle de déviation est grand, mais il reste typiquement faible. En conséquence, les diffusions élastiques dominent dans la détermination du pas ou distance prise par la trajectoire de l'électron. Ce qui permet suivant la première hypothèse énoncée ci-dessus, de négliger l'effet des diffusions inélastiques.

Par conséquent, le changement de cette orientation peut être déterminé par l'intermédiaire de deux angles de déflection θ (angle de diffusion longitudinale) et φ (angle de diffusion azimutale) comme le montre la figure 3-4.

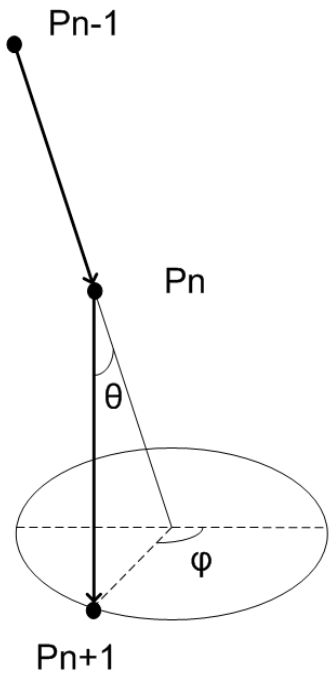


Figure 3-4 : Illustration de la trajectoire de diffusion de l'électron primaire dans le matériau cible.

Ces deux angles qui contrôlent la direction de l'électron incident à l'intérieur de la cible sont déterminés de façon aléatoire [Newbury'81, Bishop'76, Browning'94].

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{2 \times \alpha \times Rnd_1}{1 + \alpha - Rnd_2} \qquad (3-1)$$

$$\varphi = 2 \times \pi \times Rnd_3 \qquad (3-2)$$

où Rnd_1, Rnd_2 et Rnd_3 sont des variables aléatoires pouvant prendre des valeurs dans l'intervalle [0, 1]. α est un paramètre d'écrantage de la diffusion, il signifie que l'électron incident ne voit pas toute la charge du noyau, car celle-ci se trouve écrantée par la charge des électrons en orbite. Ce facteur est donné par l'expression suivante [Bishop'76] :

$$\alpha = 3.4 \times 10^{-3} \times \frac{Z^{0.67}}{E} \qquad (3-3)$$

où Z est le numéro atomique et E est l'énergie instantanée de l'électron incident.

Les angles de diffusion (θ, φ) seront utilisés dans la suite pour simuler les trajectoires de l'électron incident.

2- Distance entre collisions de l'électron primaire à l'intérieur du matériau cible

Après interaction avec les atomes et/ou électrons du matériau, l'électron incident diffuse sur une distance avant d'interagir avec d'autres atomes et/ou électrons. Cette distance S entre deux collisions successives peut être déterminée à partir du libre parcours moyen λ_T de l'électron incident par l'expression suivante [Lee'90, Adesida'80, Rouabah'09, Bentabet'06] :

$$S = -\lambda_T \times Ln(Rnd_4) \qquad (3-4)$$

Le signe moins montre que l'électron pénètre dans le matériau.

où Rnd_4 est une variable aléatoire pouvant prendre des valeurs dans l'intervalle [0, 1].

Et le libre parcours moyen de l'électron incident est exprimé comme suit :

$$\lambda_T = \frac{A}{N_a \times \rho \times \sigma_E} \qquad (3-5)$$

où N_a est le nombre d'Avogadro, ρ est la densité du matériau traversé par l'électron incident, A est le poids atomique (en g/mole) et σ_E est la section efficace élastique totale donnée par [Newbury'81]:

$$\sigma_E = 5.21\times10^{-21} \times \frac{Z^2}{E^2} \times \frac{4\times\pi}{\alpha\times(1+\alpha)} \times \left(\frac{E+511}{E+1024}\right) \text{ (cm}^2\text{/atome)} \qquad (3-6)$$

où Z est le numéro atomique, E est l'énergie instantanée de l'électron incident et α est le facteur d'écrantage défini ci-dessus.

Lorsqu'on connaît la direction et la distance parcourue par l'électron, on peut déterminer la position suivante de l'électron dans le matériau [Newbury'86].

3- Transfert d'énergie de l'électron incident

Lorsqu'un électron énergétique interagit avec le matériau, il va céder une partie de son énergie en créant des paires électron-trou. L'une des hypothèses que nous avons prises était de considérer que cet électron incident va perdre une partie ou la totalité de son énergie de façon continue suivant les diffusions qu'il subira à l'intérieur de l'échantillon. La perte d'énergie par diffusion est déterminée comme étant la différence entre son énergie avant cette diffusion (E_i) et après celle-ci (E_{i+1}). Il est préférable de donner cette perte d'énergie par unité de distance [Newbury'86, Shimizu'71, Rao-Sahib'74], c'est-à-dire, sous la forme suivante:

$$\frac{E_{i+1} - E_i}{S} = -\left|\frac{dE}{dS}\right|_{E_i} \qquad (3-7)$$

où la distance S dépend directement du libre parcours moyen (voir équation 3-4) et ce dernier dépend à la fois de l'énergie de l'électron incident et de la nature du matériau cible.

La perte d'énergie par unité de distance est déterminée par l'expression de Bethe [Bethe'30] :

$$\frac{dE}{dS} = -7.85\times10^{4}\times\left(\frac{\rho\times Z}{A\times E}\right)\times Ln\left(\frac{1.666\times E}{J}\right) \quad \text{(KeV/cm)} \qquad (3\text{–}8)$$

Le signe moins montre que l'énergie diminue en fonction de la distance parcourue.

Z est le numéro atomique, *A* est le poids atomique, *E* est l'énergie instantanée de l'électron, et *J* est le potentiel moyen d'ionisation du matériau que l'on peut exprimer :

Soit par la formule de Berger et Seltzer [Berger'64]:

$$J = \left(9.76\times Z + \frac{58.5}{Z^{0.19}}\right)\times10^{-3} \quad \text{(KeV)} \qquad (3\text{–}9)$$

Soit par la formule de Zeller [Zeller'72] :

$$J = 10.04\times Z + 8.25\times Z\times e^{(-Z/11.22)} \quad \text{(eV)} \qquad (3-10)$$

On peut se rendre compte que l'expression (3- 8), donnée par Bethe et qui simule la perte d'énergie de l'électron, n'est plus valide quand l'énergie de l'électron primaire se trouve inférieure au potentiel moyen d'ionisation *J*. En effet, le facteur Ln(1.166×*E/J*) devient négatif rendant l'expression (3-8) inutilisable. Pour surmonter ce problème Joy et Lou [Joy'89] ont remplacé cette expression par :

$$\frac{dE}{dS} = -7.85\times10^{4}\times\left(\frac{\rho\times Z}{A\times E}\right)\times Ln\left(\frac{1.666\times\left(E + k\times J\right)}{J}\right) \quad \text{(keV/cm)} \quad (3-11)$$

Où *k* est une constante dépendant du matériau, *k* = 0.85 pour le Si. Cette expression permet d'effectuer une simulation de perte d'énergie pour des énergies électroniques inférieures au potentiel moyen d'ionisation, c.à.d. jusqu'à 50 eV [Joy'91].

Nous avons effectué une comparaison entre les deux formules (3-8) et (3-11) dans le cas d'un substrat de Si. Le résultat est montré à la figure 3-5, où nous avons représenté la perte d'énergie en valeur absolue. Nous constatons que les deux courbes sont identiques pour des énergies élevées (≥ 2 keV), et s'écartent l'une de l'autre vers les énergies faibles (< 2 keV) à cause du fait que la formule de Bethe change de direction (montrant les limites de sa

validité). Nous avons donc opté pour l'utilisation de l'expression 3-11 [Joy'89] pour décrire la perte d'énergie de l'électron primaire dans notre étude de simulation.

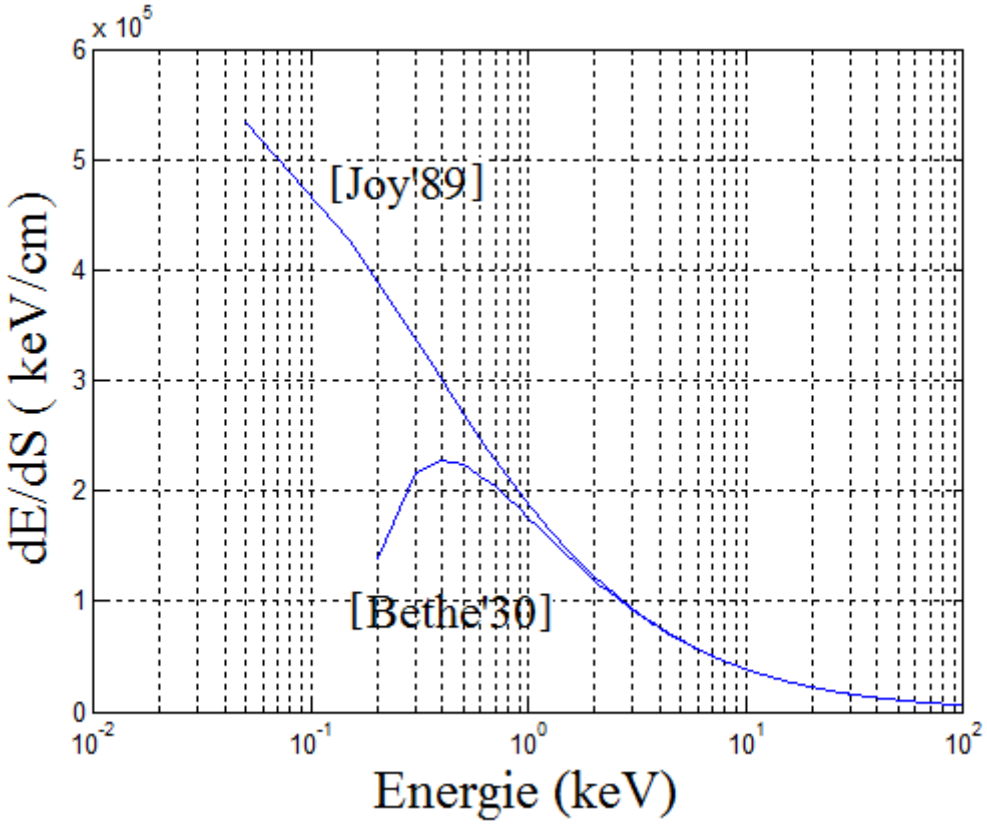


Figure 3- 5: Evolution de la perte d'énergie par unité de longueur d'un électron énergétique selon Bethe [Bethe'30] et Joy et Lou [Joy'89].

4- Création et diffusion de charges

a- Nombre de paires électron-trou créées par collision

Dans toutes nos études de simulation, nous supposons que la totalité de l'énergie de l'électron incident a été utilisée dans les collisions successives pour créer des paires électron-trou. Dans ce cas, le nombre de charges $n_{e\text{-}h}$ créées lors d'une collision est donc déterminé comme étant le rapport entre l'énergie perdue entre deux collisions successives ΔE_i et l'énergie d'ionisation (ou de création d'une paire électron-trou) $E_{e\text{-}h}$.

$$n_{e-h} = \frac{\Delta E_i}{E_{e-h}} \qquad (3-12)$$

ΔE_i est l'énergie perdue à la i^{ème} position, E_{e-h} est l'énergie d'ionisation appelée énergie de création d'une paire électron-trou. Les mesures expérimentales pour différents semiconducteurs donnent toutes plus ou moins la même valeur approchée [Klein'68].

$$E_{e-h} \cong 3 \times E_g \qquad (3-13)$$

E_g est l'énergie de la bande interdite d'un échantillon semiconducteur quelconque.

Signalons que seulement une partie des charges créées sera collectée, car nous devons tenir compte du phénomène de recombinaison en volume.

b- Diffusion de la charge créée

A chaque collision à l'intérieur du matériau, l'électron incident perd une partie de son énergie et change de direction par l'intermédiaire des angles θ et φ comme nous l'avons signalé ci-dessus (voir Fig. 3-6). Cette énergie perdue va créer des paires électron-trou, et chaque charge créée diffusera aléatoirement dans le matériau jusqu'à sa recombinaison ou sa collecte à la surface de l'échantillon (ce dernier point sera traité après). Pour simplifier notre démarche calculatoire, nous supposons que la position d'une charge créée se trouve au milieu de la distance séparant deux collisions successives de l'électron incident (voir Fig. 3-6). Par la suite, cette charge générée va diffuser dans toutes les directions selon les coordonnées sphériques (γ, β) définies à la figure 3-6 et dont les valeurs sont des nombres aléatoires donnés par :

$$\cos(\gamma) = 1 - 2 \times Rnd_5 \qquad (3-14)$$

$$\beta = 2 \times \pi \times Rnd_6 \qquad (3-15)$$

où Rnd_5 et Rnd_6 sont les nombres aléatoires pouvant prendre des valeurs entre 0 et 1.

L'angle γ définit l'orientation de la diffusion par rapport à celle qui précède. D'un autre côté, pour un angle γ donné, β varie entre 0 et 2π pour décrire toutes les orientations possibles.

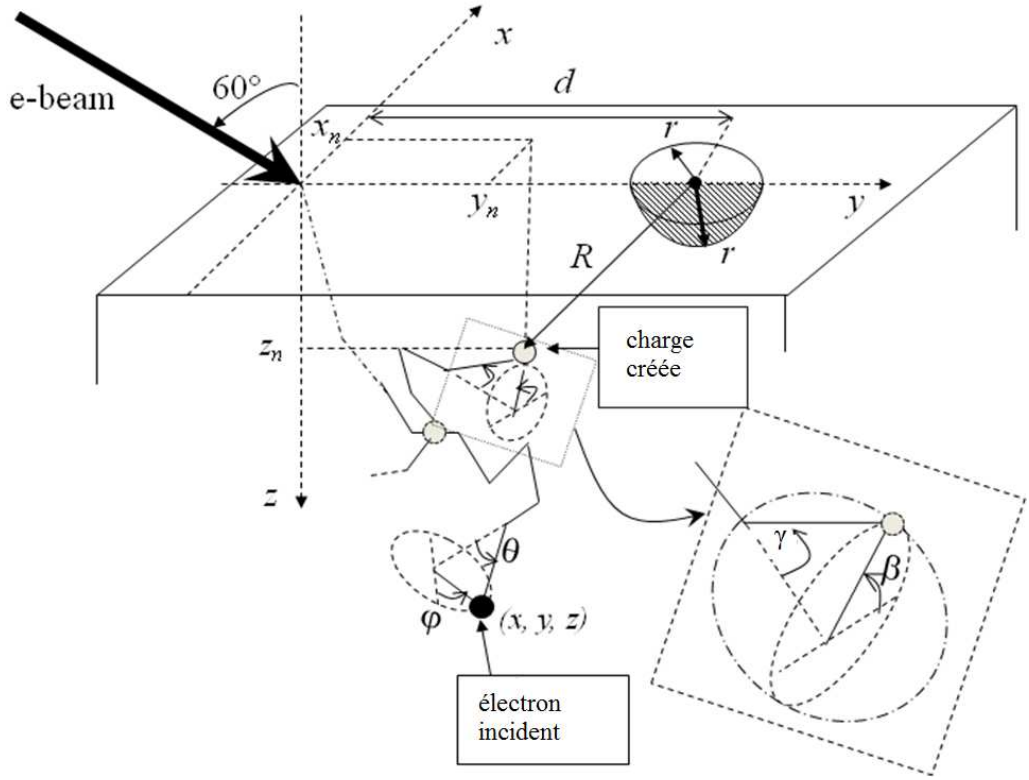


Figure 3-6: Illustration des processus de diffusion de l'électron incident et des charges créées.

