

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Hadj Lakhdar - BATNA 1

Faculté des Sciences de la Matière

Département de Physique



# THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du  
Diplôme de Doctorat

par :

**Elateche Zahia**

Thème :

**Etude des nanostructures de silicium par la technique EBIC**

*Spécialité : Physique des matériaux métalliques et semiconducteurs*

Soutenue le : 12 / 12 / 2021

**Devant le jury :**

Présidente :	Adjaj Fouzia	Professeur	U.Batna 1
Rapporteur :	Fortaki Tarek	Professeur	U.Batna 2
Examineurs :	Kerboub Abdelhak	MCA	U.Batna 1
	Mahamdi Ramdan	Professeur	U.Batna 2
	Bedra Sami	Professeur	U.Khenchela

# *Remerciements*

## *Remerciements :*

Je tiens à exprimer ma grande reconnaissance et ma profonde gratitude à l'égard du Professeur **Mohamed Salah Aida** qui ma témoigné tant de compréhension et qui ma encouragé et soutenu tout au long de la réalisation de ce modeste travail.

Mes remerciements vont également a monsieur **Tarek Fortaki** -professeur à l'université Batna 2- qui a accepté de bon cœur d'être mon encadreur et que je suis très reconnaissante pour son enthousiasme et sa confiance.

J'adresse ma vive reconnaissance envers madame **Fouzia Adjaj** - professeur à l'université Batna 1- d'avoir accepté de présider le jury. Je la remercie également d'avoir pris le temps de lire d'un œil critique ce manuscrit.

Je remercie également monsieur **R. Mahamdi** - Professeur à l'université batna2-, monsieur **S. Bedra** - Professeur à l'université de Khenchela- et monsieur **A.Kerboub** - MCA à l'université Batna1- qui ont bien voulu m'honorer de leur présence et assister à la soutenance de ma thèse.

Je tiens à exprimer ma grande gratitude envers Professeur **Abdelillah EL HDIY** de l'université de Reims pour son aide, sa grande disponibilité... qui a été toujours là pour me faire bénéficier de ses conseils.....un grand Merci pour un très très très grand Monsieur.

Je tiens aussi a remercier les docteurs **M.Chikhi, A.Merdaci, T.Boukhemkhem** et **S.Benabderezzak** pour leur présence a mon coté.

# *Sommaire*



# Sommaire :

Introduction générale.....	2
----------------------------	---

## Chapitre I : Notions et principes fondamentaux

### 1- Interaction électron -matière

1-1-Introduction.....	6
1-2-Trajectoires des électrons incidents.....	7
1-3- Les différentes émissions lors des interactions.....	8
1-4- Etude des mécanismes d'émissions électroniques.....	9
1-5- Distribution énergétique.....	14
1-6- Résolution spatiale.....	15
1-7- Fonction de dissipation d'énergie .....	15
1-8- Volume de génération.....	18
1-9- Le maximum de la profondeur de pénétration (parcours entier).....	19
1-10- Le mode imagerie.....	21
1-11- Génération des porteurs de charge.....	22

### 2- Technique EBIC

2-1- Introduction.....	26
2-2- Historique.....	26
2-3- La microscopie électronique à balayage (MEB).....	27
2-4- L'EBIC classique.....	30
2-5- Les différentes géométries.....	32
2-6- Les applications de l' EBIC.....	33
2-7- De l'EBIC classique au nano-EBIC .....	34

### 3- Le Silicium

3-1- Introduction.....	37
3-2- Historique.....	37
3-3- Applications.....	37
3-4- Propriétés du silicium.....	38
3-5- Le silicium nanostructuré.....	40
3-6- Effet de la vitesse de recombinaison en surface.....	41

#### **4- La méthode Monté Carlo**

4-1- Introduction.....	42
4-2- Historique.....	42
4-3- Principe.....	43
4-4- Nombres aléatoires .....	43
4-5- Génération de nombres aléatoires.....	44

### **Chapitre II : Modélisation**

1- Introduction.....	47
2- Aperçu général sur des études antérieures.....	48
3- Le générateur des nombres aléatoires utilisé.....	50
4- Les principes physiques du modèle.....	52
5- Elaboration du modèle.....	60
5-1-Simulation de l'interaction électron -matière.....	60
5-1-1-Simplifications.....	60
5-1-2-Collisions des électrons primaires avec l'échantillon.....	60
5-1-3-Les trajectoires des électrons primaires.....	63
5-1-4-Le maximum de la profondeur de pénétration.....	65
5-1-5-Les électrons rétrodiffusés.....	66
5-1-6-Les électrons transmis.....	67
5-1-7-La perte d'énergie.....	67
5-1-8-Les électrons secondaires.....	68
5-1-9-L'émission électronique totale.....	69
5-1-10-Programme de simulation .....	69
5-2- Simulation du signal EBIC.....	72
5-2-1-Profil de distribution des paires.....	72
5-2-2-Trajectoires des charges minoritaires.....	74
5-2-3-Description du protocole de mesure.....	75
5-2-4-Collecte des charges minoritaires.....	77
5-2-5-Le courant EBIC.....	82
6- L'échantillon étudié.....	83
7- Conclusion.....	84

## Chapitre III : Résultats et discussion

1- Introduction.....	86
2- Simulation de l'interaction électron-matière.....	87
2-1- Trajectoires des électrons.....	87
2-2- Le maximum de la profondeur de pénétration.....	92
2-3- Les électrons transmis.....	96
2-4- Les électrons rétrodiffusés.....	98
2-5- La perte d'énergie.....	102
2-6- Les électrons secondaires.....	104
2-7- L'émission électronique totale.....	108
3- Simulation du signal nano-EBIC.....	110
3-1- Le profil de distribution des paires.....	110
3-2- L'efficacité de collecte.....	114
3-3- Le courant nano-EBIC.....	124
3-4- L'extraction de la longueur de diffusion des minoritaires.....	127
4- Conclusion.....	130
Conclusion générale.....	132
Références.....	135
Perspectives.....	140
Annexes.....	142

# *Introduction générale*

## *Introduction générale :*

Depuis la conférence de R. Feynman en 1959 intitulée « There's plenty of room at the bottom » (Il ya beaucoup de place en bas), l'objectif est devenu la compréhension des phénomènes au niveau de l'ordre du *nanomètre* [ $10^{-9}$ m :milliardième du mètre]. Les progrès de la technologie électronique sont orientés vers une miniaturisation de plus en plus avancée, afin d'améliorer la rapidité de réponse des circuits et réduire la dissipation d'énergie, c'est une révolution scientifique, ouvrant un volet à des applications futuristes.

Les nanostructures à base des semiconducteurs, constituent le cœur de ces travaux et en particulier celles du silicium pour ses différentes propriétés très intéressantes. En effet, bien que des nombreuses études ont été faites à ce jour sur cet élément, il reste un champ d'investigation relativement vaste à l'échelle nanométrique.

Pour ce faire, l'une des techniques les mieux appropriées pour déterminer des paramètres physiques caractéristiques des semiconducteurs, est la technique EBIC (Courant induit par faisceau électronique). Cette technique, sous sa forme classique, ne peut permettre une étude claire aux dimensions nanométriques. 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). Cette combinaison s'appelle la *nano-EBIC* ou encore l'EBIC en champ proche.

La simulation est la réalisation d'une grande partie de la recherche sous forme de modèles numériques. Ces derniers permettent de déterminer des grandeurs inaccessibles par l'expérience.

La méthode Monté Carlo est couramment utilisée pour résoudre des problèmes mathématiques ou physiques complexes, auxquels les calculs analytiques ne peuvent apporter de solution. Elle est particulièrement adaptée aux trajets des particules dans la matière à cause de la nature stochastique des processus d'émission et de détection.

Pour ces raisons on a voulu consacrer notre travail à :

« L'étude des nanostructures de silicium par la technique EBIC ».

Le manuscrit sera donc présenté de la manière suivante :

Le premier chapitre : donne une description de l'interaction électron-matière qui est la base de la microscopie électronique à balayage, en traitant les deux types de collisions, élastique et inélastique ainsi que le phénomène de recombinaison. Puis, il donne un rappel théorique sur les notions fondamentales de la technique EBIC qui n'est d'autre que le noyau sur lequel nous allons appuyer pour effectuer notre étude.

Après, il nous a fallu bien rappeler quelques propriétés du silicium qui vont influencer cette étude. On a choisi ce matériau pour sa place dominante par rapport aux autres matériaux semiconducteurs.

La dernière partie de ce chapitre sera destinée à la méthode Monte Carlo, qui est la méthode stochastique la plus utilisée pour simuler les phénomènes aléatoires qui dominent le domaine du transport des particules au sein de la matière.

Le deuxième chapitre : va présenter les bases physiques qui nous ont permis d'élaborer notre modèle (qui est l'intérêt majeur de cette thèse) en précisant les différentes étapes et scripts du programme Fortran élaboré (un calcul numérique a été réalisé pour étudier quelques propriétés qui caractérisent des échantillons en silicium à l'échelle nanométrique en appliquant la technique EBIC).

Le troisième chapitre : présente les résultats des calculs concernant les trajectoires des électrons primaires, la profondeur de pénétration, l'émission rétrodiffusée et secondaire, le profil de distribution des paires générées, l'efficacité de collecte et le courant collecté (profil et maximum).

Une étude de l'influence de quelques paramètres: l'énergie primaire, l'angle d'incidence, la vitesse de recombinaison en surface, la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires, la zone de déplétion et la taille du nano-contact....etc. sur ces résultats va être exploitée.

Une comparaison avec les résultats d'autres chercheurs va être faite pour valider les nôtres. Cette comparaison va nous aider à réaliser des ajustements pour l'extraction de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires, qui est parmi les paramètres les plus importants lors de la caractérisation d'un semiconducteur.

À la fin de ce manuscrit, nous présenterons notre conclusion générale, en insistant sur les points primordiaux trouvés grâce à notre modèle. Puis, nous proposerons quelques perspectives à court, voire à moyen terme, pour l'amélioration de cette étude.

# *Chapitre N°1*



# **Chapitre I: Notions et principes fondamentaux**

## **1- Interaction électron-matière**

### **1-1-Introduction :**

Lorsqu'un faisceau électronique d'énergie primaire  $E_0$  pénètre dans un échantillon solide, il subit deux types d'interactions: élastiques et inélastiques. L'interaction est élastique lorsqu'un électron pénétrant dans la zone d'influence du potentiel qui règne autour d'un cœur ionique est dévié sans perte d'énergie appréciable. Si l'énergie de l'électron varie d'une manière significative, l'interaction est dite inélastique.

Au gré de ces deux types d'interactions, les électrons incidents empruntent des parcours aléatoires dans la matière jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique ou leur sortie de l'échantillon [1].

Ces interactions peuvent être utilisées pour caractériser l'échantillon si l'on possède de détecteur qui permettra de capter leurs résultats. La compréhension des principes de base de l'interaction électron-matière se révèle donc d'une importance capitale pour l'application de la technique EBIC (Electron Beam Induced current). C'est pourquoi cette partie sera dédiée à l'étude de cette interaction.

## 1-2- Trajectoires des électrons incidents:

Lors de l'interaction électron-matière, différents processus se produisent donnant naissance à plusieurs évènements quantifiables.

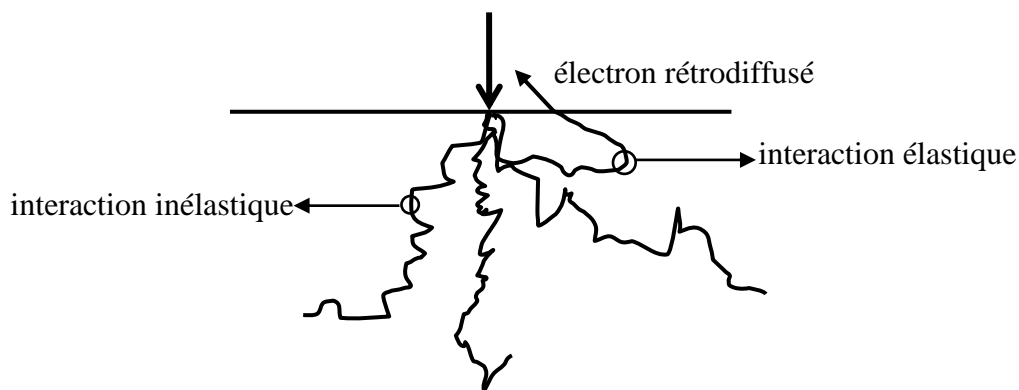
En effet, avant que cet électron ne perde complètement son énergie ou émerge de l'échantillon, il subit des centaines voire des milliers d'évènement regroupés globalement dans deux processus : les interactions élastiques et inélastiques.

Les interactions inélastiques provoquent une perte progressive de l'énergie de l'électron incident, pour une grande part par transfert aux électrons des orbitales atomiques et pour une moindre part par perte radiative lors de l'interaction avec le noyau (le rayonnement de freinage appelé encore souvent Bremsstrahlung suivant le terme allemand historique).

Les interactions élastiques avec le noyau, provoquent des variations plus ou moins brutales de la direction des électrons incidents.

La résultante de ces interactions induit pour chaque électron une « *trajectoire électronique* », de longueur finie et de forme aléatoire [2].

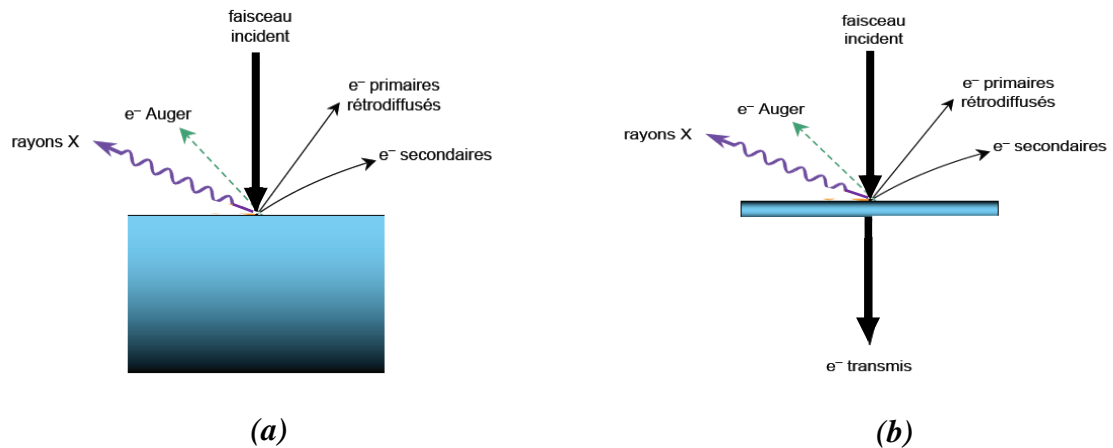
Autrement dit, les collisions élastiques avec les noyaux atomiques sont responsables de la forme en zigzag des trajectoires des électrons, tandis que les collisions inélastiques provoquent une dissipation d'énergie (Figure (I.1)).



***Figure (I.1) : Illustration des Trajectoires électroniques***

### 1-3- Les différentes émissions lors des interactions:

Les événements traduisant la réponse de l'interaction des électrons incidents avec le matériau conduisent globalement, comme le schématise la Figure (I.2) aux émissions suivantes :



**Figure (I.2) : Signaux générés par le faisceau électronique :  
Echantillon épais (a) Echantillon très mince (b)**

- 1- Une émission *électronique rétrodiffusée* : constituée d'électrons primaires qui, après avoir subi un certain nombre d'interactions élastiques avec les noyaux atomiques et inélastiques avec les électrons orbitaux, retrouvent la surface et ressortent de la cible (avec une énergie proche de  $E_0$ ).
- 2- Une émission *électronique secondaire* : résulte généralement de l'éjection d'électrons arrachés aux atomes proches de la surface de l'échantillon par ionisation.
- 3- Une émission *d'électrons Auger* : due à un mécanisme de désexcitation Auger après ionisation et constituée d'électrons d'énergie caractéristique (de l'élément chimique excité).
- 4- Une émission de photons très énergétiques (*rayons X*). Ils forment d'une part un spectre continu issu de freinage (Bremsstrahlung) des électrons incidents dans le champ électrique du noyau et d'autre part une émission caractéristique de chaque espèce d'atomes présents, issue de leur ionisation par les électrons incidents.

5- Si l'échantillon est suffisamment mince, il existe également un faisceau électronique transmis (Figure I.2. (b)).

### 1-4- Etude des mécanismes d'émissions électroniques:

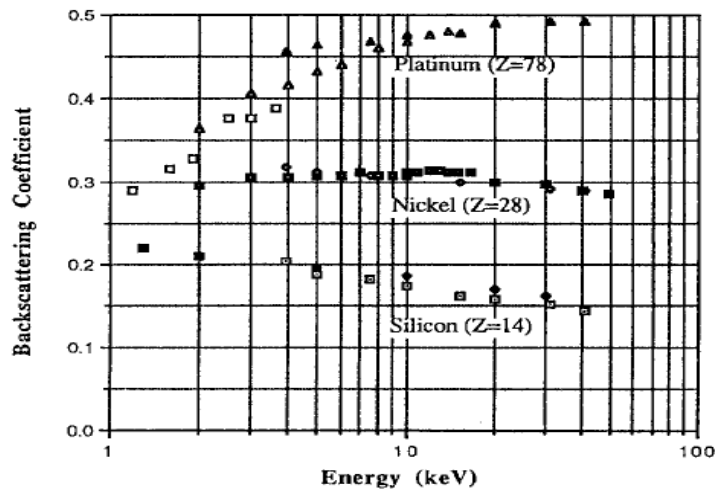
Pour leur importance marquante dans notre étude on a voulu détailler ces mécanismes dans les paragraphes suivants:

#### 1-4-1- Etude du mécanisme de rétrodiffusion :

Ce mécanisme résulte de l'interaction du faisceau primaire avec les noyaux des atomes constituant l'échantillon et qui ont réagi de façon élastique pendant cette interaction. Ces électrons sont réémis dans une direction proche de leur direction d'origine.

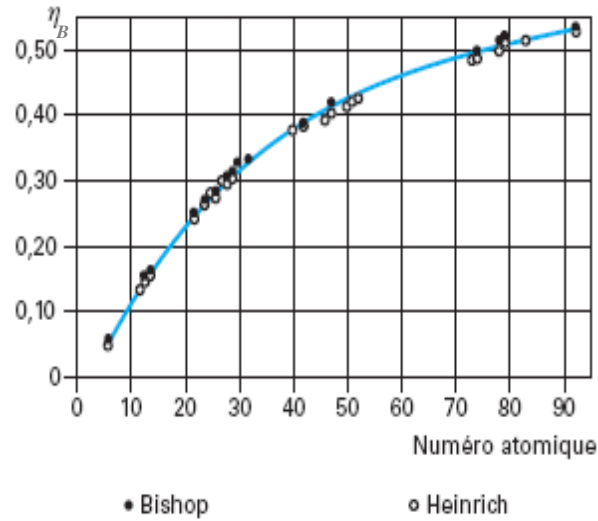
Leur taux est exprimé par le *coefficient de rétrodiffusion* (rapport entre le nombre d'électrons rétrodiffusés et le nombre d'électrons incidents), noté  $\eta_B$ .

La Figure (I.3) montre la variation de ce coefficient en fonction de  $E_0$  pour trois éléments différents : un élément léger (Silicium), un élément moyen (Nickel) et un élément lourd (Platinum) [3].