La distance moyenne parcourue par chaque charge créée entre diffusions successives est égale au libre parcours moyen *l*, auquel nous avons donné la valeur de 10 nm [Lijequist'83], et la distance moyenne parcourue par la dite charge en volume avant son éventuelle recombinaison est la longueur de diffusion *L*. En d'autres mots, *L* définit le nombre maximum de collisions (ou de diffusions) $N = L/l$ de la charge générée.

5- Mise en œuvre d'un algorithme pour simuler les trajectoires de l'électron incident et des charges générées ainsi que leur collecte

Pour plus de clarté, nous présentons dans ce paragraphe deux algorithmes ; l'un simulant les trajectoires de l'électron incident à l'intérieur du matériau jusqu'à sa sortie de l'échantillon ou jusqu'à ce que sa propre énergie ne soit plus suffisante pour la génération de paires électron-trou, l'autre simulant la diffusion des charges créées avant leur recombinaison ou leur collecte si elles atteignent la zone de déplétion sous le nano-contact. Cet algorithme est programmé sous le logiciel Matlab.

a- Simulation de la trajectoire de l'électron incident

Le diagramme 3-7 donne l'algorithme pour simuler de façon tridimensionnelle la trajectoire d'un faisceau d'électrons incidents à l'intérieur du matériau cible. Les électrons constituant le faisceau sont suivis séparément, l'un après l'autre, comme le montre ce diagramme :

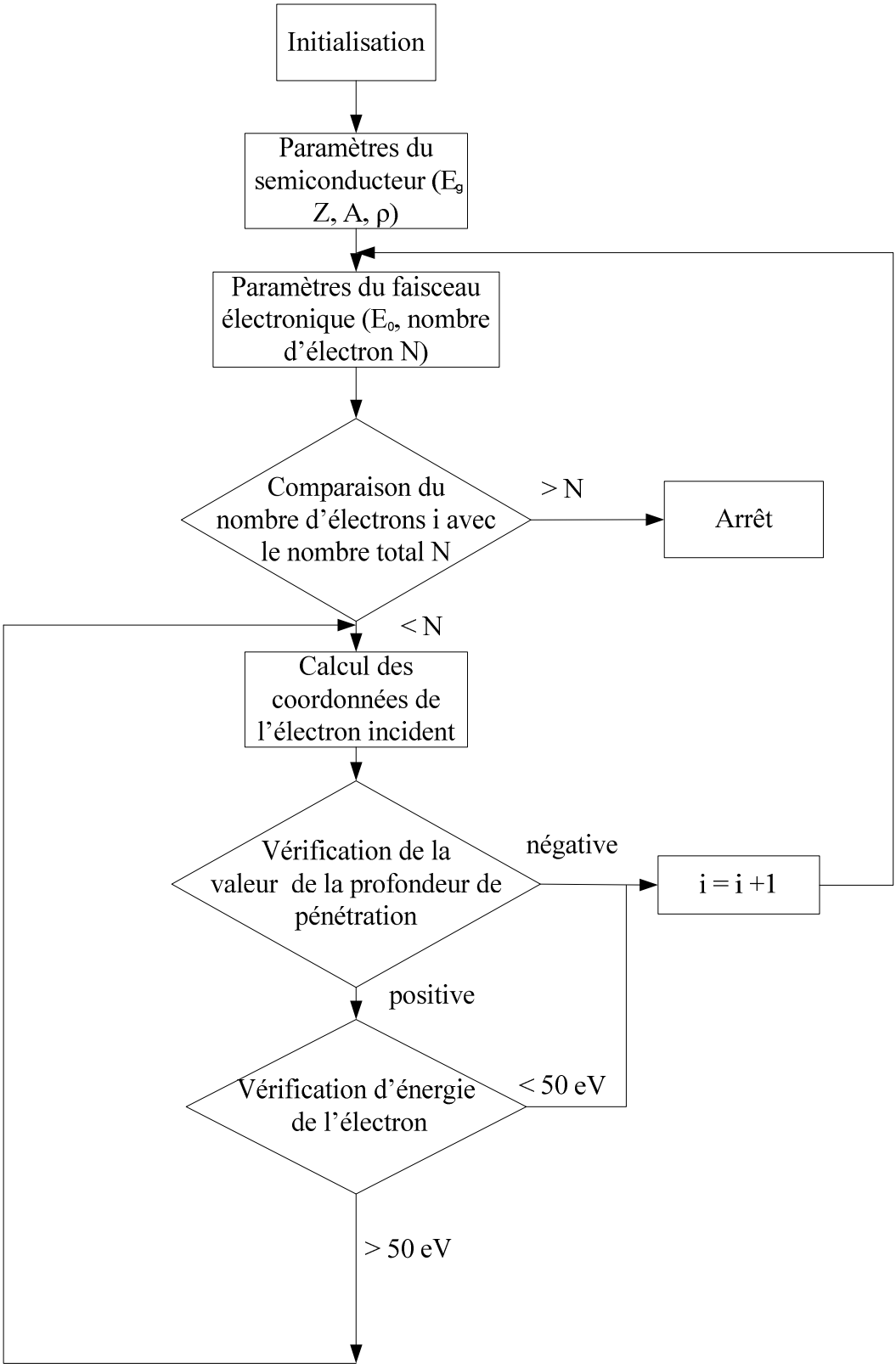


Figure 3-7 : Algorithme de simulation des trajectoires de l'électron incident.

b- Simulation des trajectoires de la charge créée et de sa collecte

α- *Trajectoires de la charge générée*

A une position de la ligne balayée par le faisceau électronique, et pour chaque électron incident, les charges générées diffusent aléatoirement dans toutes les directions recouvrant une distance globale égale à la longueur de diffusion en volume (rappelons que dans notre simulation, nous avons fixé la distance maximale parcourue par toute charge créée à *L*). Comme le montre la figure 3-6, chaque charge suit une trajectoire « brisée » depuis sa génération jusqu'à sa recombinaison ou sa collecte par l'électrode de contact. A chaque fois qu'une charge parcourt la distance *L*, l'efficacité de collecte est évaluée. Si la charge générée est collectée par le contact, le nombre total des charges collectées augmente d'une unité. Dans le cas contraire, ce nombre reste le même. Cette procédure est répétée pour toutes les charges générées pour chaque diffusion de l'électron primaire. L'électron primaire continue de créer des charges après plusieurs collisions jusqu'à ce que son énergie atteigne 50 eV [Joy'91], valeur à partir de laquelle nous considérons que l'électron est fortement ralenti et qu'il ne peut plus générer de façon irréversible des paires électron-trou. Puis, la procédure est répétée pour le prochain électron primaire et ainsi de suite.

β- *Procédure de collecte de la charge générée*

Pour évaluer l'efficacité de collecte, nous avons à tenir compte de l'effet d'un paramètre physique très important puisqu'il conditionne la forme et l'intensité du profil du courant induit ; à savoir, la vitesse de recombinaison en surface. Nous avons donc considéré deux situations extrêmes : vitesse de recombinaison en surface infinie et nulle. Lorsque la vitesse est infinie, cela signifie que les charges générées qui émergent à la surface en dehors du nano-contact ont une probabilité nulle d'être collectées. Mais lorsque la vitesse est nulle, cela signifie que la charge générée émergeant à la surface en dehors du contact peut être collectée avec une certaine probabilité [Donolato'85]. Dans notre cas, cette probabilité va dépendre de la taille du nano-contact et de la distance entre la position de la charge émergée et celle du nano-contact.

Le cas d'une vitesse finie, voire nulle, sera traité dans le chapitre suivant. Ici, seule une vitesse infinie est considérée.

Dans les deux cas de vitesse de recombinaison en surface, pour collecter les charges générées, deux conditions indépendantes des effets de surface (puisqu'elles ont lieu en volume) doivent être considérées. D'abord, la condition $N \times l \leq L$ doit être satisfaite. Ici N est le nombre de diffusions subies par la charge créée ; puis la condition $R \leq r$ doit aussi être satisfaite. Ici R est la position de la charge générée référencée au centre du nano-contact avant sa collecte ou sa recombinaison. Cette position est indiquée à la figure 3-6. Ces deux conditions doivent être satisfaites simultanément. Si non, la charge créée ne sera pas collectée. Dans cet algorithme, nous avons préféré introduire la longueur de diffusion en volume qui est égale à $(D \times \tau)^{1/2}$ comme paramètre unique au lieu d'utiliser la constante de diffusion D et le temps de relaxation τ qui auraient dans ce cas des valeurs hypothétiques.

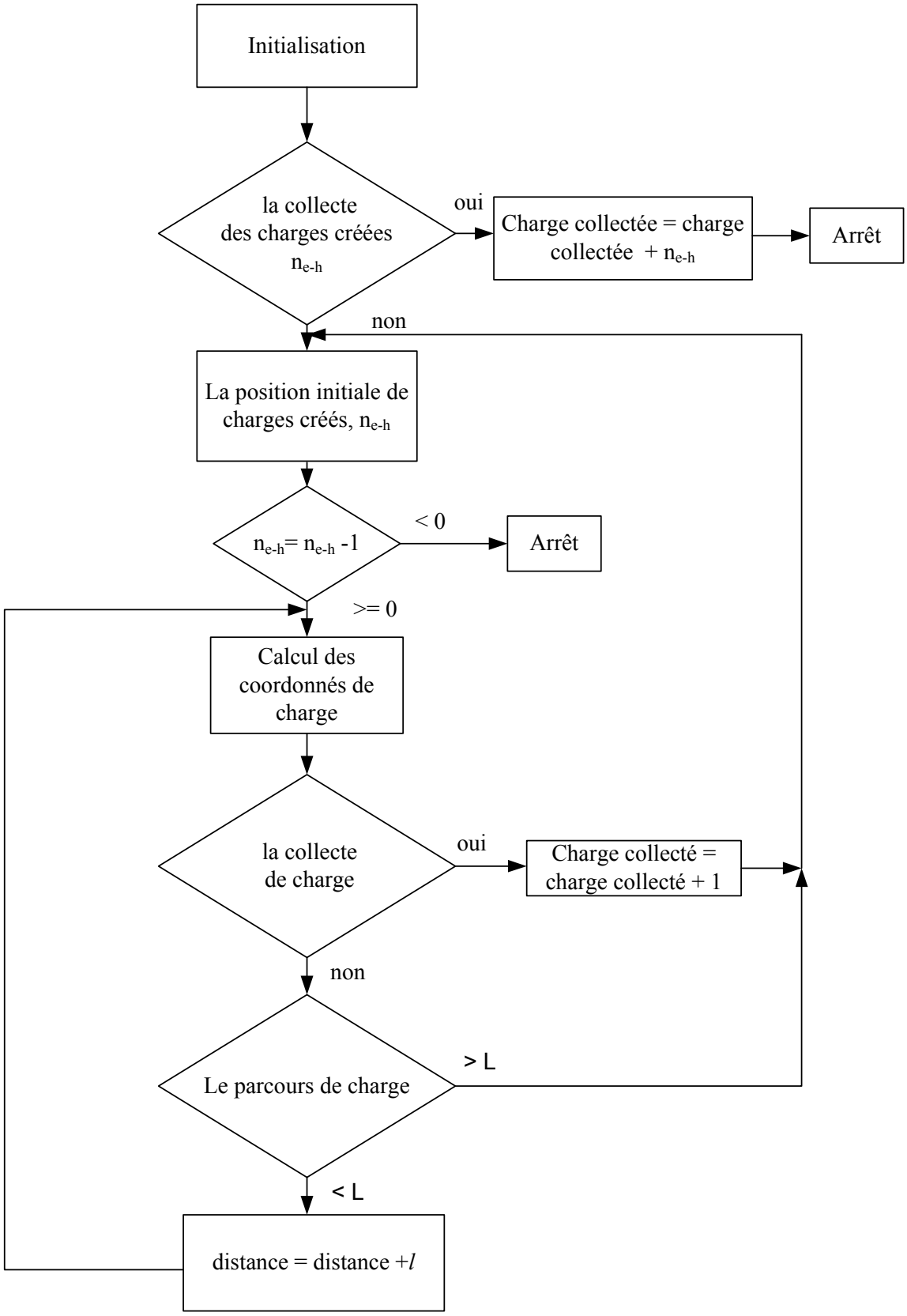


Figure 3-8 : Algorithme décrivant la procédure simulant la diffusion des charges créées.

L'efficacité de collecte est définie comme étant le rapport entre le nombre de charges collectées et le nombre de charges générées :

$$\eta = \frac{\sum charges\ collectées}{\sum charge\ générées} \qquad (3-16)$$

Plusieurs paramètres liés aux conditions géométriques de l'expérience contrôlent l'efficacité de collecte. Ces paramètres sont la forme et la taille du nano-contact, ou plus exactement la forme et la taille de la zone de déplétion formée sous la nano-contact, la distance *d* entre le nano-contact et la ligne scannée par le faisceau et, enfin, l'angle d'inclinaison entre l'axe du faisceau et la surface de l'échantillon. Ces points seront discutés lors de la présentation des résultats dans ce qui suit. Quelques uns de ces paramètres ont été introduits pour tenir compte des résultats expérimentaux obtenus et qui ont été décrits en chapitre 2.