**Figure (I.3) : Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie primaire pour trois éléments différents.**

La variation du même coefficient en fonction du numéro atomique suivant les mesures de Bishop [4] et Heinrich [5] pour une énergie de 10 KeV est représentée à la Figure (I.4):



**Figure (I.4) : Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique.**

Plusieurs expressions analytiques du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique sous incidence normale ont été proposées, citons entre autres :

1- Arnal [6]:  $\eta_B = 2\sqrt{Z^{-9}}$  (I.1)

2- Heinrich [7]:  $\eta_B = -0.0254 + 0.016 Z - 1.86 \cdot 10^{-4} Z^2 + 8.3 \cdot 10^{-7} \cdot Z^3$  (I.2)

3- Everhart qui s'est basé sur la loi de freinage de Thomson - Widdington [8] :

$$\eta_B = \frac{a - 1 + 0.5^a}{1 + a}, \quad a = 0.045 Z \quad (\text{I.3})$$

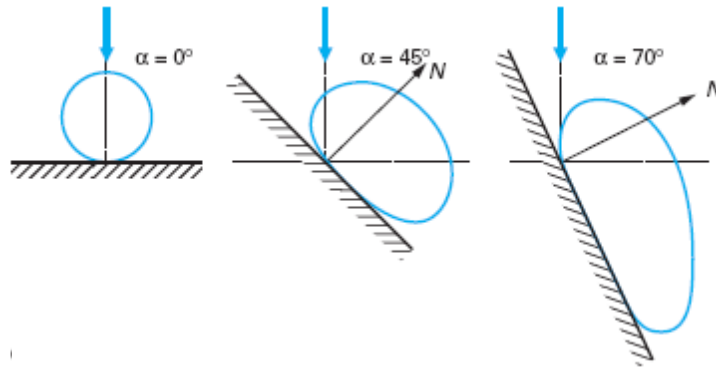
4 - Archard , pour les éléments qui ont un nombre atomique  $Z > 13$  [9] :

$$\eta_B = \frac{7 Z - 80}{14 Z - 80} \quad (\text{I.4})$$

La distribution spatiale de l'émission rétrodiffusée est très sensible à l'incidence du faisceau primaire (Figure (I.5)).

$$\eta_B(\alpha) = (1 + \cos\alpha)^{9/\sqrt{Z}} \quad [6] \quad (I.5)$$

$\alpha$  : l'angle d'incidence du faisceau incident.



**Figure (I.5) : Distribution spatiale de l'émission rétrodiffusée en fonction de l'angle d'incidence du faisceau primaire**

Du fait de leur forte énergie, les électrons rétrodiffusés suivent en dehors de l'échantillon des trajectoires rectilignes [2].

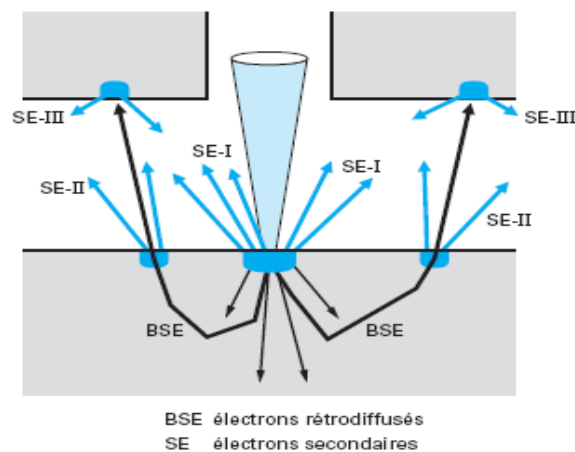
#### 1-4-2- Etude du mécanisme secondaire:

Issus des interactions inélastiques des électrons primaires avec les électrons orbitaux (en particulier les électrons de valence), les électrons secondaires possèdent en moyenne une énergie de l'ordre de quelques électrons-volts.

Du fait de cette faible énergie, il résulte que même s'ils sont engendrés sur toute la longueur des trajectoires électroniques, seuls ceux qui sont émis très près de la surface ont assez d'énergie pour s'échapper.

On peut distinguer l'émission secondaire :

- 1- **Vraie** (dite de « **type I** »): provoquée par les électrons primaires incidents.
- 2- **Induite** (dite de « **type II** »): induite par les électrons rétrodiffusés dans l'échantillon même.
- 3- **Induite** (dite de « **type III** »): induite par les électrons rétrodiffusés au niveau du microscope électronique à balayage.



**Figure (I.6) : Différents types d'électrons secondaires**

On caractérise l'émission électronique secondaire vraie par un taux de rendement d'électrons secondaires  $\delta_{sec}$  (rapport entre le nombre d'électrons secondaires vraies et le nombre d'électrons primaires).

Le phénomène d'émission secondaire se déroule suivant trois étapes :

- 1- **Génération** : suite aux collisions inélastiques.
- 2- **Transport vers la surface** : L'étape qui suit la génération des électrons secondaires est leur transport vers l'interface cible/vide. A cause des interactions avec les électrons de la bande de conduction et avec les phonons, seuls les électrons créés entre la surface et une certaine profondeur " $\Lambda$ " appelé profondeur d'échappement parviennent à l'interface cible/vide.

- 3- Franchissement de la surface : Pour franchir l'interface cible/vide, les électrons secondaires qui ont pu atteindre cette interface doivent avoir au moins une énergie qui correspond au travail de sortie dans le cas d'une cible métallique ou à l'affinité électronique (énergie minimale à fournir à un électron situé au bas de la bande de conduction pour l'éjecter dans le vide) dans le cas d'une cible isolante ou semi-conductrice.

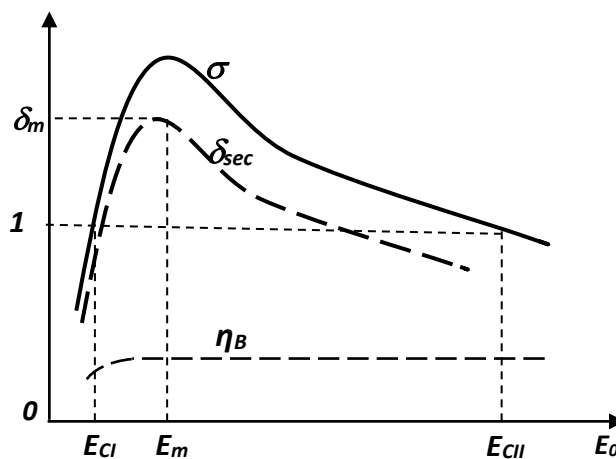
### 1-4-3- Rendement d'émission électronique total :

Le rendement d'émission électronique total, noté  $\sigma$ , est le rapport entre la population d'électrons émis et la population d'électrons injectés. Il est le résultat de la contribution de deux populations d'électrons : La population d'électrons rétrodiffusés, correspondant au coefficient de rétrodiffusion  $\eta_B$  et la population d'électrons secondaire vraie  $\delta_{sec}$  [2].

$$\sigma = \eta_B + \delta_{sec} \quad (I.6)$$

L'allure de ce rendement, de celui du processus de rétrodiffusion et de l'émission secondaire vraie en fonction de l'énergie primaire  $E_0$  est représentée à la Figure (I.7).

La courbe  $\sigma(E_0)$  a une allure principalement gouvernée par celle du  $\delta_{sec}$  et présente deux points particuliers pour lesquels  $\sigma = 1$  et dont les abscisses  $E_{CI}$  et  $E_{CII}$ , sont appelés énergies critiques ou « Crossover » [2].



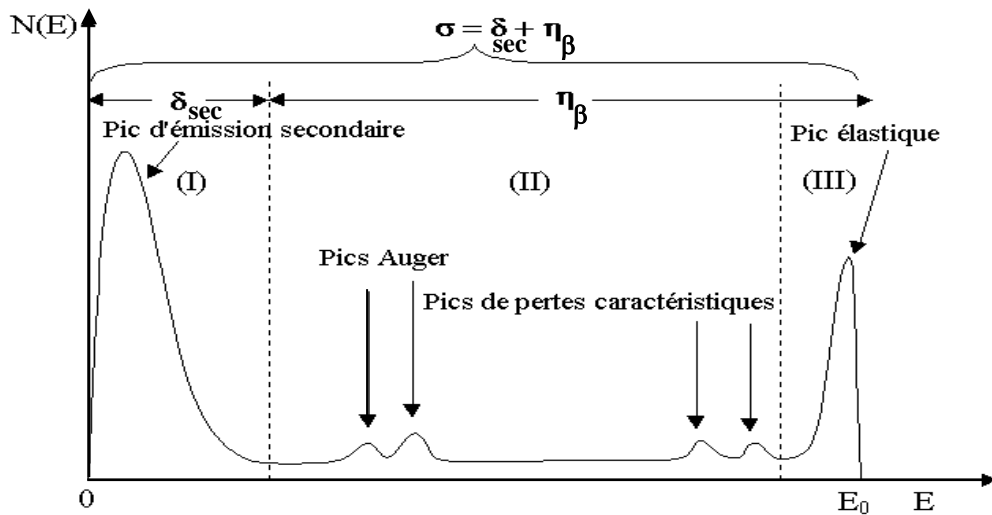
**Figure (I.7) : différentes émissions électroniques en fonction de l'énergie primaire**



### 1-5- Distribution énergétique :

La distribution énergétique des électrons émis  $N(E)$  s'étend du zéro jusqu'à  $E_0$ , elle est illustrée schématiquement à la Figure (I.8). On distingue habituellement trois parties dans cette distribution [2] :

- (I) Le domaine des électrons secondaires se présente sous la forme d'un pic dont la position du maximum se trouve dans les énergies relativement basses.
- (II) Domaine attribuable aux multiples interactions élastiques et inélastiques subies par les électrons au sein du matériau (gamme d'énergie comprise entre une énergie supérieure à celle des électrons secondaires et le début du pic centré autour de l'énergie primaire  $E_0$ ). Dans cette zone apparaissent des pics correspondant à des pertes caractéristiques. On distingue les pics Auger vers les basses énergies.
- (III) Le pic élastique, centré autour de l'énergie primaire  $E_0$ , est celui des électrons primaires rétrodiffusés élastiquement.



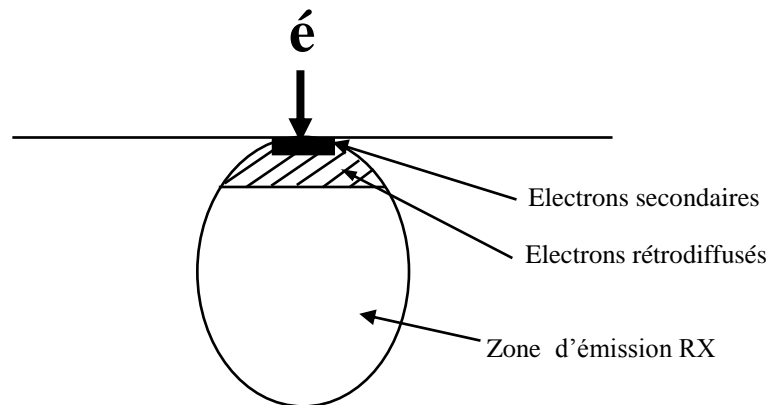
**Figure (I.8) : Distribution énergétique des électrons émis par une cible irradiée par un faisceau électronique d'énergie  $E_0$ .**

### 1-6- Résolution spatiale :

Les diverses émissions électroniques et électromagnétiques proviennent de zones d'interaction plus ou moins profondes et plus ou moins élargies. En résumé, pour un faisceau primaire de quelques nanomètres de diamètre on trouve :

- ① **La zone de l'émission électronique secondaire:** provient d'une petite zone de quelques  $\text{nm}^3$ , située au niveau de l'impact du faisceau.
- ② **La zone de l'émission électronique rétrodiffusée:** provient d'une petite zone plus large et plus profonde (typiquement de l'ordre de quelques centaines de nm,  $10^4$  à  $10^6 \text{ nm}^3$ ).
- ③ **La zone de l'émission X:** d'un grand volume, typiquement de l'ordre du  $\mu\text{m}^3$ .

La résolution spatiale des différents phénomènes de l'interaction électron-matière est montrée à la figure suivante [10]:



**Figure (I.9) : La résolution spatiale des différentes émissions**

### 1-7- Fonction de dissipation d'énergie :

La fonction normalisée de dissipation d'énergie est définie par la perte d'énergie des électrons primaires dans une direction normale à la surface de la cible,  $\Phi(u)$  appelée

« Depth Dose Function », où  $u$  est un paramètre sans dimension traduisant la pénétration normalisée au parcours électronique  $R_e$  (paragraphe (1.9)) calculé en  $g/cm^2$  avec [11] :

$$u = \rho \frac{z}{R_e} \quad (I.7)$$

$z$  : La profondeur de pénétration

$\rho$  : La masse volumique de l'échantillon.

$R_e$  : Parcours électronique.

La fonction  $\Phi(z/R_e)$  est donnée par l'expression suivante [12]:

$$\Phi(z/R_e) = \frac{d(\langle E_A \rangle / E_0)}{d(z/R_e)} \quad (I.8)$$

$\langle E_A \rangle$  : l'énergie moyenne absorbée en fin du parcours normalisé. Elle est donnée par l'expression de Kanaya -Okayama (1972) [13] :

$$\langle E_A \rangle = E_0 - (\eta_T \cdot \langle E_T \rangle) - (\eta_B \cdot \langle E_B \rangle) \quad (I.9)$$

$\langle E_T \rangle$  et  $\langle E_B \rangle$  sont les énergies moyennes des électrons transmis et rétrodiffusés respectivement.

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

Des relations de  $\langle E_T \rangle$ ,  $\eta_T$  et  $\eta_B$  exprimées en fonction de  $u$ , ont été établies par Kanaya et Okayama [13].

L'expression de  $\langle E_B \rangle$  a été exprimée par Sternglass [14] sous la forme :

$$\langle E_B \rangle = (0.45 + 2.10^{-3}Z) E_0 \quad (I.10)$$

qui est une expression valable pour  $0.2 < E_0 < 32$  keV et  $8 < Z < 47$ .

Une autre expression a été proposée par Fitting et al. [15] sous la forme :

$$\langle E_B \rangle = 0.5 (1 + \eta_B) \cdot E_0 \quad (I.11)$$

**1-7-1- La fonction  $\Phi(u)$  de Kanaya- Okayama :**

La fonction  $\Phi(u)$  de Kanaya - Okayama [13] s'écrit comme suit :

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

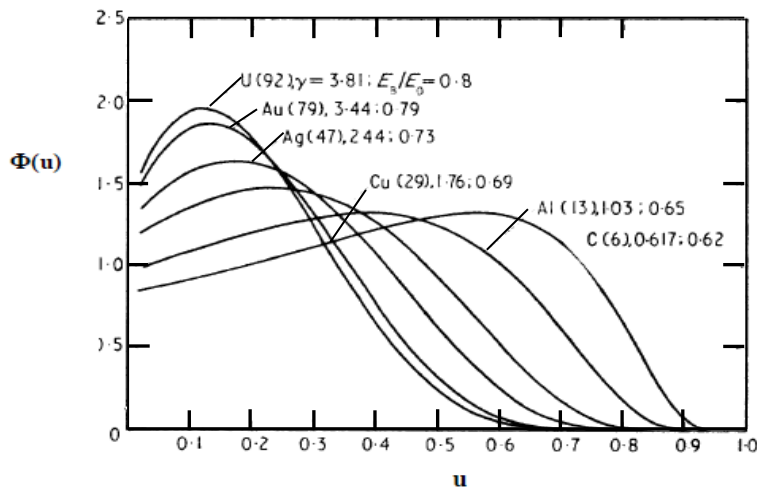
**(I.12)**

Où :

$$\gamma = 0.187 \cdot Z^{2/3}$$

**(I.13)**

La Figure (I.10) [13] montre la variation de  $\Phi(u)$  en fonction du parcours normalisée  $u$  pour quelques matériaux :



**Figure (I.10) : La variation de  $\Phi(u)$  en fonction de  $u$  (d'après Kanaya et Okayama [13]).**

**1-7-2- La fonction  $\Phi(u)$  d'Everhart - Hoff :**

Everhart-Hoff [16] proposent une expression analytique qui est devenue l'équation la plus utilisée pour sa simplicité:

$$\Phi(u) = (1-f) \cdot (0,60 + 6,21u - 12,4u^2 + 5,69u^3)$$

**(I.14)**

Où  $f$  est la fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion :

$$f = \eta_B \cdot \langle E_B \rangle / E_0 \quad (\text{I.15})$$

Malgré la restriction notée par Napchan [17] sur le numéro atomique ( $10 < Z < 15$ ) et sur l'énergie primaire ( $5 < E_0 < 25$  KeV) pour cette expression, elle a été utilisée dans la littérature pour la totalité des matériaux et sous les conditions de travail allant de 1 à 40KeV [11].

**1-7-3- La fonction  $\Phi(u)$  de Kyser:**

Kyser [18] a proposé grâce à une étude de l'émission X dans le cuivre que :

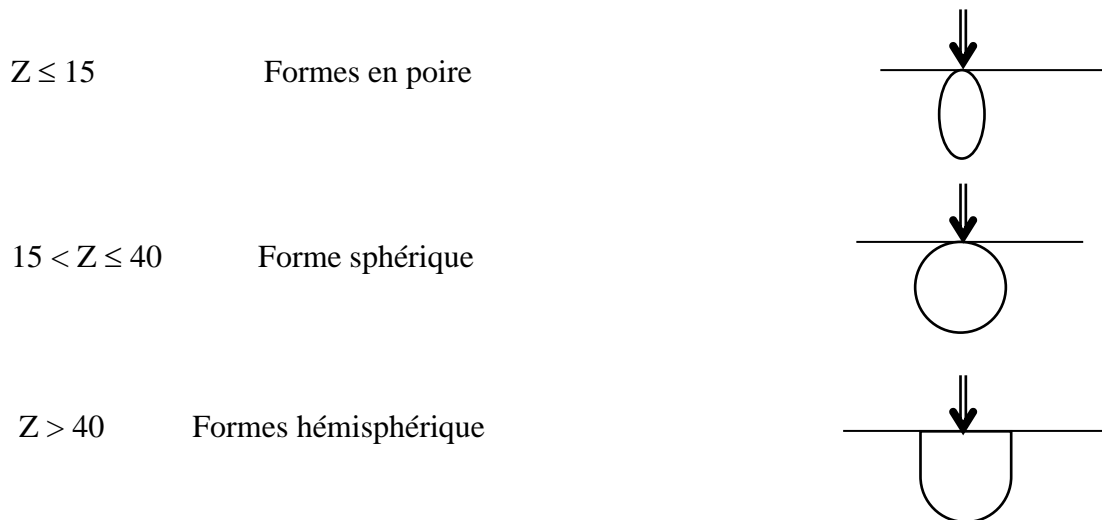
$$\Phi(u) = A \cdot \exp \left[ - \left( \frac{u-u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \cdot \exp \left( - \frac{b \cdot u}{u_0} \right) \quad (\text{I.16})$$

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

Ces mêmes constantes ont été également utilisées par Wu-Wittry [19] dans le cas du GaAs, par Tabet et al. [20] et Mekki et al. [21] dans le cas du germanium.

**1-8- Volume de génération :**

Le volume de génération est le lieu de création des paires électron-trou (e-h). Suivant Kanaya-Okayama [13], le volume de génération prend trois formes différentes, suivant la valeur de Z :



### 1-9- Le maximum de la profondeur de pénétration (Parcours entier) :

Chaque électron possède une trajectoire individuelle dont la longueur reste inconnue. La détermination de ces chemins est délicate, c'est la raison pour laquelle il est utile de connaître non pas les parcours des particules, mais leur profondeur de pénétration maximale dans le milieu " $R_e$ ".