III- Test de la simulation de la procédure nano- EBIC

Avant de présenter quelques résultats types obtenus par notre programme de simulation sur le courant induit (ou plus exactement sur l'efficacité de collecte), nous donnerons quelques résultats montrant les différentes trajectoires de l'électron incident et ce, pour deux matériaux cibles : Si et Ge. Et étant donné que dans notre instrument hybride, le faisceau fait un angle de 60° par rapport à la surface de l'échantillon, nous présenterons aussi l'effet de cet angle d'inclinaison sur la distribution de ces trajectoires.

1- Influence du numéro atomique du matériau cible

La figure 3-9 donne deux images montrant la distribution des trajectoires ou plutôt le volume de génération pour deux cibles, le Si et le Ge dont les caractéristiques principales requises pour les calculs sont résumées dans le tableau I. L'angle d'inclinaison a été fixé ici à 60° (entre l'axe du faisceau et la surface de l'échantillon).

échantillon	Densité ($g \times cm^{-3}$)	Numéro atomique	Poids atomique (g)
Si	2.33	14	28
Ge	5.323	32	72.64

Tableau I : Quelques caractéristiques de Si et de Ge.

Le résultat est montré dans la figure 3-9 avec la même énergie primaire de 5 keV. On remarque que pour le Ge les trajectoires maximales s'arrêtent à environ 165 nm, alors que celles obtenues pour le Si vont jusqu'à 350 nm. C'est-à-dire plus le matériau est lourd, moins est profond le parcours des électrons.

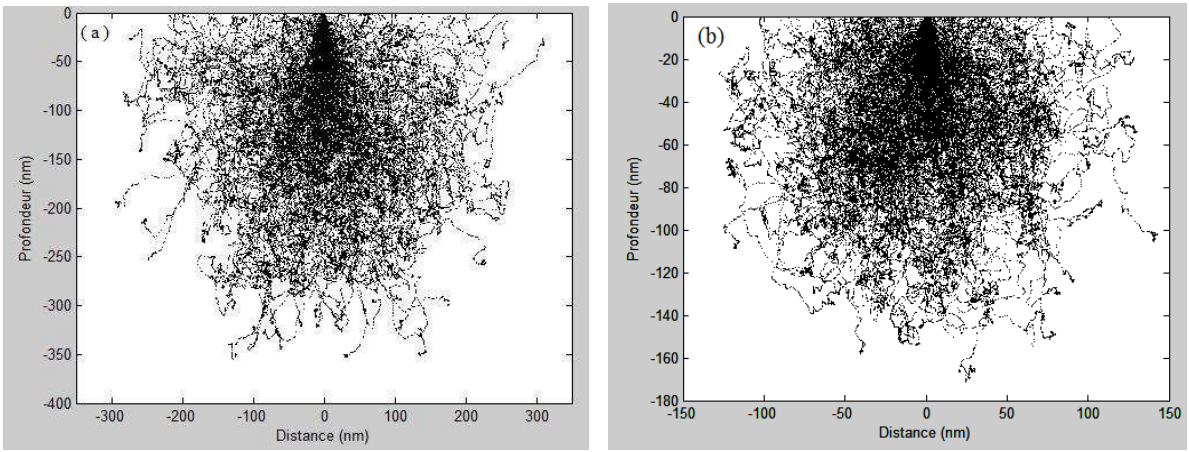


Figure 3- 9: Influence du numéro atomique sur la trajectoire de l'électron incident ; a- avec Si, b- avec Ge.

2- Influence de l'angle d'inclinaison sur le volume de génération

Pour cette étude, nous avons fixé le nombre d'électrons incidents à 500, l'énergie primaire à 5 keV et nous avons pris deux angles d'inclinaison : 0° et 60°. La figure 3-10 montre l'effet évident de l'angle d'inclinaison sur la forme du volume de génération. On constate la présence d'une quantité importante d'électrons proches de la surface de l'échantillon cible pour les grands angles d'inclinaison, suite à la déformation du volume de génération et au rapprochement de la base de la « poire » de génération vers la surface.

Notons que les effets du numéro atomique ainsi que de l'angle d'inclinaison sont bien connus. Nous donnons ces résultats seulement pour montrer la fiabilité de notre démarche dans cette simulation.

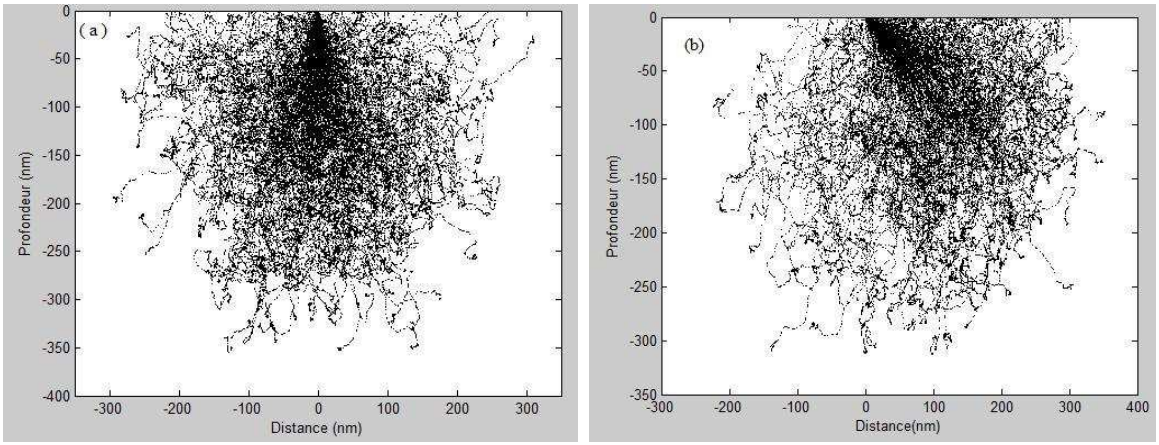


Figure 3- 10: Trajectoire des électrons incidents dans le Silicium avec une énergie primaire de 5 keV avec une inclinaison de : a- 0°, et b- 60°.

3- Présentation des résultats de la simulation nano-EBIC

a- Un nano-contact pour la collecte du courant induit

L'introduction en simulation de la notion de nano-contact fait suite au système hybride AFM/MEB que nous utilisons. Dans ce système, le courant induit est collecté par une pointe AFM conductrice. Lorsqu'une pointe est mise en contact avec la surface de l'échantillon, il se forme un nano-contact dont le rayon peut être évalué suivant certaine hypothèse. Si on

considère que ce contact est de nature élastique, la théorie de Hertz s'appliquera [Hertz'82]. Dans cas, le rayon de contact a_H est donné par la relation de Hertz [Hertz'82] :

$$a_H = \left(\frac{R \times F_0}{K} \right)^{1/3} \qquad (3-17)$$

où F_0 est la force d'appui pointe-surface, R le rayon de courbure de la pointe et K est le module élastique effectif représentant l'interaction pointe- échantillon et dont l'expression est donnée par:

$$\frac{1}{K} = \frac{3}{4} \times \left[\frac{1 - Y_p^2}{E_p} + \frac{1 - Y_s^2}{E_s} \right] \qquad (3-18)$$

où E_P, E_S, Y_P, Y_S sont respectivement les modules d'Young et les coefficients de Poisson de la pointe et de la surface.

Dans notre cas expérimental, le rayon de courbure de la pointe est d'environ 150 nm et la force exercée est d'environ 50 nN. Le rayon de contact donne environ 3 nm. Ainsi, nous pouvons considérer que le nano-contact lui-même est ponctuel et qu'il se trouve au centre de la zone de déplétion dont l'extension dépend des niveaux Fermi de la pointe de l'AFM et de l'échantillon. Nous avons envisagé deux types de forme pour la zone de déplétion : une forme cylindrique et une forme demi-sphérique comme le montre la figure 3-11. Dans les deux cas, la zone de déplétion possède un rayon r de dimension nanométrique.

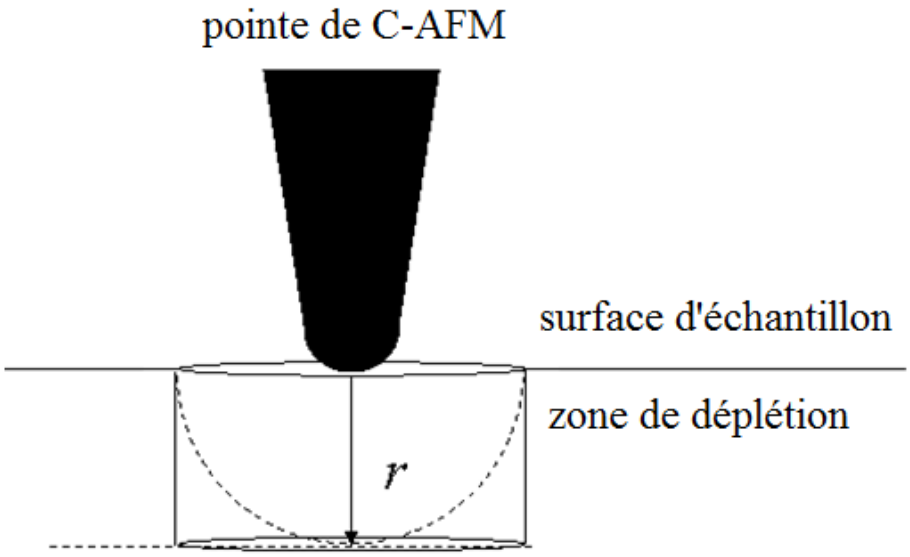


Figure 3-11 : Illustration de la zone de déplétion formée lors d'un contact entre une pointe AFM et la surface de l'échantillon.

b- Quelques résultats préliminaires sur la simulation du profil de l'efficacité de collecte

- *Influence de la forme de la zone de déplétion sur le profil du nano EBIC*

Avant toute présentation, il nous a semblé utile de choisir laquelle des formes probables de la zone de déplétion est la mieux appropriée pour notre calcul et aussi la mieux adaptée pour refléter une similitude ou un rapprochement avec nos résultats expérimentaux. Nous avons donc réalisé des études sur la forme de la zone de déplétion et son effet sur le profil du nano-EBIC. Les deux formes choisies sont cylindrique et demi-sphérique. Le rayon de la zone de déplétion reste à la même valeur pour les deux cas *(r* = 10 nm). La profondeur du cylindre est égale au rayon de la forme hémisphérique (*r* = 10 nm). Tous les autres paramètres restent inchangés (la longueur de diffusion L, la distance entre la ligne de balayage d, l'énergie primaire E et l'angle d'inclinaison). La figure 3-12 montre le résultat de cette comparaison.

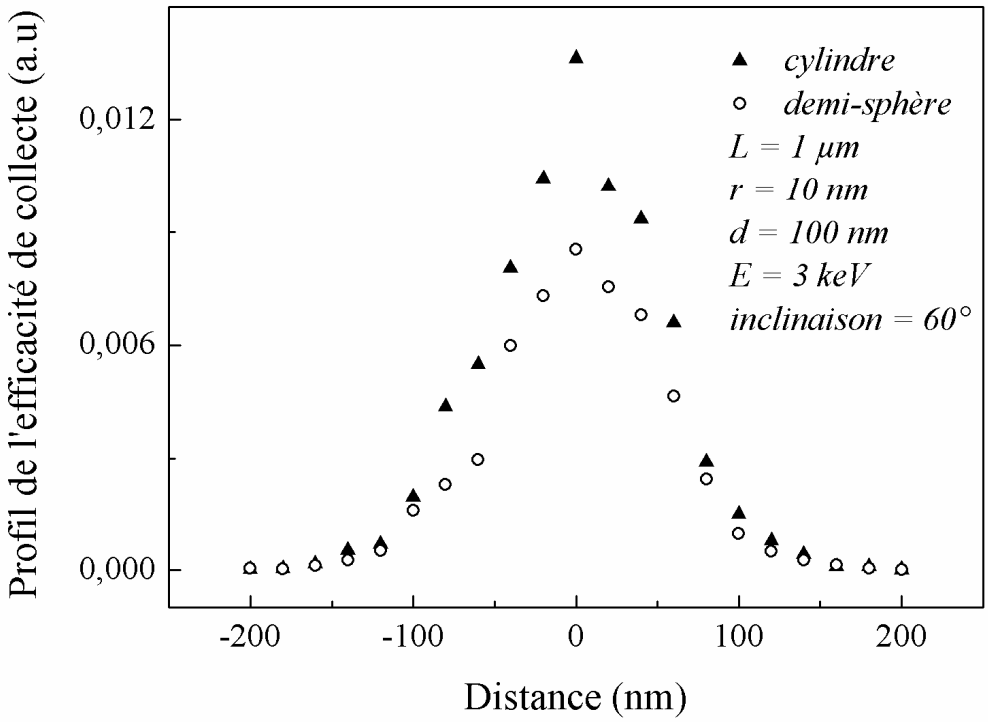


Figure 3- 12: Influence de la forme de la zone de déplétion sur le profil nano-EBIC.

A grande distance (> r), les deux profils sont parfaitement identiques. Par contre, pour des distances comparables ou inférieures à r, il semble que la forme cylindrique collecte plus de charges créées que la forme hémisphérique. Ceci peut être expliqué par le fait que le volume de la partie cylindrique est légèrement plus grand que celui de la partie hémisphérique. Cependant, cette différence n'est pas notable et peut éventuellement être négligée, car les deux formes donnent à peu près la même valeur de la longueur effective de diffusion. Pour tous nos calculs présentés ensuite, nous avons opté pour l'utilisation de la forme hémisphérique qui semble être la forme la mieux adaptée à un nano-contact tel que le notre comme cela a été calculé par Smit [Smit'02].

- *Influence de la taille du nano-contact sur l'efficacité de collecte*

En nano-EBIC, le nano-contact pouvant être considéré comme ponctuel, c'est en fait l'effet de la taille de la zone de déplétion sous le nano-contact sur l'intensité et le profil du courant induit que nous étudions. En effet, il est supposé que toute charge atteignant la zone de déplétion est collectée puisque soumise à un champ électrique. Nous avons donc simulé l'effet de la taille de la nano-zone de déplétion sur l'efficacité de collecte. Nous donnons comme résultat type la figure 3-13 présentant l'évolution de l'efficacité de collecte pour deux tailles différentes : r = 10 nm et r = 30 nm. L'effet de la taille est évident. Plus DL est grande, plus l'efficacité de collecte du courant induit est élevée.

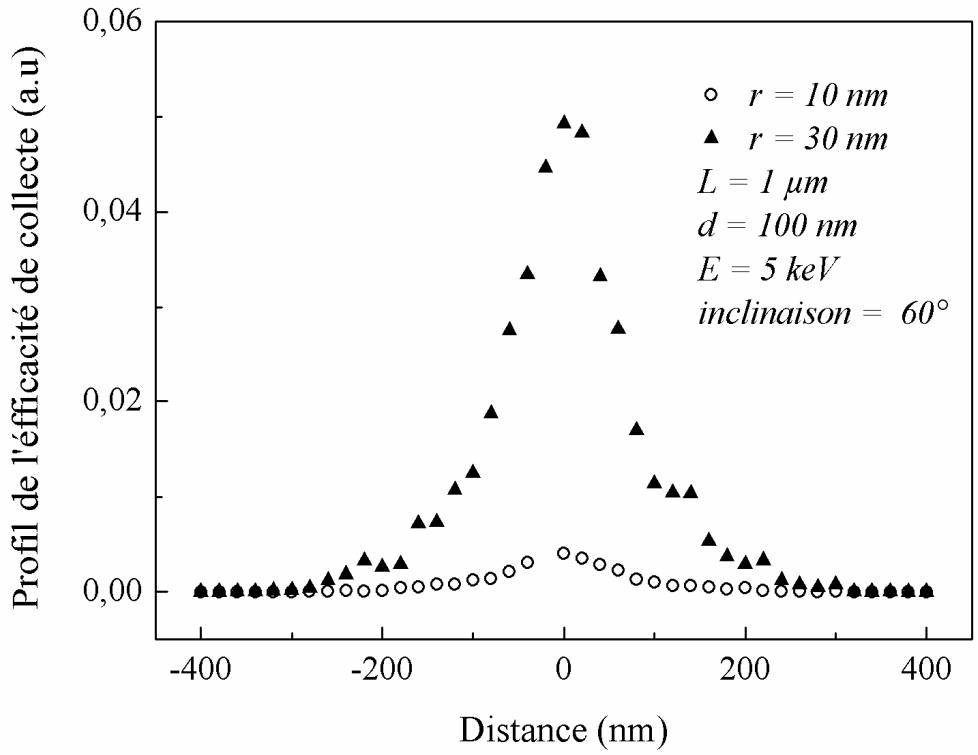


Figure 3-13 : Influence du rayon r de la nano-zone de déplétion sur l'efficacité de collecte.

Une étude de l'effet du rayon de la nano-zone de déplétion sur l'efficacité maximale de collecte a donc été entreprise. Les résultats sont donnés à la figure 3-14 pour deux longueurs de diffusion en volume, L = 1 µm et L = 1.5 µm, pour d = 300 nm et E = 5 keV. Pour les deux longueurs de diffusion, l'efficacité maximale de collecte augmente en fonction de la taille jusqu'à une certaine valeur et puis sature lorsque le rayon de la nano-zone de déplétion approche de ~400 nm. A partir de cette valeur, l'effet de la taille est pratiquement négligeable, sinon écranté par d'autres paramètres tels que la profondeur de la zone de déplétion que nous avons maintenue constante pour les deux longueurs de diffusion.

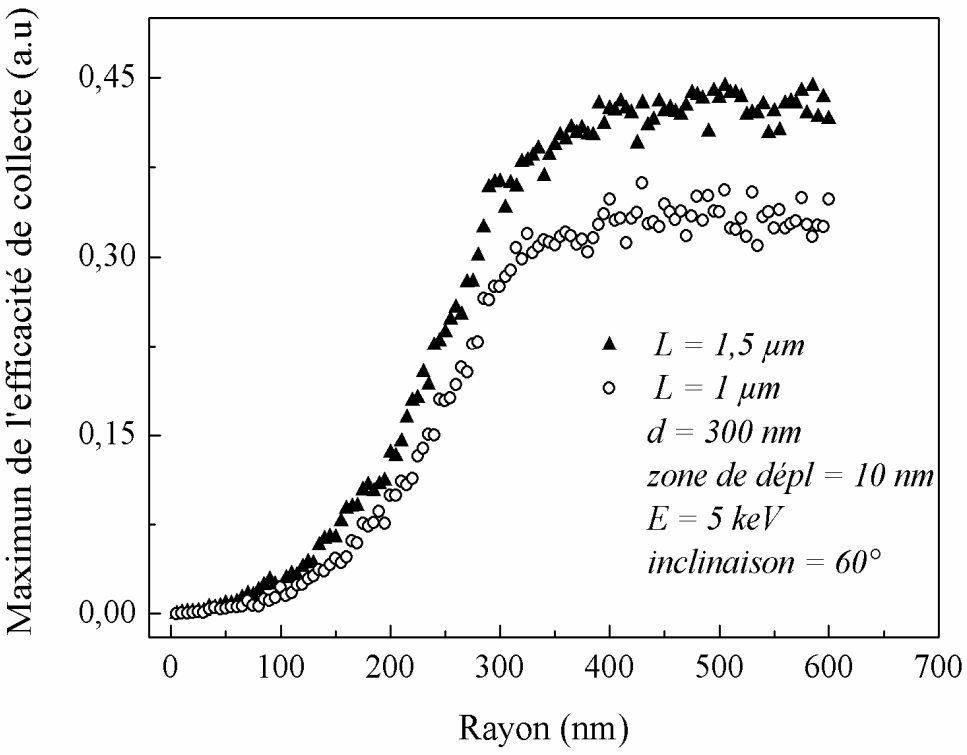


Figure 3- 14: Variation du maximum de l'efficacité de collecte nano-EBIC en fonction du rayon de la zone de déplétion.

- *Influence de la longueur de diffusion en volume sur l'efficacité de collecte $\eta(x)$ à la distance x du nano-contact*

Nous avons aussi étudié l'effet de la longueur de diffusion en volume sur l'efficacité de collecte η fonction de la distance *x* entre le faisceau incident et le nano-contact (voir Fig. 3 .6). Pour cela, nous avons effectué une simulation avec deux longueurs de diffusions différentes : L = 1 µm et L = 0.5 µm, Les autres paramètres (comme le rayon *r*, la distance entre le faisceau et centre du contact *d*, l'énergie primaire E_0, et l'angle d'inclinaison) gardent les mêmes valeurs. Le résultat est montré à la figure 3-15.

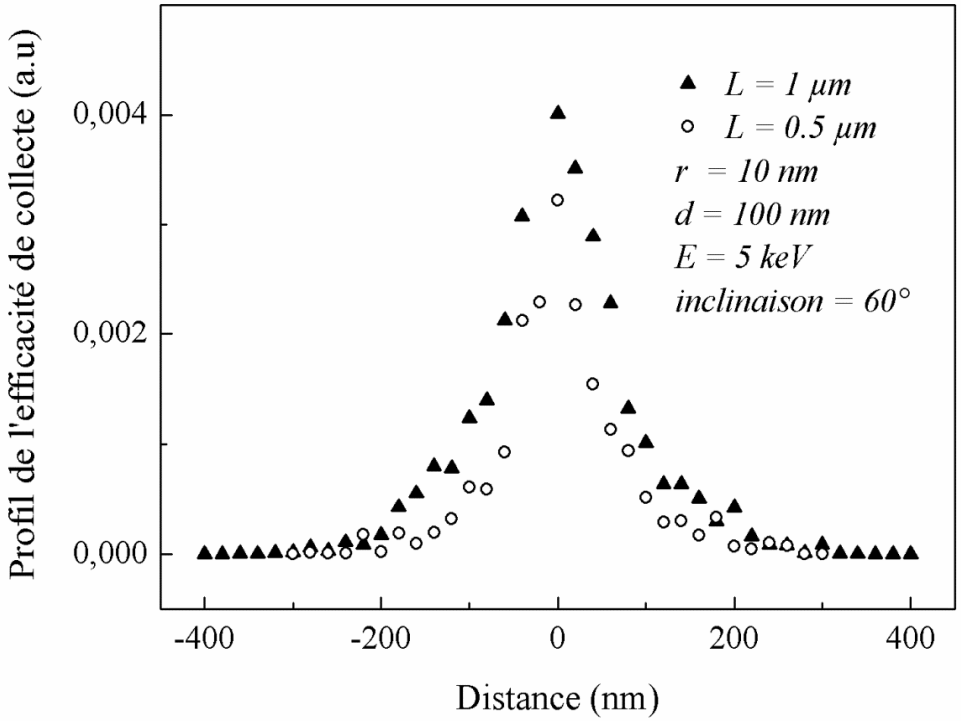


Figure 3-15 : Influence de la longueur de diffusion en volume sur le profil de l'efficacité de collecte. Rajouter x à distance dans la figure

Il semble que la valeur de la longueur de diffusion, du moins pour les valeurs que nous avons utilisées, n'affecte que faiblement le profil de l'efficacité de collecte.

IV- Conclusion

L'essentiel de ce chapitre a été consacré à la présentation d'une étude sur la simulation de l'interaction électron – matière et à la diffusion de cet électron énergétique dans le volume de la cible, ainsi qu'à la génération de paires électron – trou suite aux nombreuses diffusions qu'a subi l'électron primaire.

Nous avons tout d'abord rappelé succinctement les différents processus provoqués par cette interaction et nous les avons regroupés dans deux catégories, à savoir, les diffusions élastiques et inélastiques. L'essentiel pour nous était de montrer le socle sur lequel est basée l'étude de simulation. Par la suite, nous avons tenté d'expliquer les différents chemins suivis par l'électron incident lors de chocs créant des paires électrons – trous. Ces charges créées ont été suivies depuis leur génération jusqu'à leur recombinaison ou leur éventuelle collecte par le contact donnant ainsi naissance à un courant induit.

Notre étude de simulation diffère des études précédentes faites par Ledra *et al.* [Ledra'05] dans la mesure où ceux-ci ne prenaient pas en compte l'influence de la zone de déplétion qui existe sous le nano-contact. Nous avons dans un premier temps examiné l'influence de la forme de cette zone de déplétion, cylindrique ou hemi-sphérique. Nous en avons conclus que la différence était faible et nous avons choisi de retenir la forme hémi-sphérique qui semble convenir mieux à un contact pratiquement ponctuel pour des raisons de symétrie. Nous avons également montré que la taille de la zone de déplétion a une influence beaucoup plus importante sur l'efficacité de collection que la longueur de diffusion en volume.

Nous allons voir dans la suite les conséquences de la variation des divers paramètres expérimentaux sur la mesure de la longueur de diffusion effective.

Bibliographie

[Adesida'80] I. Adesida, R. Shimizu and T. E. Everhart, J. Appl. Phys., 51, 5962(1980)

[Bentabet'06] A. Bentabet, N.Bouarissa, Phys. Lett A, 355, 390 (2006).

[Bethe'30] H. Bethe, Eur Thoerie Des Durchganges schneller Kurpuskulerstrahlen durch Material, Annalen de Phys (Leipzig), 5, 325 (1930).

[Berger'64] M. J. Berger and S. M. Selzer., Nat. Acad. Sci. Natl. Res. Council Publ. 1133, 205(1964).

[Bishop'76] H.E. Bishop., Eds. K.F.J. Heinrich, D.E. Newbury and H. Yakowitz, NBS Special publications 460, Washigntonpp.5-13, 1976.

[Browning'94] R. Browning, T. Z. Li, B. Chui, Jun Ye, R. F. W. Pease, Z. Czyiewski and D. C. Joy., J. Appl. Phys. 76, 2016(1994).

[Chakarova'96] R. Chakarova., Surf. Scie., 351, 303(1996).

[Corkich] R. Corkich, P.P. Altermatt and G. Heiser., Sol. Energ. Mat. & Sol Cel., 65, 63 (2001).

[Donolato'85] C. Donolato., Solid. Stat. Electronics., 28, 1143(1985).

[Joy'86] D.C. Joy, J. Microsc.,143, 233248 (1986).

[Joy'89] D. C Joy and S. Lou, Scanning 11, 176 (1989).

[Joy'91] D. C. Joy., Scan. Microsc., 5, 329 (1991).

[Klein'68] C. A. Klein., J. Appl. Phys., 39, 2029 (1968).

[Hardingham'97] C. Hardingham , J. Phys. D: Appl. Phys. 30 (1997) 645–654

[Hertz'82] H. Hertz, Über die Berührung fester elastischer Körper. J. Reine Angew. Mathematik, 92, 156,(1882).

[Holt'93] D. B. Holt and E. Napchan., Scanning., 16, 78 (1994).

[Ledra'05] M. Ledra and N. Tabet., J. Phys. D: Appl. Phys., 38, 3845 (2005).

[Ledra'09] M. Ledra and N. Tabet , Super and Microstr, 45, 444(2009).

[Lee'90] Kang-Yoon Lee, Guang-Sup Cho and Duk-In Choi, J. Appl. Phys. 67, 7560 (1990).

[Lijequist'83] D. Liljequist., J. Phys. D: Appl. Phys., 16, 1567(1983).

[Love'77] G. Love, M. G. C. Cox and V. D. Scott., J. Appl. D: Appl. Phys., 10, 7(1977).

[Negulyaev'05] N.N. Negulyaev, E.B. Yakimov and S.I. Zaitsev., Phys. Stat. sol (c), 2, 1822(2005).

[Newbury'86] D. E. Newbury, D. C. Joy, P. Echlin, C. E. Fiori, J. I. Goldstein Plenum Press, New York, (1986).

[Paqueton et al.] H. Paqueton et J. Ruste., Techniques de l'Ingénieur, P 865v2-1/16

[Rao-Sahib'74] T. S. Rao-Sahib and D. B. Wittry, J. Appl. Phys, 45, 5060 (1974).

[Reimer'86] L. Reimer and D. Stelter., Scanning, 8, 265(1974).

[Rouabah'09] Z. Rouabah, N. Bouarissa, C. Champion, N. Bouaouadja, Appl. Surf. Sci, 255, 6217 (2009).

[Ruste'75] J. Ruste et M. Gantois , J. phys. D , 8, 872 (1975).

[Seiler'84] H. Seiler, Electron Beam Interaction With Solids , SEM, Inc., Chicago, IL. Edité par D.F. Kyser, H. Niedrig, D.E. Newbury and R. Shimizu, 1984.

[Shimizu'71] R. Shimizu and K. Murata, J. Appl. Phys., 42, 387(1971).

[Shimizu'92] R. Shimizu and Z. J. Ding., Rep. Prog. Phys., 487(1992).