Cette profondeur peut être calculée en intégrant la perte d'énergie due aux collisions inélastiques entre les valeurs limites de l'énergie  $E_0$  et zéro :

$$R_e(cm) = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{(dE/dS)} \quad (I.17)$$

$dE$ : la perte d'énergie le long du parcours  $dS$ .

$dE/dS$  (d'après Bethe[22]) est une fonction qui dépend des paramètres:

$Z$  : le nombre atomique ,  $\rho(g/cm^3)$  : la masse volumique

$A(g)$  : la masse atomique du matériau.

De nombreuses approches à la fois expérimentales et théoriques ont été développées dans le but de quantifier cette profondeur. Elles sont toutes de la forme [11] :

$$R_e = \left(\frac{K}{\rho}\right) \cdot E_0^a \quad (I.18)$$

$K$  et  $a$  sont des constantes dépendantes du matériau.

#### 1-9-1-Modèle de Kyser :

La formule de Kyser [18] est :

$$R_K(mg/cm^2) = 2.56[E_0(keV)/30]^{1.68} \quad (I.19)$$

#### 1-9-2-Modèle d'Everhart-Hoff :

Everhart et Hoff [16] proposent pour les matériaux qui ont un nombre atomique  $10 < Z < 15$  la formule suivante:

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

$\rho$  est exprimé en (g/cm<sup>3</sup>)

### 1-9-3-Modèle de Kanaya-Okayama :

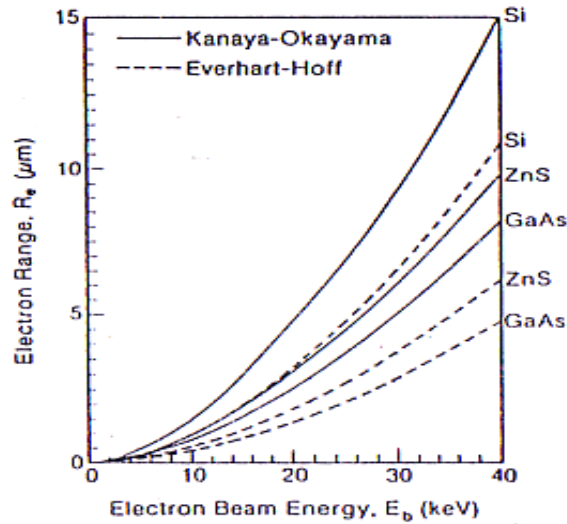
Une autre formule plus générale a été dérivée par Kanaya-Okayama [13] :

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

$\rho$  : est exprimé en (g/cm<sup>3</sup>).

$E_0$  : l'énergie d'incidence en KeV.

La figure suivante montre une comparaison entre le parcours entier calculé suivant le modèle d'Everhart-Hoff et celui de Kanaya-Okayama pour quelques matériaux [10]:



**Figure (I.11) : Profondeur de pénétration maximale pour différents matériaux en fonction de l'énergie primaire .**

### 1-9-4-Modèle de Grün :

La formule de Grün est la suivante [11] :

$$R_G(\mu g/cm^2) = 4.57 E_0^{1.75} \quad (I.22)$$

Avec :  $2 < E_0 < 25$  keV.

**1-9-5-Modèle de Feldman:**

Feldman [23], grâce à sa méthode originale du « flying spot » propose la formule suivante, valable dans le domaine d'énergie 1-10 keV:

$$R_F (A^\circ) = 250 \left( \frac{A}{\rho Z^{n/2}} \right) E_0^n (keV) \quad (I.23)$$

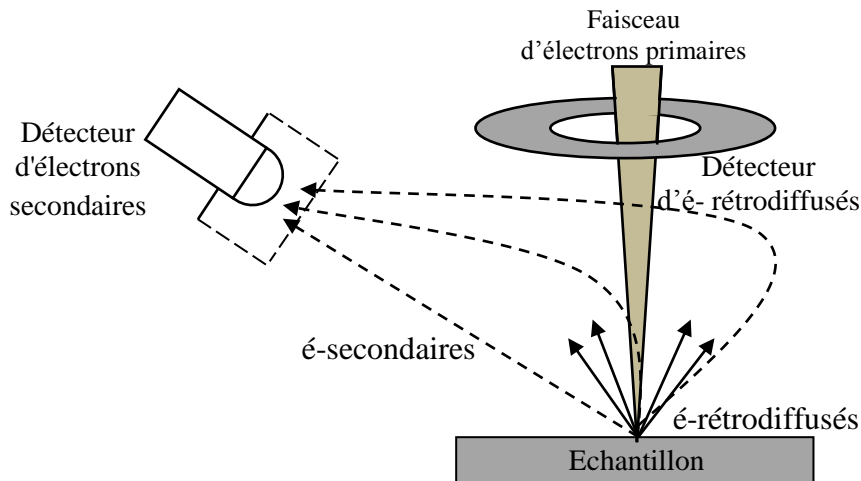
avec  $n = 1.2 / (1 - 0.29 \log_{10} Z)$ .

**1-10- Le mode imagerie:**

**1-10-1- Imagerie en électrons secondaires:**

Les électrons secondaires proviennent des couches proches de la surface et donc, ils ont une faible énergie. De ce fait ils sont très sensibles aux irrégularités de surface, mêmes minimes et donc à la topographie de celle-ci, et donnent des images dont le contraste vient du relief de l'échantillon.

Du fait de leur faible énergie cinétique, il est assez facile de les dévier avec une faible tension (quelques volts) et de les focaliser vers le détecteur comme le montre la figure (I.12) . Ce qui permet d'obtenir des images de haute résolution.



**Figure (I.12) : Configuration des détecteurs en électrons secondaires et rétrodiffusés**



**1-10-2- Imagerie en électrons rétrodiffusés:**

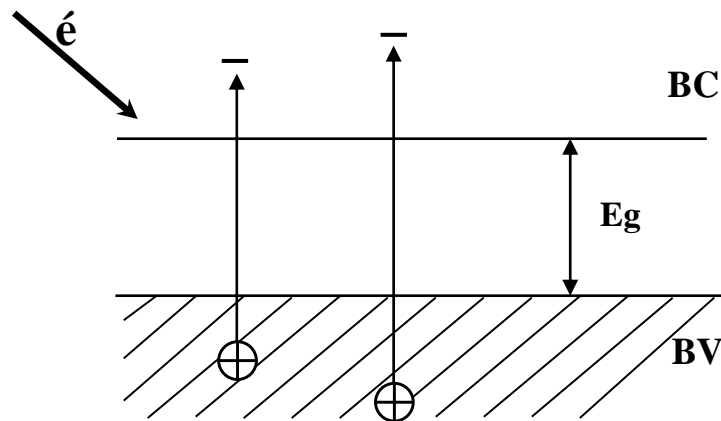
Les électrons rétrodiffusés ont une énergie beaucoup plus importante, de ce fait ils peuvent être émis depuis une plus grande profondeur dans l'échantillon comme on a vu. Les détecteurs d'électrons rétrodiffusés sont placés au-dessus de l'échantillon (Figure (I.12)), dans l'axe du faisceau primaire, ce qui permet de récupérer le maximum de signal.

Dans le mode imagerie, un détecteur d'électrons transcrit le flux d'électrons en une luminosité sur un écran de type télévision. En balayant la surface, on relève les variations de contraste qui donnent une image de l'échantillon avec un effet de relief. La couleur (noir et blanc) obtenue est une reconstruction par un système électronique et n'a rien à voir avec la couleur de l'objet.

**1-11- Génération des porteurs de charge :****1-11-1- Création des paires :**

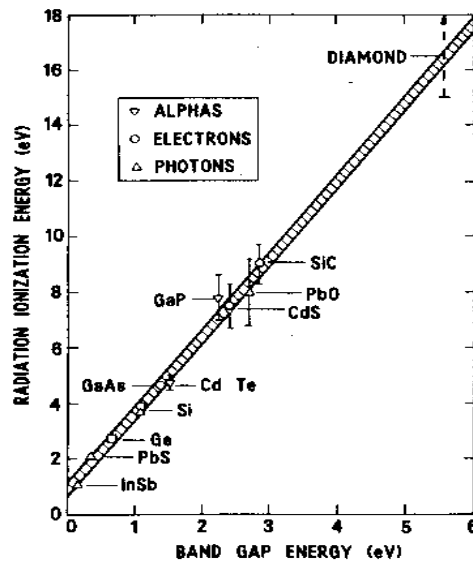
Dans un semiconducteur, le faisceau primaire perd son énergie en créant un grand nombre de paires électron-trou (e-h) par des collisions inélastiques. Dans ce processus de création les électrons de la bande de valence sont propulsés dans la bande de conduction, laissant des trous libres dans leurs états initiaux.

Chaque électron primaire dont l'énergie est supérieure à celle du gap  $E_g$  va créer des paires et ainsi de suite jusqu'à ce que son énergie soit inférieure au seuil de création d'une paire. L'énergie restante se dissipera par excitation de phonons.



**Figure (I.13) [24]: Mécanisme de création des paires électron-trou**

La Figure (I.14) représente l'énergie de formation d'une paire électron-trou [25] pour différents matériaux en utilisant trois types d'irradiation (rayons  $\alpha$ , électrons, photons).



**Figure (I.14) : Variation de l'énergie de formation d'une paire en fonction de l'énergie du gap pour différents matériaux**

### 1-11-2- Taux de génération total:

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

En connaissant l'énergie de création d'une paire  $E_{e-h}$  et l'énergie effective perdue dans l'échantillon (l'énergie absorbée)  $E_A$  on peut calculer le taux de génération total qui s'exprime par [11] :

$$G_0 = \frac{E_A}{E_{e-h}} \quad (I.24)$$

$E_A$  est la différence entre l'énergie incidente et l'énergie perdue par les électrons rétrodiffusés, elle s'écrit alors [12]:

$$E_A = N_0 E_0 (1 - f) \quad (I.25)$$

$f$  : la fraction d'énergie rétrodiffusée.

$N_0$  : le nombre d'électrons incidents par unité de temps, exprimé par :  $N_0 = \frac{I_0}{q}$

$I_0$  : l'intensité du faisceau incident ,  $q$  : la charge d'électron.

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

$$G_0 = \frac{I_0 E_0}{q E_{e-h}} (1 - f) \quad (\text{I.26})$$

Cette formule est valable pour un échantillon épais, mais pour un échantillon très mince il faut prendre en considération aussi la fraction des électrons transmis.

### 1-11-3- Fonction de génération:

On désigne par fonction de génération  $g(z)$  la valeur moyenne de la densité des paires créées en fonction de la profondeur  $z$ .

Cette densité peut être calculée en sachant qu'elle est proportionnel à la perte d'énergie. Sur la base de ce point, et à partir de la formule (I.26), la fonction de distribution peut s'écrire sous la forme suivante [12]:

$$g(z) = \frac{I_0}{q E_{e-h}} \frac{dE_A}{R_e dz} \quad (\text{I.27})$$

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

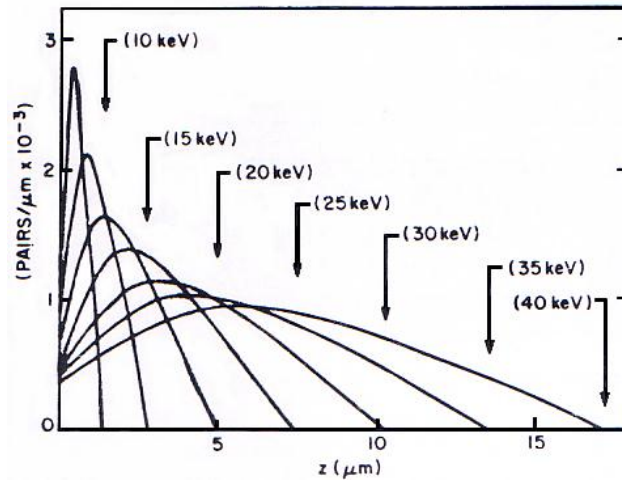
Compte tenu de l'expression  $\Phi(u)$  donnée par l'équation (I.8) la fonction  $g(z)$  devient :

$$g(z) = \frac{I_0 E_0}{q R_e E_{e-h}} \Phi(z/R_e) \quad (\text{I.28})$$

La fonction  $g(z)$  calcule le nombre des paires créées par unité de profondeur et de temps à la distance  $z$  de la surface irradiée.

Notons que pour les matériaux qui ont un numéro atomique  $10 < Z < 15$ , on aura  $\Phi(z/R_e)$  sous forme d'un polynôme et correspond à la formule (I.14).

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



**Figure (I.15) :** Le nombre de paires g n r es est une fonction de la profondeur   partir de la surface ( figure obtenue pour un  chantillon en silicium [26] )

## 2 -La Technique EBIC

### 2-1-Introduction :

La technique de caractérisation utilisant le courant induit par un faisceau d'électrons, dite en anglais EBIC (*Electron Beam Induced Current*), basée sur la mesure du courant des porteurs de charge minoritaires en excès dans les dispositifs à base de semiconducteurs, nous ouvre l'accès à de nombreuses informations physiques telles que la longueur de diffusion, la durée de vie des porteurs, la répartition des impuretés, la présence et la localisation des défauts [24].

Bien que cette technique ait connu des avancées sur le plan expérimental et théorique, elle n'a été appliquée qu'à des échantillons semi-infinis [10,12,27-29].

Cependant, le but de suivre la miniaturisation des composants et la caractérisation des matériaux à l'échelle nanométrique nous impose l'utilisation de techniques d'analyse beaucoup plus performantes, d'où l'idée d'une technique appelée « Nano-EBIC », basée sur l'utilisation d'une pointe conductrice [30-31].

Dans ce contexte, nous allons rappeler les notions fondamentales et les principes de la technique EBIC classique puis nous introduirons le concept de la technique nano-EBIC.

### 2-2-Historique:

*Le principe du microscope électronique à balayage, proposé par Manfred Van Ardenne et Max Knoll, a conduit à une première réalisation vers 1938, en Allemagne, à partir d'un microscope en transmission, malgré que sa conception date de 1929 [32]. Le premier microscope électronique à balayage « moderne » pour échantillons massifs a été conçu en 1942 aux Etats-Unis par Zworykin et al. Grâce aux progrès successifs de l'optique électronique, de l'électronique, des techniques de visualisation et surtout de la détection des électrons de faible énergie, le premier instrument commercial (Cambridge Mark 1) a été commercialisé en 1965 [32].*

*C'est en 1958 qu'Everhart fait la première observation en microscopie électronique à balayage en mode de courant induit (EBIC) sur un dispositif à semiconducteurs. Le sigle anglais EBIC, est alors consacré [24].*

*Pour plus de détails historiques on peut retracer son histoire en évoquant les travaux de Lander et al. (1963), Everhart (1964), Wittry et al. (1965) et Texier (1980) pour ses travaux sur les joints de grains [24], Tabet et Tarento (1989) [12], ainsi que les articles des revues de Hanoka et Bell (1981), Leamy (1982) [24] et Tarento (2007-2008) [30-31].*

*Récemment, la technique est largement utilisée pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs : détermination des propriétés de transport (longueur de diffusion et durée de vie), des profondeurs de jonction, etc... Parallèlement à ces travaux, les études de défauts ont connu un fort développement.*

*La réalisation d'un système hybride d'un microscope électronique à balayage et d'un microscope à force atomique "fabrication maison" a été faite au sein du laboratoire LMEN (Laboratoire de microscopie et étude des nanostructures -France-) en 1997 par Michel Troyon. Par contre la technique nano-EBIC n'a été réalisée qu'en 2002 au même laboratoire par Michel Troyon et al.*

### **2-3-La microscopie électronique à balayage (MEB):**

La dénomination EBIC est utilisée pour décrire le processus de collecte des porteurs de charge minoritaires en excès par l'impact d'un faisceau électronique sur un semiconducteur. C'est un effet électrovoltaïque comparable à l'effet photovoltaïque [12].

La microscopie électronique à balayage (MEB ou « Scanning Electron Microscopy » SEM en anglais) est une technique puissante d'observation de la topographie des surfaces - technique d'observation "tout terrain"-. Elle est fondée principalement sur la détection des électrons secondaires émergents de la surface d'un échantillon sous l'impact d'un faisceau d'électrons primaires très fin balayant la surface observée et permet d'obtenir des images avec un bon pouvoir séparateur.

En effet le MEB permet de fournir une image en relief d'un objet balayé par le faisceau électronique.

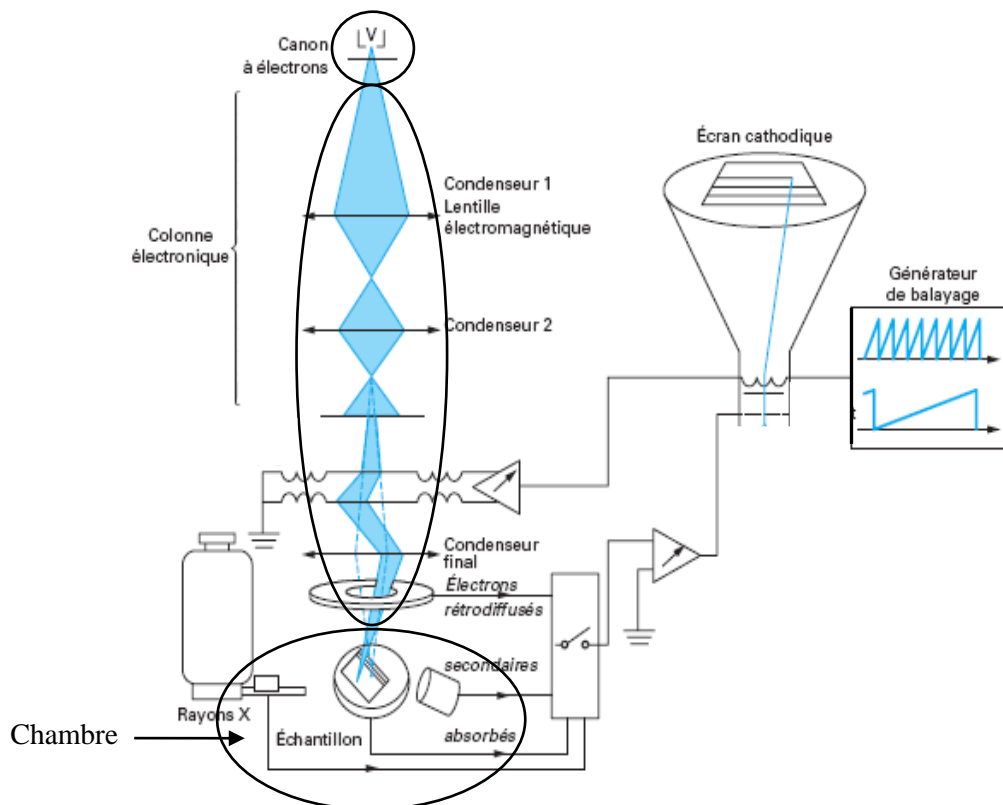
Couramment, un MEB a les caractéristiques suivantes :

- un pouvoir de résolution relativement meilleur que les autres microscopes .
- un grandissement efficace au-delà de 100000[32].

Typiquement, un microscope électronique à balayage comme le schématise la (Figure (I.16)) est essentiellement constitué :

- d'un canon à électrons.
- d'une colonne maintenue sous vide.
- d'un dispositif accélérateur des électrons.
- d'un ensemble de lentilles électromagnétiques (condenseurs) destiné à former un faisceau fin et intense.
- d'un porte-objet permettant de déplacer l'échantillon dans les 3 directions.
- de détecteurs permettant d'analyser les rayonnements et les électrons (principalement secondaires) et un dispositif d'amplification du signal, rapide et à faible bruit.
- d'un système de visualisation d'images.