[Smit'02] G.D. J. Smit, S. Rogge and T.M. Hlapwijk, Appl. Phys. Lett. 81, 38523854,(2002).

[Tabet '96] N. Tabet and M. Ledra., Mater. Sci. Eng. B42, 181184 (1996).

[Zeller' 72] C. Zeller, J. C. R. Coulon, Hebd. Séan. Acad. Sci, 295, 431 (1972).

Chapitre 4

Etude de la longueur de diffusion effective par simulation Monte Carlo: Analyse de certains paramètres physiques

Introduction 122

I- Phénomènes de recombinaisons 123

1- Recombinaison au sein d'un semi-conducteur 123

2- Recombinaison en surface 124

a- Vitesse de recombinaison en surface infinie 125

b- Vitesse de recombinaison en surface nulle 127

II- Efficacité de collecte pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface 130

1- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur le profil de l'efficacité de collecte 130

2- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire 131

III- Détermination de la longueur de diffusion effective à partir d'un profil simulé 133

1- Procédure d'extraction de la longueur de diffusion effective 133

2- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur la longueur de diffusion effective 134

3- Evolution de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire pour un contact de très grande dimension et comparaison avec le nano-contact 135

4- Comparaison et discussion des résultats simulés et expérimentaux 137

IV- Conclusion 139

Bibliographie 140

Introduction

Au chapitre précédent, nous avons détaillé la procédure suivie pour étudier la simulation de la technique nano-EBIC. Nous avons décrit la procédure de diffusion des électrons primaires, suivie par la création des paires électron-trou et enfin la procédure de collecte par un nano-contact des charges générées. Dans cette étude, nous avions considéré une vitesse de recombinaison en surface infinie ; toute charge émergeant à la surface hors du nano-contact est automatiquement recombinée. C'est ce cas de figure qui a toujours été considéré dans les simulations numériques dans le cadre de la technique EBIC classique et très récemment dans le cadre de l'EBIC en présence d'un nano-contact [Ledra'09]. En réalité, les effets de recombinaison en surface sont directement liés à la nature et l'état de la surface de chaque échantillon étudié. C'est pourquoi il serait intéressant de tenir compte de la dimension finie de la vitesse de recombinaison en surface. Dans le cadre de ce travail nous avons procédé à une étude comparative des deux cas extrêmes, vitesse infinie et vitesse nulle, qui nous a semblé être une première étape pertinente. Nous avons effectué cette comparaison dans le cas du nano-contact qui correspond à nos expériences de nano-EBIC mais également dans le cas du contact semi-infini qui correspond à l'EBIC classique.

Avant de présenter nos résultats, nous rappelons brièvement les différents processus de recombinaison en volume, puis nous décrivons les effets de recombinaison en surface. Ce dernier point permet d'introduire l'expression inspirée de Donalato [Donolato'85] qui est utilisée pour décrire la probabilité de capture (ou de collecte) des charges en surface par le nano-contact.

I- Phénomènes de recombinaisons

Les effets de recombinaison jouent un rôle très important dans le comportement de certains dispositifs [Dunbar'77, Redfield'78, Fossum'78, Shibib'67]. La recombinaison peut se produire soit dans le volume soit à la surface. Plusieurs études de ce phénomène ont été effectuées [Shockley'52, Hall'52, Sah'58, Fossum'73, Jastrzebski'75, Rossetti'82, Leamy'82, Luke'85&94, Kittler'91, Hangleiter'90, Seifert'96, Donolato'83&85, Kveder'01, Marti'04]. Dans ce paragraphe nous donnerons un bref rappel sur les différents processus de recombinaison dans un semi-conducteur.

1- Recombinaison au sein d'un semi-conducteur

Après génération des paires électron-trou et en l'absence de toute influence extérieure (champ électrique), les porteurs de charge en excès, créés loin de la surface (la zone perturbée), sont animés dans le volume du matériau d'un mouvement de diffusion pur sous l'effet du gradient de leur concentration. S'ils ne sont pas attirés par un champ électrique local (présence d'une zone de charge d'espace) ils se recombinent.

La recombinaison des électrons et des trous est un processus par lequel les deux types de charges s'annihilent. Dans ce processus, la différence d'énergie qui en résulte (entre états initial et final) est libérée. Ce qui mène à une classification possible des procédés de recombinaison. Lorsque cette énergie est émise sous forme de photons, on parle de recombinaison radiative, celle-ci apparaît en général dans les semiconducteurs à gap direct (voir diagrammes de bandes d'énergie : chapitre 1). Lorsque cette énergie est dissipée sous forme de phonons, on parle de recombinaison non radiative, et si cette énergie est transmise sous forme d'énergie cinétique à un autre électron, on est en présence de recombinaison Auger.

Une autre classification est possible ; à savoir que la recombinaison d'un électron avec un trou, dans un semi-conducteur, peut se produire :

- Soit directement par transition directe d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence (recombinaison bande à bande). Notons que la

recombinaison Auger est une recombinaison bande à bande, mais l'énergie résultante est transmise à un électron ou à un trou différent.

- Soit indirectement par l'intermédiaire d'un centre recombinant. Le processus de ce type de recombinaison comporte deux étapes successives. Tout abord un électron (ou un trou) est capturé par un piège dont le niveau énergétique est situé dans la bande interdite, puis ce même centre capture un trou (ou un électron) attiré par attraction coulombienne. Il en résulte une recombinaison (recombinaison assistée par piège).

Dans le cas d'une recombinaison directe, le taux (ou vitesse en $cm^{-3}s^{-1}$) de recombinaison électron-trou est proportionnel à la densité des électrons et à celle des trous. Il s'agit d'un processus linéaire. De plus, ces densités d'électrons et de trous sont égales en raison de la neutralité. En général, les composants semi-conducteurs fonctionnent en régime de faible injection. En d'autre terme, l'excès de porteurs par rapport au régime d'équilibre est faible devant la densité des porteurs majoritaires du semi-conducteur.

Dans le cas d'une recombinaison par centre recombinant, illustration dans la figure 4-1, les impuretés jouent un rôle non négligeable dans ce processus, notamment les centres recombinants qui introduisent des niveaux d'énergie permis au milieu de la bande interdite. Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres est basé sur de la théorie de Shockley-Read Hall [Shockley'52, Hall'52].

2- Recombinaison en surface

La surface de tout semi-conducteur présente des défauts de toutes sortes, qui se comportent comme des centres de recombinaison. La surface donne donc lieu à une recombinaison superficielle qui réduit la densité des porteurs de charges excédentaires dans la couche adjacente à la surface du semi-conducteur. En pratique, différents traitements de la surface (rectification, polissage, attaque chimique,…) sont utilisés pour modifier ces effets de surface. Ces effets de surface sont généralement caractérisés par une vitesse, la vitesse de recombinaison en surface. Ce paramètre a été étudié théoriquement et déterminé expérimentalement par la technique EBIC [Jastrzebski'75, Donolato'83&85, Luke'85&94,

cavalcoli'91, Kittler'91, Hakimzadeh'92, Seifert'96, Kveder'01, Kurniawan'06]. Par contre les études théoriques, dans le cadre de l'EBIC classique, ont concerné seulement les deux cas extrêmes de cette vitesse de recombinaison en surface : vitesse nulle et vitesse infinie [Ioannou'82, Donolato'85, cavalcoli'91].

a- Vitesse de recombinaison en surface infinie

Une vitesse de recombinaison en surface infinie signifie que la concentration des porteurs excédentaires atteignant la surface y devient nulle du fait de la recombinaison.

Dans le cas d'un contact semi-infini comme celui indiqué à la figure 4-2, l'effet d'une vitesse de recombinaison en surface sur le profil du courant induit (ou sur le profil de l'efficacité de collecte) a été étudié théoriquement et la probabilité (p) de collecte de charges est donnée par l'expression [Ioannou'82, cavalcoli'91] :

$$\begin{cases} p(x) = 1 & si\ \ x < 0 \\ p(x) = 0 & si\ \ x > 0 \end{cases} \qquad (4\text{-}1)$$

Ces valeurs signifient que si la charge excédentaire émerge en dehors du contact (x > 0), elle est recombinée. Par contre si elle émerge sous le contact dans le plan (x, y) tel que x < 0, elle est collectée par l'électrode métallique.

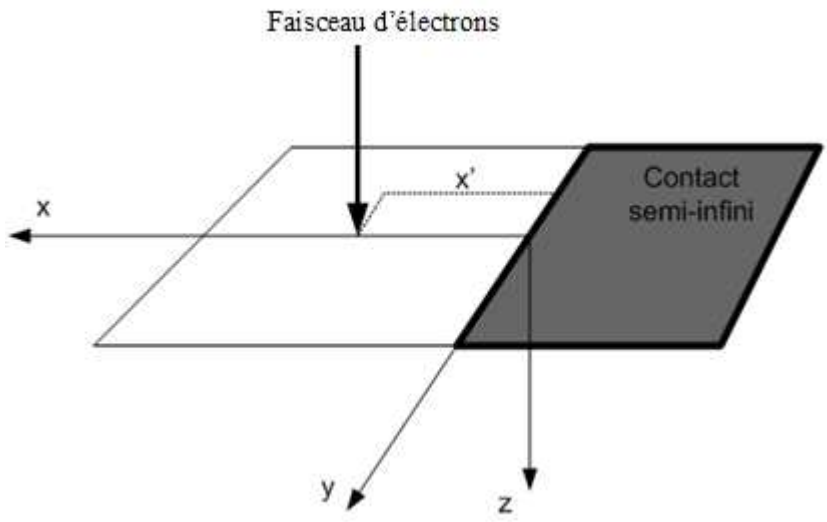


Figure 4-1 : Schéma de principe pour la mesure du courant induit par une électrode de dimension semi-infinie.

Nous avons adapté cette probabilité à notre nano-contact en tenant compte de la symétrie du nano-contact et donc en considérant que tant que la charge excédentaire atteint la surface à une distance inférieure au rayon du contact (circulaire dans le plan (x, y)), celle-ci est collectée, et au delà elle est recombinée. C'est ce que nous avons utilisé en chapitre 3 et c'est ce qu'indique la figure 4-2.

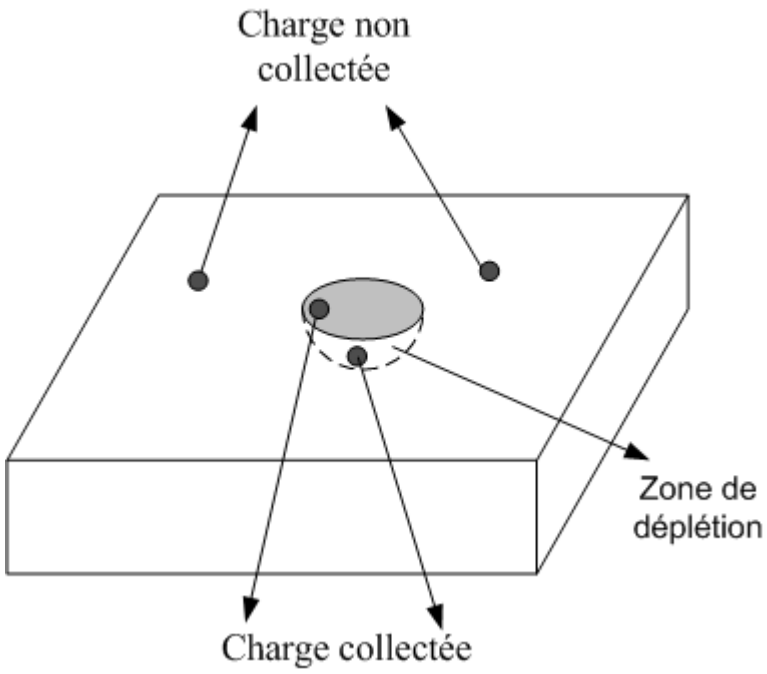


Figure 4- 2: Schéma montrant le principe de collecte des charges excédentaires dans le cas d'une vitesse de recombinaison en surface infinie.

b- Vitesse de recombinaison en surface nulle

Une vitesse de recombinaison en surface nulle ne signifie pas que les charges excédentaires émergeant à la surface vont tôt ou tard atteindre le contact et seront collectées ; cela signifie que leur probabilité de collecte n'est pas forcément égale à l'unité. Cette probabilité va dépendre de la direction aléatoire que la charge va prendre et de sa distance par rapport au bord du contact. Il faudra donc en tenir compte dans les études de simulation. Dans ce qui suit, nous donnons directement les expressions des probabilités de collecte en évitant de redonner des calculs déjà publiés dans les références citées après. Notre objectif est de souligner l'importance du processus de collecte dans les deux cas de figure : contact semi-infini et nano-contact. Pour plus de détails sur le calcul de la probabilité de collecte dans le cas d'un contact semi-infini, voir [Donolato'85, Cavalcoli'91].

- *Cas d'un contact semi-infini*

Ce contact semi-infini est donné à la figure 4-1. La probabilité pour qu'une charge excédentaire émergeant à la surface soit collectée par le contact semi-infini est donnée par [Donolato'85, Cavalcoli'91] :

$$\begin{cases} p(x) = 1 & si\ x \leq 0 \\ p(x) = erfc\left[\left(\frac{1}{L}\ x\right)^{\frac{1}{2}}\right] & si\ x > 0 \end{cases} \qquad (4-2)$$

où *erfc* est la fonction d'erreur complémentaire, *x* la distance séparant la charge du bord du contact semi-infini, et *L* est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en volume.

- *Cas d'un nano-contact*

Dans le cas du nano-contact, on peut considérer que la probabilité p(x) (équation 4-2) pour qu'une charge atteigne un plan semi-infini est pondérée par le rapport des angles $2\alpha/\pi$, c'est-à-dire le rapport entre l'angle 2α sous lequel le nano-contact est vu par la charge et l'angle total π sous lequel la charge voit le contact semi-infini.