La source d'électrons est un filament de tungstène parcouru par un courant qui permet de le chauffer, produisant ainsi l'émission d'un faisceau très fin d'électrons, monocinétique. Ces électrons ont une énergie située autour du niveau de Fermi, par mécanisme d'émission thermoïonique, arrivent à vaincre le travail d'extraction du métal et sont alors injectés dans le vide. L'accélération de ces électrons est réalisée par l'anode (plaque métallique percée d'un trou), portée à une tension positive (ajustable de 0.5 à 45kV) par rapport au filament (cathode) [1].



**Figure (I.16) [32] : Schéma du principe d'un microscope électronique à balayage**

À la sortie du canon, le flux d'électrons est guidé le long de la colonne par des lentilles magnétiques jouant le rôle d'objectif de petit diamètre qui permet de focaliser sur la surface à examiner un fin faisceau électronique.

Un système de déflexion déplace le spot du faisceau électronique pour balayer la surface de l'échantillon point par point et ligne par ligne (d'où le terme balayage).

Le signal recueillie par le détecteur est transmis à un écran dont le balayage est parfaitement synchronisé avec le balayage du faisceau incident [1].

Trois informations distinctes peuvent être exploitées : l'imagerie en électrons secondaires, l'imagerie en électrons rétrodiffusés et la micro-analyse X.

Le grandissement du microscope est donné par le rapport ( $L' / l'$ ), de la longueur  $L'$  de la ligne de balayage horizontale de l'écran d'affichage à la longueur  $l'$  de la ligne correspondante balayée par le faisceau d'électrons primaires sur l'échantillon.

### **2-3-1-Fonctionnement :**

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

Dans cette photodiode, ces particules génèrent des paires électron-trou, qui sous l'effet d'un champ électrique, sont séparées et fournissent, dans le circuit de celle-ci, un courant électrique .

Ce courant, amplifié, est converti en tension venant moduler le potentiel du second tube. Ceci a pour conséquence de moduler l'énergie du faisceau lors de son impact sur l'écran fluorescent modifiant ainsi sa luminescence. Grâce au synchronisme entre les deux faisceaux, une image point par point de l'échantillon est reproduite sur l'écran : c'est le fonctionnement en mode d'imagerie par électrons secondaires.

Si l'objet est un semiconducteur, le faisceau primaire y génère des paires électron-trou. Lorsqu'un champ électrique règne dans la zone de génération, alors les paires se séparent et un phénomène de collection de charges aura lieu une fois que le circuit extérieur sera fermé. Le signal observé est un courant induit par faisceau d'électrons (EBIC). Ce signal peut également être amplifié et converti en tension dans le tube de visualisation. C'est le



mode d'imagerie EBIC. Dans ce mode l'échantillon joue lui-même le rôle de collecteur de charges [1].

### **2-3-2- La recombinaison:**

La recombinaison est le retour à l'état d'équilibre du matériau du fait de la recombinaison des paires créées. Cette recombinaison s'accompagne par une libération d'une énergie. Le mécanisme de recombinaison peut être radiatif ou non. Dans une recombinaison radiative l'énergie est libérée par l'émission de photon. Une recombinaison non radiative peut se faire par l'émission d'un phonon.

L'importance des recombinaisons en EBIC est telle que la présence d'un défaut localisé agissant comme un centre de recombinaison entraîne une diminution locale du nombre de porteurs minoritaires et donc du courant EBIC. Une tache sombre apparaît alors dans l'image EBIC indiquant la présence d'un défaut. Ce principe permet donc de réaliser des cartographies des défauts électriquement actifs.

### **2-4-L'EBIC classique:**

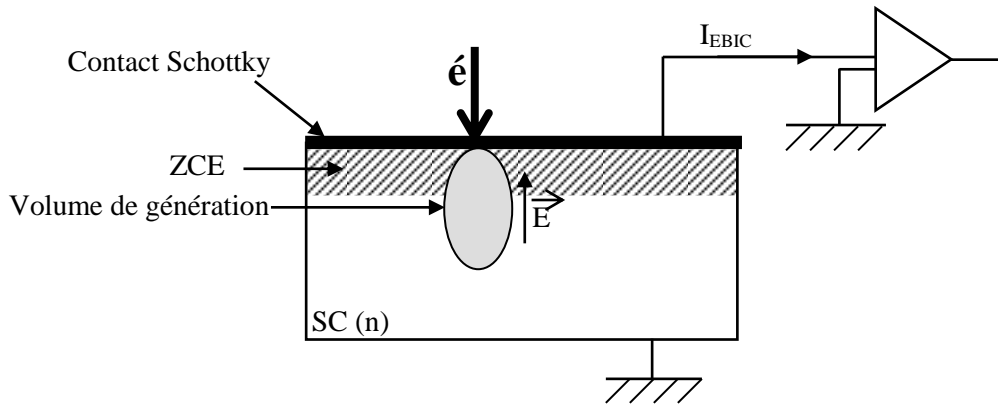
Le principe de l'EBIC repose sur un processus de collecte, par une jonction, des porteurs minoritaires en excès créés par l'impact d'un faisceau d'électrons sur un semiconducteur. Les porteurs en excès créés ont pour densités  $\Delta n$  et  $\Delta p$  respectivement pour les électrons et les trous.

En l'absence de champ électrique, les porteurs en excès sont animés d'un mouvement de diffusion sous l'effet d'un gradient de leur concentration pendant lequel ils parcourent une distance appelée la longueur de diffusion  $L$  pendant un temps appelé durée de vie  $\tau$ , avant de se recombiner. Autrement dit, ils finissent par se thermaliser rapidement ( $10^{-11}$ s) en bord de bande de conduction pour devenir indiscernables par rapport aux porteurs préexistants à l'équilibre dans le matériau [12].

Par contre, en présence d'un champ électrique les paires sont séparées ; alors électron et trou dérivent en sens opposés. Un courant prend alors naissance dans le circuit extérieur[1].

Les deux cas les plus connus du champ électrique sont soit la jonction  $p-n$ , soit la diode Schottky. Nous nous contentons ici de rappeler le cas utilisé dans notre étude qui est la diode Schottky.

Dans une diode Schottky, une zone de charge d'espace (ZCE) dite aussi zone de déplétion d'une certaine épaisseur et dépourvue de porteurs majoritaires est formée du côté semiconducteur.



**Figure(I.17) Principe général de l'EBIC dans le cas d'une diode Schottky** La direction du champ électrique vers le haut (courant EBIC est celui des trous et perpendiculaire au faisceau électronique incident) [12]

Le volume de génération peut couvrir une partie ou la totalité de la ZCE. Les porteurs créés dans cette zone désertée se séparent sous l'effet du champ électrique interne et sont totalement collectés (contribuent au courant EBIC), ainsi que ceux créés dans la zone neutre du semiconducteur à une distance inférieure ou égale à la longueur de diffusion (des porteurs qui atteignent grâce à leur mouvement de diffusion les limites de cette zone) .

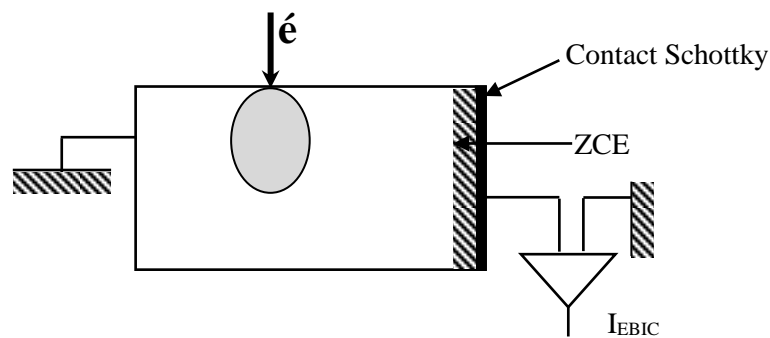
Les densités d'électrons  $\Delta n$  et de trous  $\Delta p$  excédentaires sont égales. Les conditions d'observation sont telles que la concentration  $\Delta p$  engendrée par le faisceau est négligeable devant la concentration en dopants  $N_d$ , c'est-à-dire pour un matériau de type **n**:  $\Delta n = \Delta p \ll N_d$ . Cette condition est dite de faible injection [24]. Ainsi, la concentration en porteurs majoritaires n'est pas modifiée. Par contre, la concentration en porteurs minoritaires augmente de façon importante. L'excédent de porteurs minoritaires va alors se propager dans le matériau sous l'effet du champ électrique. En conséquence, le courant qui en résulte est régi par les porteurs minoritaires en excès.

## 2-5- Les différentes géométries :

Selon la façon de positionner la diode Schottky par rapport à la direction du faisceau primaire on distingue deux types de configurations particulières : Configuration parallèle et celle perpendiculaire au faisceau.

### 2-5-1- Jonction parallèle au faisceau :

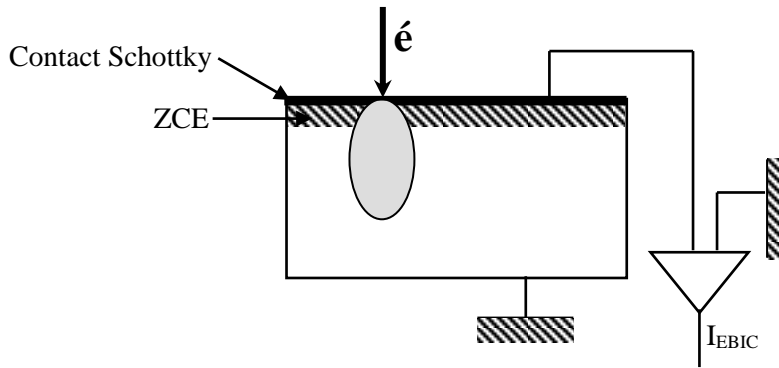
La (Figure (I.18)) illustre cette géométrie. Le faisceau arrive parallèlement à la jonction et le balayage s'effectue sur la section transversale de l'échantillon. Dans cette configuration, il est donc possible de faire une mesure directe de la largeur de la ZCE [33-34]. De même, elle peut également être utilisée pour faire des mesures de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires[35]. Malheureusement dans le cas des dispositifs très minces, ce mode d'utilisation de l'EBIC s'avère difficile.