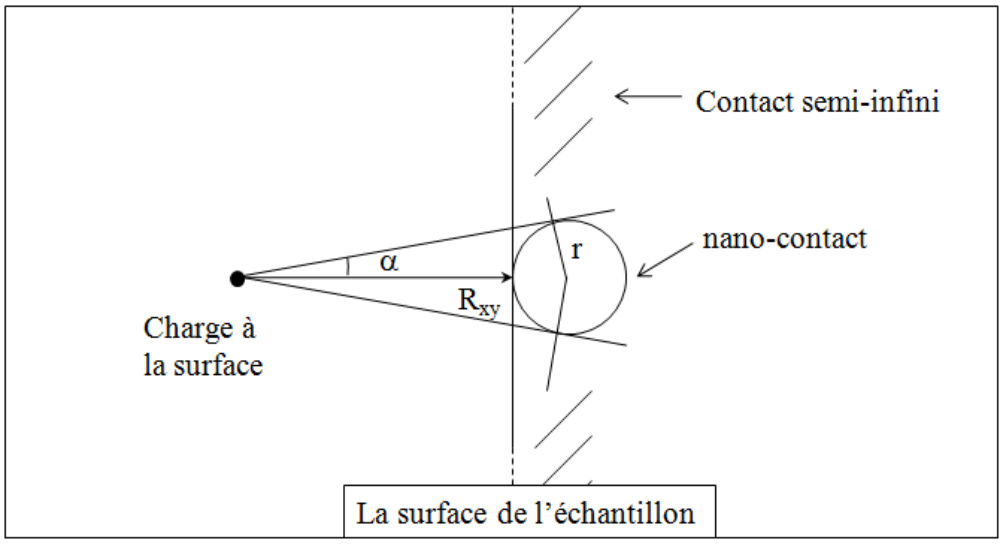


Figure 4-3: Schéma d'analyse de la probabilité de collecte d'une charge excédentaire émergeant à la surface de l'échantillon.

Sur la base du schéma de la figure 4-3, l'équation 4-2 devient:

$$\begin{cases} p(R_{xy}) = 1 & si\ R_{xy} \leq r \\ p(R_{xy}) = \dfrac{2 \times \arcsin\left(\dfrac{r}{R_{xy}+r}\right)}{\pi} \times erfc\left(\sqrt{\dfrac{R_{xy}}{L}}\right) & si\ \ R_{xy} > r \end{cases} \qquad (4-3)$$

où R_{xy} est la distance entre la charge qui émerge à la position (x, y) et le bord du nano-contact (ou bord de la zone de déplétion), r est le rayon du nano-contact et L est la longueur de diffusion en volume des porteurs minoritaires.

La figure 4-4 donne la probabilité pour les deux types de contact : contact semi-infini et nano-contact. Cette probabilité est représentée en fonction de la distance qui sépare la

charge et le bord du contact. Pour ce calcul, le rayon de la zone de déplétion a été fixé à r = 10 nm et L = 1 µm pour les deux types de contact.

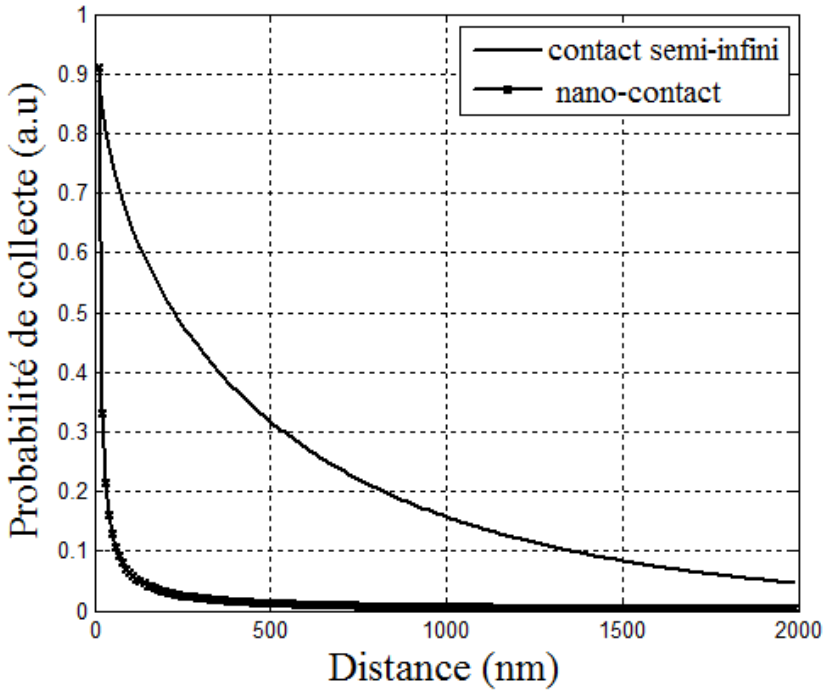


Figure 4-4 : Probabilité de collecte en fonction de la distance pour un contact semi-infini et un nano-contact avec r = 10 nm et L = 1 µm.

II-Efficacité de collecte pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface

1- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur le profil de l'efficacité de collecte

La figure 4-5 donne deux profils de l'efficacité de collecte obtenues l'une à une vitesse de recombinaison en surface nulle et l'autre pour une vitesse infinie dans le cas d'un nano-contact ayant un rayon r = 10 nm placé à une distance d = 100 nm de la ligne balayée par le faisceau électronique. La longueur de diffusion en volume a été fixée à 1 µm. Le faisceau est toujours incliné de 60° par rapport à la surface de l'échantillon irradié pour garder les mêmes

conditions que l'expérience. On note une forte augmentation de l'efficacité de collecte et un élargissement de son profil pour une vitesse nulle ; son maximum pour $v_s = 0$ est environ 4 fois plus important que pour $v_s = \infty$

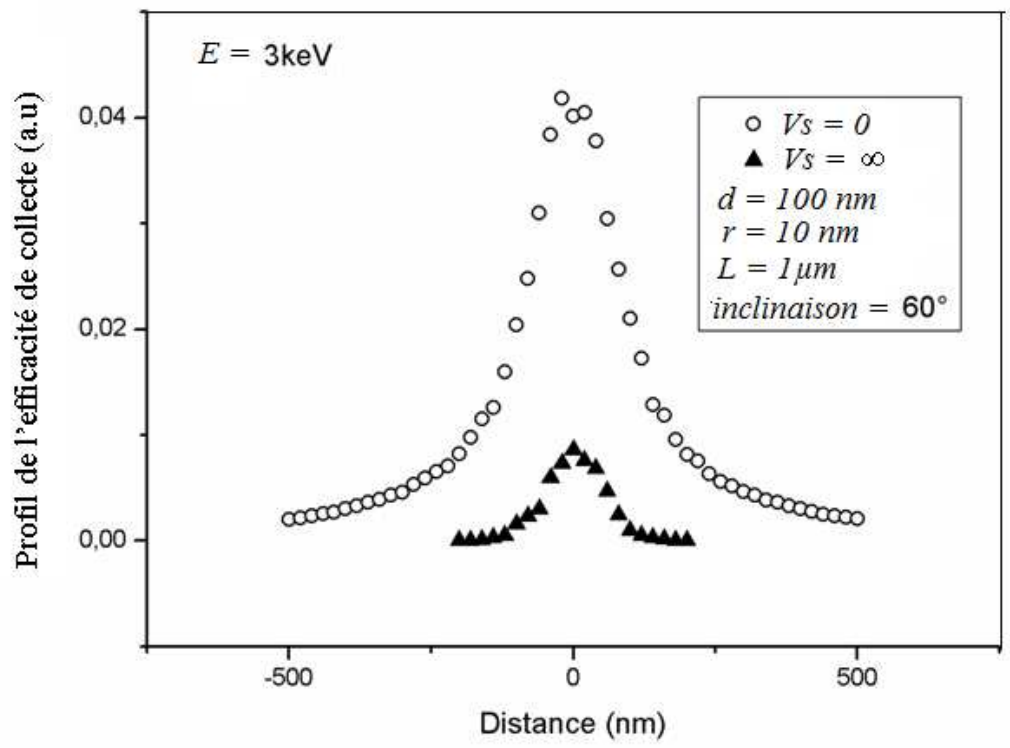


Figure 4- 5: Profil de l'efficacité de collecte pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface.

2- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire

La figure 4-6 donne la variation du maximum de collecte en fonction de l'énergie primaire pour les deux vitesses de recombinaison en surface ; $v_s = 0$ et v_s infinie. Pour ces deux cas extrêmes, le profil semble garder le même comportement, augmentation à basse énergie, passage par un maximum puis diminution du maximum de l'efficacité de collecte à haute énergie.

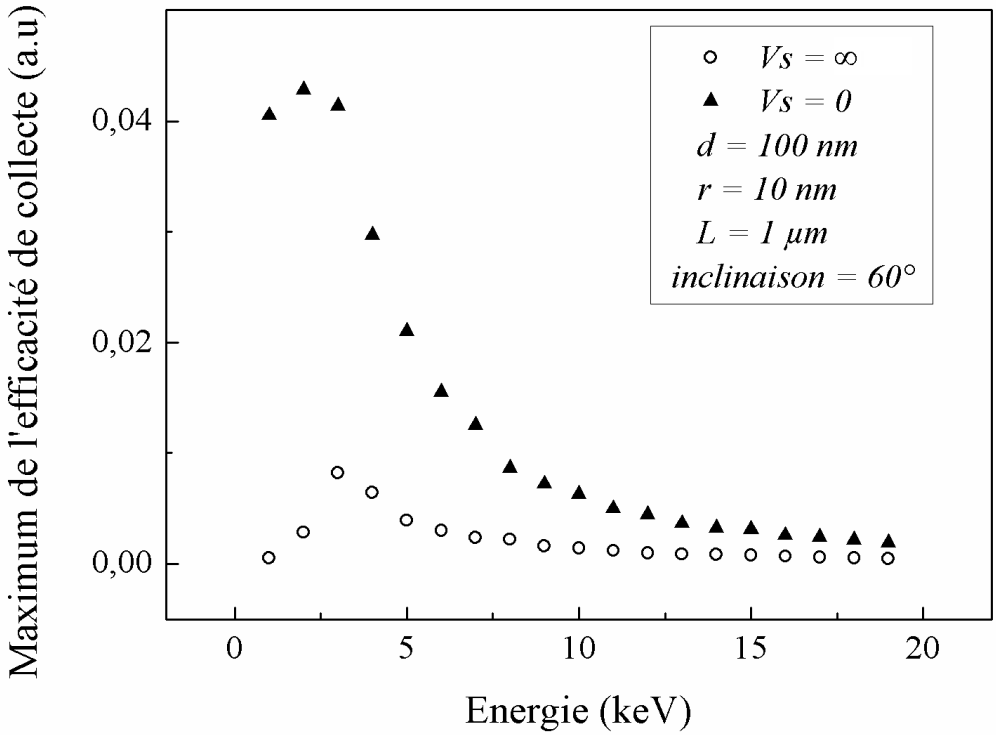


Figure 4-6 : Maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface.

A basse énergie, la rapide augmentation du maximum de l'efficacité de collecte est lié à l'élargissement du volume d'interaction et donc au fait que plus de paires électron-trou sont créées et collectées par la zone de déplétion. Cependant, lorsque l'énergie primaire augmente, la profondeur de pénétration augmente également et un grand nombre de porteurs de charges se recombinent avant d'atteindre la zone de déplétion car la distance à parcourir par les porteurs minoritaires devient grande. Ainsi, l'efficacité de collecte diminue. Notons que ce résultat est en bon accord avec des résultats antérieurs suite à des études de simulations ou à des mesures expérimentales [Leamy'82, Wu'78, Scheer'89, Maurice'93, Ballutaud'02, Yakimov'08, Sieber'09]. Comme déjà remarqué précédemment, le maximum de l'efficacité de collecte est plus élevé pour $v_s = 0$ que pour $v_s = \infty$. L'écart entre les deux courbes se réduit pour les énergies élevées soulignant le fait que pour ces énergies, la profondeur de pénétration devient de plus en plus grande et de ce fait, les recombinaisons en volume augmentent car les porteurs excédentaires parcourent des distances supérieures à leur longueur de diffusion en volume avant d'atteindre le contact. Dans ces conditions, les effets de recombinaison en

surface affectent de moins en moins le processus de collecte des porteurs minoritaires en excès.

III- Détermination de la longueur de diffusion effective à partir d'un profil simulé

1- Procédure d'extraction de la longueur de diffusion effective

Pour déterminer la longueur de diffusion effective, nous avons procédé de la même façon que dans le cas présenté au chapitre 2. La longueur de diffusion effective est déterminée à partir du profil de l'efficacité de collecte, par l'ajustement des points obtenus par simulation. Pour cela, nous avons utilisé le même modèle $exp(-x/L_{eff})$ que celui ayant ajusté nos points expérimentaux [Doan'11]. La figure 4-7 donne un exemple type permettant de déterminer la longueur de diffusion effective. La même procédure a été utilisée pour différentes énergies primaires et pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface.

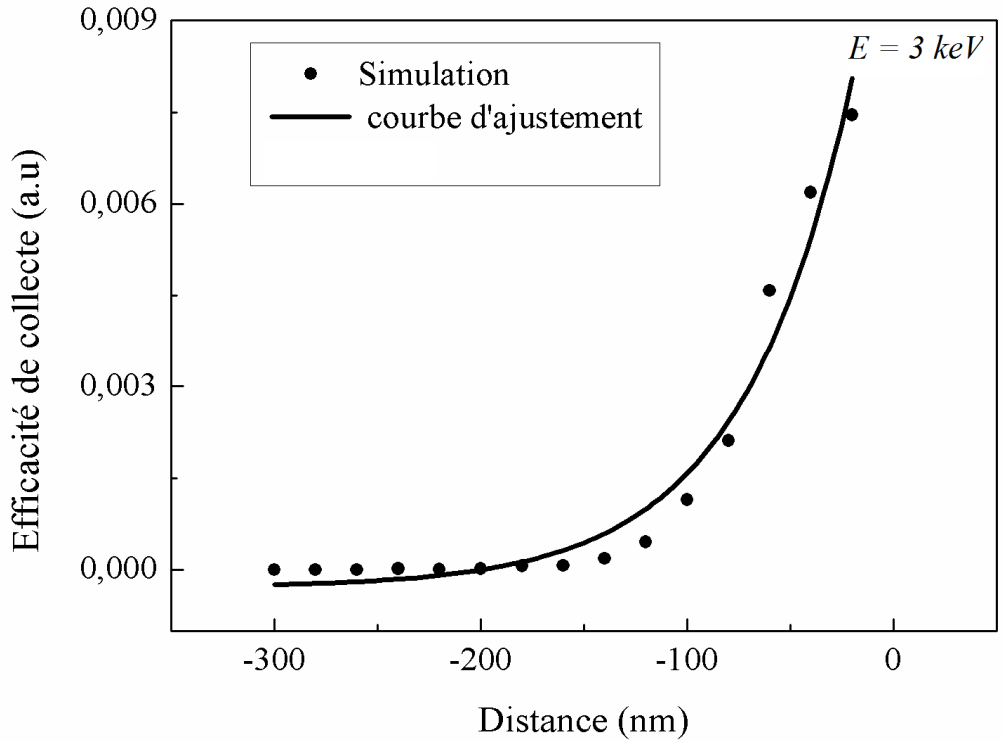


Figure 4-7 : Exemple d'ajustement du profil de l'efficacité de collecte par le modèle théorique $exp(-x/L_{eff})$.

2- Effet de la vitesse de recombinaison en surface sur la longueur de diffusion effective

L'ajustement des points simulés nous a permis d'extraire la longueur de diffusion effective que nous avons représentée en fonction de l'énergie primaire pour les deux vitesses nulle et infinie. La figure 4-8 donne cette longueur en fonction de l'énergie primaire pour un nano-contact avec une zone de déplétion hémisphérique de rayon r = 10 nm, une longueur de diffusion en volume L = 1 µm.

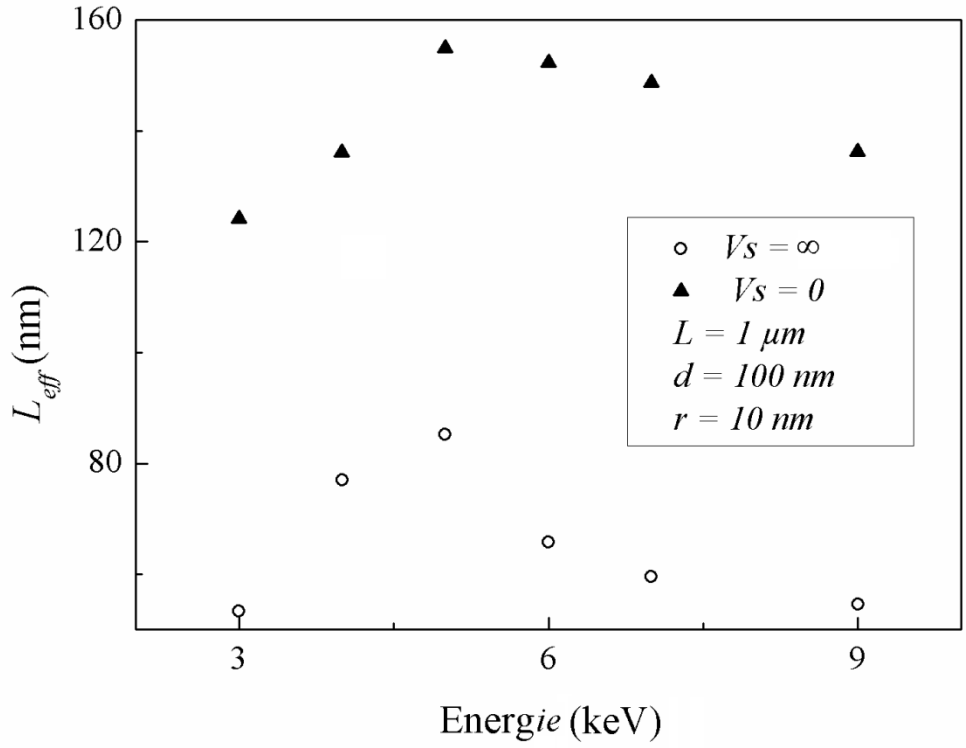


Figure 4-8 : Evolution de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire pour les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface.

Bien que la valeur de L_{eff} soit plus élevée dans le cas d'une vitesse de recombinaison en surface nulle, les deux courbes, pour les deux vitesses, présentent néanmoins le même comportement ; elles augmentent, atteignent un maximum et puis diminuent, comme le maximum de l'efficacité de collecte. Remarquons que même dans le cas d'une vitesse nulle (probabilité de recombinaison en surface faible), le maximum de L_{eff}, environ 160 nm, reste très en deçà de la longueur de diffusion en volume qui a été fixée à 1 µm dans la simulation.

3- Evolution de la longueur de diffusion effective en fonction de l'énergie primaire pour un contact de très grande dimension et comparaison avec le nano-contact

L'effet du type de contact est bien souligné dans les figures 4-9 et 4-10. Nous avons effectué des simulations pour le contact de grande dimension ayant une zone de déplétion de même taille que celle du nano-contact (r = 10 nm) et pour deux dispositions différentes du contact par rapport à la direction du faisceau électronique, c'est-à-dire perpendiculaire ou parallèle au faisceau, qui sont les deux dispositions utilisées en EBIC classique pour mesurer la longueur de diffusion.. Etant donné que l'effet de la vitesse n'affecte par le comportement de l'évolution de la longueur de diffusion, mais seulement sa valeur, nous nous sommes limités au cas de la vitesse infinie. Dans le cas du contact de grande dimension, le faisceau électronique se déplace perpendiculairement au contact (x est la distance entre le point d'impact du faisceau et le bord du contact). On note que, quel que soit le type de contact, le comportement de l'évolution de la longueur de diffusion effective est le même ; elle croît, passe par un maximum puis diminue, mais le maximum est atteint pour une énergie plus élevée dans le cas d'un contact semi-infini (figure 4-9) et encore plus élevée pour le macro-contact parallèle au faisceau (figure 4-10). Dans le cas du contact semi-infini perpendiculaire au faisceau le maximum est à 13 keV, alors que pour le contact parallèle au faisceau le maximum se situe à 24 keV. Ceci est certainement lié à l'augmentation de l'efficacité de collecte (à une distance x donnée) lorsque le contact est large, qui compense sa diminution lorsque la distance entre contact et centre de génération des charges augmente avec l'accroissement de l'énergie du faisceau. Dans le cas du contact parallèle au faisceau, le maximum se produit à une énergie plus élevée pour la raison simple que le centre de génération des charges reste à la même distance de l'électrode collectrice quand l'énergie augmente, ce qui n'est pas le cas pour le contact semi-infini perpendiculaire au faisceau.

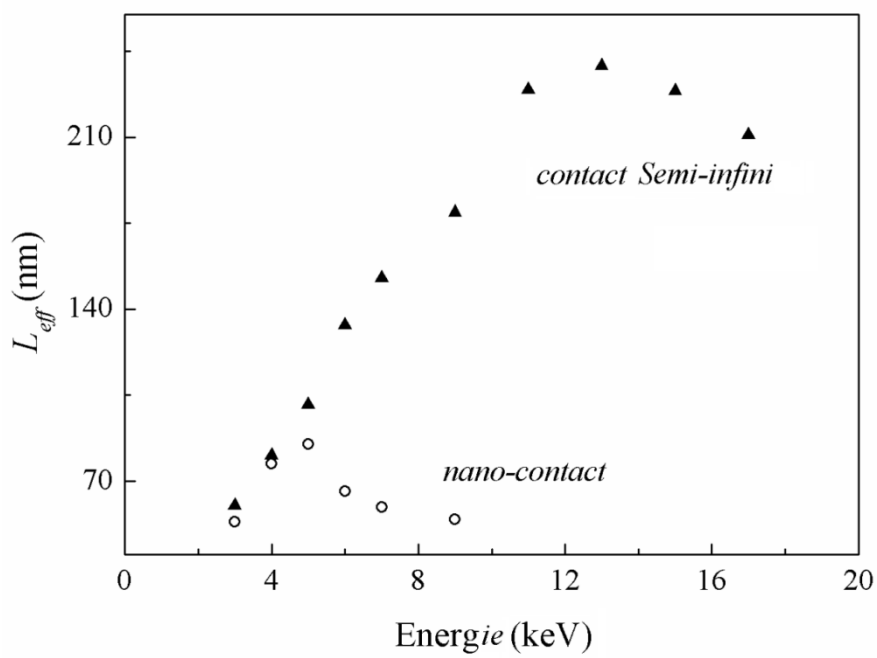


Figure 4-9 : Evolution de la longueur de diffusion effective pour un nano-contact et un contact semi-infini pour L = 1 µm, r = 10 nm et $v_s = \infty$.

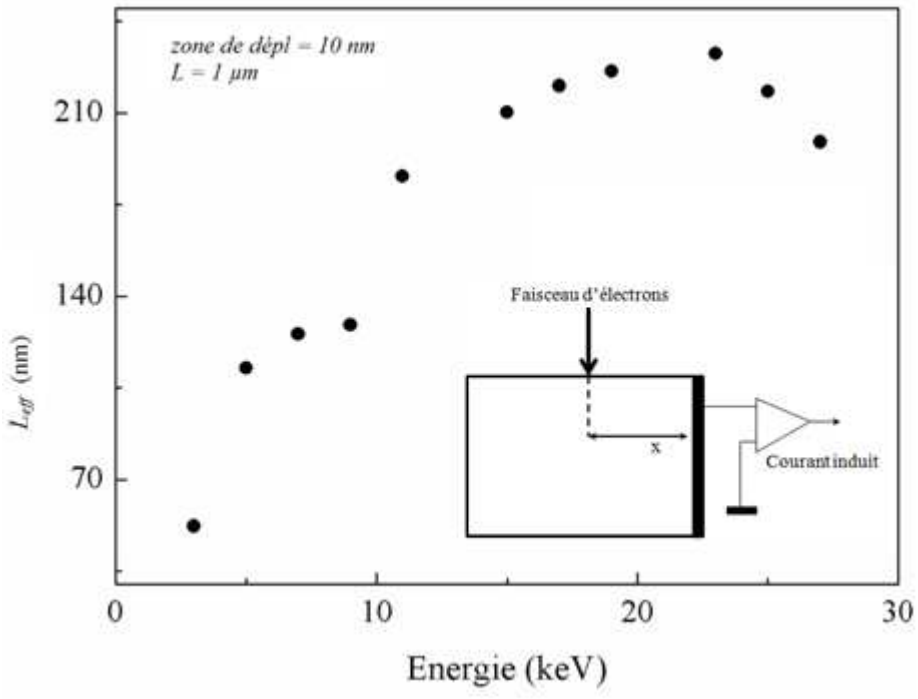
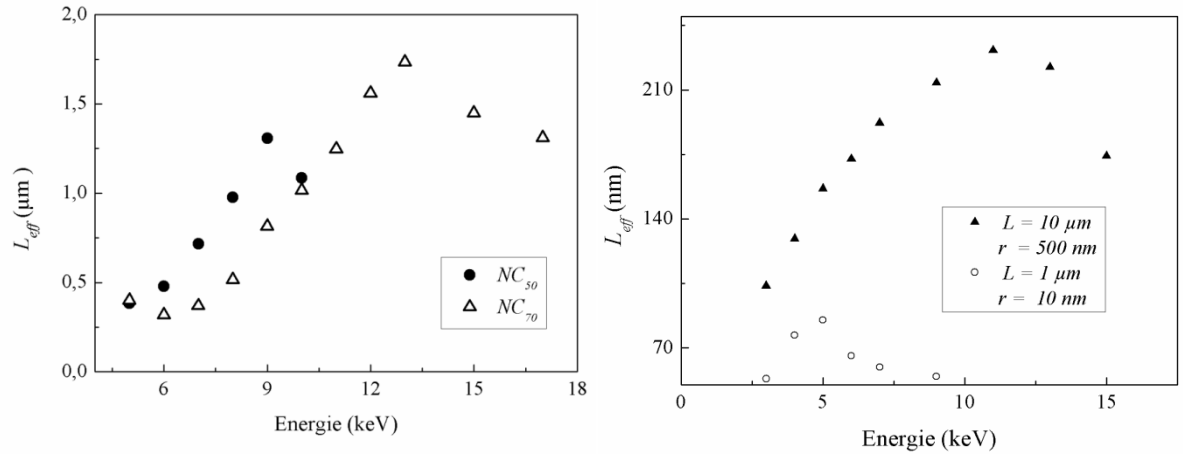


Fig. 4-10. Evolution de L_{eff} en fonction de l'énergie primaire pour un contact de grande dimension dans la configuration parallèle au faisceau électronique.

4- Comparaison et discussion des résultats simulés et expérimentaux

Nous reproduisons dans la figure 4-11 ci-dessous les résultats expérimentaux déjà présentés en figure 2-16 pour les comparer aux résultats de la simulation du paragraphe précédent et également à deux simulations faites pour des longueurs de diffusion en volume (1 et 10 µm) et pour deux rayons de zone de déplétion différents (10 et 500 nm).



(a) (b)

Fig. 4-11. Evolution de L_{eff} en fonction de l'énergie montrant l'effet de la taille des nanocristaux lors de mesures expérimentales (a), et son évolution extraite de résultats simulés pour deux valeurs de *L* (longueur de diffusion en volume) et deux valeurs de *r* (rayon du nano-contact).

Plusieurs remarques importantes peuvent être faites. La première est que la simulation numérique confirme nos résultats expérimentaux, à savoir que L_{eff} croît, passe par un maximum, puis ensuite décroît lorsque *E* augmente. La seconde remarque est que ce comportement de L_{eff} n'est pas spécifique du nano-contact puisque le même comportement se produit pour le contact semi-infini (Cf. figure 4-10). Cette évolution de L_{eff} avec l'énergie primaire n'a jamais été mise en évidence dans la littérature pour le cas du nano-contact, et pour cause puisque nous sommes la seule équipe à pratiquer la nano-EBIC. Elle n'a jamais

non plus été remarquée dans le cas de l'EBIC classique à notre connaissance. Nous l'avons déjà souligné au chapitre II, seules deux publications, [Jastrzebski'75] et [Miyajima'98], montrent que L_{eff} augmente avec E mais sans mettre en évidence la décroissance au-delà d'un certain seuil d'énergie. Il est probable que ces auteurs ne l'aient pas mis en évidence dans la gamme d'énergie qu'ils ont utilisée pour des raisons qui sont vraisemblablement liées à leurs conditions expérimentales particulières, c'est-à-dire la valeur de la longueur de diffusion en volume de leur échantillon et notamment la hauteur de la zone de déplétion qui joue également un rôle important dans le déplacement du maximum de la courbe comme le montre la figure 4-11b.

Il faut aussi remarquer, c'est un point de questionnement très important, que dans la très grande majorité des publications relatives à la mesure de longueur de diffusion obtenus par la technique EBIC classique basée sur l'exploitation du profil du courant induit, les auteurs ont l'air d'ignorer que la quantité mesurée est la longueur de diffusion effective et non pas la longueur de diffusion en volume. Compte tenu que L_{eff}, quantité mesurée, varie avec l'énergie primaire on peut donc se poser la question de la validité des valeurs indiquées dans ces publications. Quelques auteurs ont conscience qu'ils mesurent L_{eff}, et même que celle-ci varie avec l'énergie primaire, mais bizarrement ne commentent pas leurs mesures et se contentent en général de donner un résultat à une énergie donnée, généralement la plus élevée.

La simulation numérique nous a permis également de confirmer nos hypothèses développées au chapitre II, concernant les résultats expérimentaux obtenus pour des tailles de NCs différentes. Dans la première partie croissante de la courbe les NCs de 70 nm ont une L_{eff} plus petite que les NCs de dimension 30 nm. Ceci est dû au fait qu'ils stockent mieux les charges en surface, ce qui est équivalent à une vitesse de recombinaison en surface plus grande et donc à une L_{eff} plus faible comme montré dans le figure 4-9. Par ailleurs le maximum de la courbe pour NC_{70} se décale vers les énergies plus grandes parce que la zone de déplétion sous les NCs de plus grande dimension est également plus grande, ce qui est confirmé sur la figure 4-11b.

IV- Conclusion

Ce chapitre a été essentiellement consacré à l'effet de la vitesse de recombinaison en surface sur le profil de l'efficacité de collecte du courant induit et en conséquence de ceci, sur l'évolution et la valeur de la longueur de diffusion effective. Pour ce faire, nous avons procédé à des simulations en introduisant les deux cas extrêmes de la vitesse : $v_s = 0$ et $v_s = \infty$. L'influence de la dimension de la zone de déplétion sous le nano-contact a également été mise en évidence dans cette étude. Grâce à l'introduction d'une probabilité de collecte basée sur l'expression donnée par Donolato pour un contact semi-infini [Donolato'85] et pour $v_s = 0$, nous avons montré que le profil de l'efficacité de collecte chute de façon moins rapide que pour $v_s = \infty$ et, de ce fait, que la longueur de diffusion effective présente des valeurs plus élevées bien que le comportement de son évolution reste le même pour les deux vitesses. Le maximum de l'efficacité de collecte est plus élevé pour $v_s = 0$ que pour $v_s = \infty$ lorsque l'énergie primaire est basse, puis les efficacités sont équivalentes à haute énergie, soulignant le fait que les effets de recombinaison en surface ont beaucoup moins d'effet aux énergies primaires élevées. Nous notons aussi que l'évolution de la longueur de diffusion effective garde le même comportement quelles que soient la taille du contact et la valeur de la vitesse de recombinaison en surface.

Enfin, le point le plus important de cette étude est le fait que nos simulations vérifient nos résultats expérimentaux et permettent d'expliquer les différences de comportement liés aux dimensions des nanocristaux de germanium. Le second point important est d'avoir mis en évidence que la longueur de diffusion effective, quantité accessible à la mesure par la méthode utilisée, dépend de l'énergie primaire du faisceau électronique : elle croît, passe par un maximum, puis décroît quand l'énergie augmente. Ce comportement n'est pas spécifique du nano-contact mais se produit également pour les contacts de grande dimension utilisés en EBIC classique et ceci quelle que soit la disposition du contact, parallèle ou perpendiculaire au faisceau électronique. La position du maximum de L_{eff} est liée à la nature du contact et sa disposition par rapport au faisceau électronique, ainsi qu'à la valeur de la longueur de diffusion en volume et à la dimension de la zone de déplétion.

Bibliographie

[Ballutaud'02] D. Ballutaud, A. Rivière, M. Rusu, S. Bourdais and A. Slaoui., Thin Sol. Film., 403-404, 549(2002).

[Cavalcoli'91] D. Cavalcoli, A. Cavallini and A. Castaldini., J. Appl. Phys., 70, 2163(1981).

[Doan'11] Q.T. Doan, A. El Hdiy and M. Troyon., J. Appl. Phys., 110, 024514(2011).

[Donolato'85] C. Donolato., Appl. Phys. Lett., 43, 120 (1983).

[Donolato'85] C. Donolato., Solid-State Electronics., 28, 1143(1985).

[Dunbar'77] P. M. Dunbar and J. R. Hauser., Solid State electron, 20, 697(1977).

[Fossum'73] H. J. Fossum and B. Ancker-Johnson., Phys. Rev B., 8, 2850(1973).

[Fossum'78] J. G. Fossum and E. L. Burgess., Appl. Phys. Lett., 33, 238(1978).

[Hakimzadeh'92] R. Hakimzadeh, H. J. Möller and S. G. Bailley., J. Appl. Phys., 72, 2919(1992).

[Hall'52] R. N. Hall., Phys. Rev., 87, 387 (1952).

[Hangleiter'90] A. Hangleiter and R. Häcker., Phys. Rev. Lett., 65, 215 (1990).

[Ioannou'82] D. E. Ioannou and C. A. Dimitriadis., IEEE Transaction on Elec. Dev., 29, 445(1982).

[Jastrzebski'75] L. Jastrzebski, J. Lagowski and H. C. Gatos., Appl. Phys. Lett., 27, 537 (1975)

[Kittler'91] M. Kittler, J. Lärz, W. Seifert, M. Seibt and W. Schröter., Appl. Phys. Lett., 58, 911(1991).

[Kurniawan'06] O. Kurniawan and V. K. S. Ong., Solid-state Electronics, 50, 345(2006).

[Kveder'01] V. Kveder, M. Kittler and W. Schröter., Phys. Rev B., 63, 115208(2001).

[Leamy'82] H. J. Leamy., J. Appl. Phys., 53, R51(1982).

[Ledra'09] M. Ledra and N. Tabet., Superlattices and Microstruct., 45, 444(2009).

[Luke'85] K. L. Luke, O. Von Roos and L. Cheng., J. Appl. Phys., 57, 1978(1985).

[Luke'94] K. L. Luke., J. Appl. Phys., 73, 1623(1994).

[Marti'04] A. Martí, L. Cuadra, N. López and A. Luque., Semiconductors., 38, 946(2004).

[Maurice'93] J.L. Maurice., J. Phys. III, 3, 603(1993).

[Redfield'78] D. Redfield, Appl. Phys. Lett., 33, 531(1978).

[Rossetti'82] R. Rossetto and L. Brus., J. Phys. Chem., 86, 4470(1982).

[Sah'58] C-T. Sah and W. Shockley., Phys. Rev., 109, 1103 (1958).

[Scheer'89] R. Scheer, M. Wilheim and H.J. lewrenz., J. Appl. Phys., 66, 5412(1989).

[Seifert'96] W. Seifert, M. Kittler and J. Vanhellemont., Mat. Sci. Eng., 42, 260(1996).

[Shibib'67] M. A. Shibib, F. A. Lindhilm and J. G. Fossum, IEEE Trans. Electron Device , 26, 1104(1967).

[Shockley'52] W. Shockley and W. T. Read., Phys. Rev., 87,835(1952).

[Sieber'09] B. Sieber, CM. Ruiz and V. Bermudez., Superlatt. Microstruc., 45,161(2009).

[Wu'78] C.J. Wu and D.B. Wittry., J. Appl. Phys., 49, 2827(1978).

[Yakimov'08] E.B. Yakimov, P.S. Vergeles, A.Y. Polyakov, N.B. Smirnov, A.V. Govorkov, In-H. Lee and C.R. Lee., Appl. Phys. Lett., 92, 042118/1-3(2008).

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

La caractérisation de nanomatériaux par de nouvelles techniques fait partie depuis quelques décennies des défis dont les chercheurs ont réussi à débloquer les verrous. L'avènement de la microscopie de proximité a permis d'aller de l'avant pour améliorer la caractérisation en résolution et en finesse. Notre travail s'insère dans cette démarche. En effet, suite à l'utilisation d'une technique combinant un microscope électronique à balayage (MEB) et un microscope à force atomique utilisé en mode conductif (C-AFM), nous avons pu étudier des nanocristaux (NCs) de Ge. Cette étude a concerné l'analyse du transport de charge dans le cadre de l'application de la technique nano-EBIC (EBIC : courant induit par bombardement électronique). La technique nano-EBIC s'avère bien adaptée par sa très haute résolution à la caractérisation de nanostructures. C'est pourquoi, nous l'avons utilisée pour effectuer des images et des profils EBIC sur deux structures Si/SiO_2 contenant chacune sur sa surface des nanocristaux de Ge non recouverts. Les profils du courant collecté par la pointe conductrice de l'AFM dans la chambre objet du MEB sont affectés par les caractéristiques du faisceau électronique (énergie d'accélération et courant de sonde), par celles des nanocristaux et aussi par la nature du contact établi entre la pointe de l'AFM et la surface de l'échantillon étudié. Ces profils nous ont permis de déterminer la longueur de diffusion effective ; paramètre physique important puisqu'il conditionne l'efficacité de transport et de recombinaison des porteurs minoritaires. Vu la complexité de la nature du contact, nous devions d'abord identifier le type de porteurs de charge impliqués dans le transport ; ce qui a été fait par l'introduction d'un diagramme de bandes d'énergie du système pointe/NC/oxyde/Si. A défaut de présenter une résolution analytique des équations de continuité qui nous permettraient d'accéder entre autres paramètres à la détermination de la longueur réelle de diffusion, nous avons préféré appliquer des modèles connus que l'on ajuste aux points expérimentaux pour déterminer la longueur de diffusion effective. Cette longueur de diffusion effective augmente en fonction de l'énergie primaire –résultat déjà connu- mais décroît après être passé par un maximum, contrairement aux quelques résultats de la littérature ayant présenté ce point dans le cadre de la technique EBIC classique. Deux informations intéressantes ont été révélées par ce comportement ; le premier est que les deux échantillons étudiés expérimentalement ne donnent pas le même maximum, et le deuxième point est que ce maximum est obtenu pour deux énergies seuils différentes. Signalons que le comportement de variation de la longueur de diffusion effective décrit dans ce manuscrit a été obtenu pour la première fois. Nous avons

décrit ce comportement vis-à-vis des paramètres qui l'affectent, à savoir : la taille des NCs, la dimension de la nano-zone de déplétion établie sous le contact, et l'énergie primaire.

Pour compléter ces résultats expérimentaux et notamment les expliquer, nous avons procédé à une étude de simulation basée sur des processus probabilistes pour décrire la diffusion des électrons primaires dans le volume de l'échantillon cible et pour décrire aussi les phénomènes de diffusion, de recombinaison et de collecte par la pointe AFM des porteurs de charges créées. Plusieurs paramètres ont été introduits dans cette simulation Monte- Carlo tri-dimensionnelle. Nous avons tenu compte de la taille et de la forme de la zone de charge générée sous un nano-contact dont on peut changer la dimension. Les effets de recombinaison en surface, qui peuvent affecter fortement le processus de collecte du courant induit, ont été étudiés. Notre configuration basée sur la présence d'un nano-contact a été comparée à des études que nous avons menées en utilisant des configurations standards, qui sont caractérisées par un contact semi-infini et par deux orientations de l'électrode de contact (dans le cas d'une diode Schottky) ; l'électrode est soit parallèle soit perpendiculaire à l'axe du faisceau électronique. Les effets de recombinaison en surface sont représentés par la valeur de la vitesse de recombinaison. Pour les études de simulation, nous avons considéré les deux cas extrêmes, une vitesse infinie (recombinaison de toute charge qui émerge à la surface), vitesse nulle (la charge émergeant à la surface a une probabilité non nulle pour être collectée). Pour le cas caractérisé par une vitesse nulle, sur la base d'une expression de la probabilité de collecte donnée par Donolato, nous avons proposé une expression qui tient compte de la dimension du nano-contact et de l'angle d'ouverture à partir duquel la charge excédentaire « voit » le contact.

Plusieurs points ont été révélés et qui complètent nos données expérimentales. En effet, quelle que soit la dimension du contact ou la configuration choisie (contact parallèle ou perpendiculaire à l'axe du faisceau) en simulation, l'évolution de la longueur de diffusion en fonction de l'énergie primaire a le même comportement, c'est-à-dire qu'elle passe par un maximum qui dépend de la dimension de la zone de déplétion. Les effets de recombinaison en surface affectent la valeur mais ne causent pas de changement au comportement de la variation de cette longueur.

Bien que l'étude de simulation nous ait aidés à comprendre un certain nombre de processus, il n'en est pas moins qu'il manque des informations à la fois au niveau expérimental et au niveau de la simulation. Au niveau expérimental, il aurait été intéressant

d’utiliser d’autres échantillons ayant des nanocristaux d’une taille plus ou moins grande par rapport aux échantillons étudiés afin de mieux cerner l’effet de la taille (du NC ou de la zone de déplétion) sur la valeur et l’allure de la longueur de diffusion effective. Quant au niveau de la simulation, il serait intéressant dans un avenir proche de trouver comment tenir compte des valeurs intermédiaires de la vitesse de recombinaison en surface. Celles-ci pourraient apporter une information qui pourrait être liée au phénomène de piégeage dans les nanocristaux. Car n’oublions pas que ce processus de piégeage (ou d’émission) affecte la valeur de la longueur de diffusion.

PUBLICATION

- **Q. T. Doan**, A. El Hdiy, and M. Troyon " *Electron beam energy and Ge nanocrystal size effects on the minority carrier diffusion length measured by the nano-electron beam induced current technique*", **J. Appl. Phys. 110, 024514 (2011)**.
- **Q. T. Doan**, A. El Hdiy, and M. Troyon "*Three-dimensional simulation of electron beam induced current collected by a nano-contact: Diffusion and collection analysis*", **J. Appl. Phys. 110, 124515 (2011)**.
- A. El Hdiy, M. Troyon, K. Gacem and **Q.T. Doan**, 10ème chapitre de l'ouvrage "*Nanocrystal*", **dirigé par Yoshitake Masuda, Publié par SCIYO**.

COMMUNICAION

- **Q.T. Doan**, A. El Hdiy, M. Troyon, M. Ledra and Tabet., "*Monte-Carlo simulation of the electron beaminduced current collected by a nano-contact "*, **NANOSMAT-5 (10/2010)**.
- **Q.T. Doan**, A. El Hdiy, M. Troyon, A. Ronda, I. Berbezier., "*Local characterization of Ge Nanocrystals by C-AFM and nano-EBIC techniques*", **NANOSMAT-5 (10/2010).**
- **Q.T. Doan**, A. El Hdiy, *" Etude de nanocristaux de Ge par la technique Nano EBIC et C-AFM "*., **JNMO-2010**.