***Figure(I.18) : Principe de l'EBIC dans le cas d'une diode Schottky parallèle au faisceau primaire [12]***

### 2-5-2- Jonction perpendiculaire au faisceau :

Pour des matériaux latéralement homogènes, le courant EBIC ne révèle aucun contraste avec le balayage. Cependant, en faisant augmenter l'énergie du faisceau incident, le parcours des électrons augmente et le volume de génération s'élargit. L'évolution du courant en fonction de l'énergie renseigne sur la génération des charges.



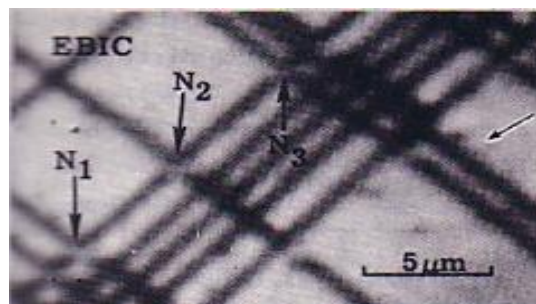
**Figure (I.19) : Principe de l'EBIC dans le cas d'une diode Schottky perpendiculaire au faisceau primaire [12]**

En effet, cette géométrie permet non seulement de déterminer la longueur de diffusion, mais également d'imager et d'identifier les défauts électriquement actifs [10,36-38].

**2-6- Les applications de l'EBIC :**

L'imagerie est l'application qualitative de la technique EBIC. La présence d'un défaut localisé dans l'échantillon entraîne une diminution locale du nombre des porteurs minoritaires collectés donc du courant EBIC, et par suite l'image de ces défauts apparaît noire sur un fond claire [12].

On peut réaliser des "images EBIC" en se basant sur la synchronisation entre le faisceau incident et celui de l'écran d'observation dont la variation de la luminosité traduit la répartition de ces défauts.



**Figure (I.20) : Une image de dislocations obtenue par EBIC [26]**

D'une façon quantitative L'EBIC s'applique aux semiconducteurs pour déterminer leurs propriétés de transport. Autrement dit, l'intérêt majeur de cette application réside dans la détermination directe des paramètres physiques tels que: la vitesse de recombinaison, la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, la durée de vie, ...etc.

De telles mesures quantitatives requièrent des dispositifs expérimentaux avec des géométries spécifiques de l'échantillon.

## **2-7- De L'EBIC classique au nano-EBIC :**

### **2-7-1- La microscopie à sonde locale (en champ proche):**

La microscopie à sonde locale (en anglais Scanning probe microscopy (SPM)) ou encore en champ proche 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 nanométrique.

Le point de départ de cette microscopie est l'invention du microscope à effet tunnel . 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.

### **2-7-2- Idée de base:**

La caractérisation physique des composants électroniques requiert, du fait de leur miniaturisation, des méthodes de caractérisation locale de plus en plus performantes. L'utilisation d'un microscope à force atomique associé à un microscope électronique à balayage permet d'étudier les paramètres des nano-semiconducteurs. Il a été montré que la cathodoluminescence pouvait être envisagée à la résolution de quelques nm grâce à la détection en champ proche, soit un gain d'un facteur 10 environ par rapport aux systèmes de cathodoluminescence conventionnels [39-41].

Comme l'EBIC et la cathodoluminescence classiques ont les mêmes limitations en terme de résolution, il a été pensé que la résolution en EBIC en champ proche devait être limitée par la dimension de la sonde AFM, comme pour la cathodoluminescence en champ proche.

C'est sur cette idée de base que les nouvelles études ont décidé de collecter le courant induit à l'aide d'une pointe AFM conductrice.

### **2-7-3 -Principe du nano-EBIC :**

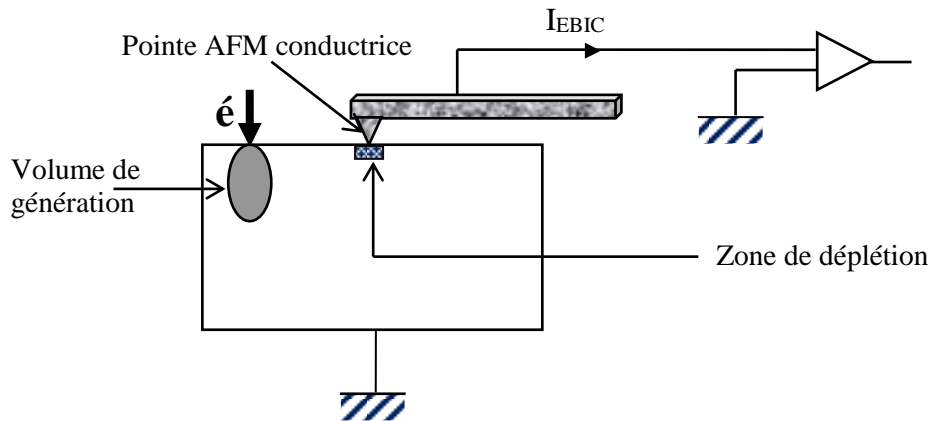
La différence majeure de la technique nano-EBIC par rapport à la technique EBIC classique réside dans le mode de collecte du courant induit, donc le mécanisme général du nano-EBIC reste le même que celui de l'EBIC classique ; c'est-à-dire la collecte de porteurs minoritaires en présence d'un champ interne régnant dans une zone de charge d'espace de l'échantillon étudié.

Pour collecter ce courant induit lors de l'irradiation de l'échantillon, on utilise une pointe AFM conductrice (Figure (I.21)) pour récupérer le courant des porteurs minoritaires. Ainsi, le contact électrique permettant la collecte des charges créés est réduit à un nano-contact formé par la pointe et la surface de l'échantillon.

Dans ces conditions, la résolution est limitée par la dimension du nano-contact pointe-surface et donc une résolution de l'ordre de quelques nanomètres peut être atteinte [30,31].

En outre, le processus de conduction au niveau de ce nano-contact dépend de la nature de la pointe. En effet, on peut avoir soit un nano-contact de type Schottky si l'on utilise une pointe métallique ( $Cr/Co, \dots$ ) ou du type nano-hétérojonction si la pointe est en diamant dopé.

Cette technique a montré sa fiabilité par l'obtention d'images révélant des détails inobservables par la technique EBIC classique [30,31].



**Figure (I.21): Principe général du nano-EBIC**

L'irradiation électronique utilisée peut se faire selon deux modes :

- 1- En mode sonde fixe, le matériau est irradié de façon ponctuelle, l'échantillon placé sur le porte-objet de l'AFM se déplace dans le plan horizontal (x,y) à l'aide du tube piézoélectrique pour l'acquisition d'images. La présence d'une pointe conductrice permet dans ce cas, d'obtenir deux images de façon simultanée ; une image topographique et une image électrique.
- 2- En mode balayage en ligne, le faisceau incident balaie l'échantillon sur une seule ligne, plus ou moins longue selon le grandissement choisi. Le balayage ici se fait manuellement et de façon régulière afin de minimiser tout bruit électrique additionnel au courant induit mesuré. L'échantillon et la pointe sont immobiles dans ce cas.

## **3- Le silicium**

### **3-1-Introduction :**

Après l'oxygène, le silicium (un élément du IV groupe du système périodique) est l'élément le plus répandu sur la terre. Il entre pour 25.7% dans la composition de l'écorce terrestre. L'origine du nom silicium dérive du latin « silicis » signifiant caillou ou silex. Les propriétés du silicium ont permis la création de la deuxième génération de transistors, puis les circuits intégrés (les « puces »). Il est encore l'un des éléments essentiels pour l'électronique, notamment grâce à la capacité technologique permettant d'obtenir du silicium pur à plus de 99.999% (tirage Czochralski, zone fondu flottante) [42].

Actuellement le silicium est le semiconducteur par excellence de la nano-électronique grâce notamment à une caractéristique primordiale qui est le faible coût de production.

Cependant, la miniaturisation des composants est confrontée à des problèmes importants concernant la détermination des paramètres physiques de l'échantillon à cette échelle[42].

### **3-2-Historique :**

*Un des composés du silicium, la silice (dioxyde de silicium), était déjà connu dans l'antiquité. La silice a été considérée comme élément par les alchimistes puis les chimistes, c'est un composé très abondant dans les minéraux. C'est en 1823 que le silicium fut séparé de ses composés par le chimiste suédois Jöns Jacköb Berzelius, mais il faut noter que dès 1787, Antoine Lavoisier en avait soupçonné l'existence. Ce n'est qu'en 1854 qu'Henri Deville obtient du silicium cristallin. Aujourd'hui le silicium représente plus de 90% du marché des semiconducteurs [43].*

### **3-3-Applications:**

Les propriétés électroniques du silicium ainsi que son abondance quasi-illimitée lui confèrent une position particulière d'un point de vue applicatif. En effet, le procédé Czochralski permettant l'obtention de silicium ultra pur et l'ajustement du comportement électronique du silicium via l'incorporation (dopage) d'autres éléments comme le bore ou le phosphore dans le cristal a ouvert la porte à de nombreuses applications.



En 1947, le premier transistor fut réalisé à partir de germanium. Cependant, l'énergie du gap du germanium est relativement faible (0.661eV à 25 °C), et les variations de températures peuvent modifier fortement le fonctionnement du transistor. Avec son gap de (1.12 eV à 25°C) et grâce à son abondance sur le globe, le silicium a rapidement été positionné comme matériau favori de l'électronique et le premier transistor de silicium fut réalisé suivi par le premier circuit intégré en 1958[43].

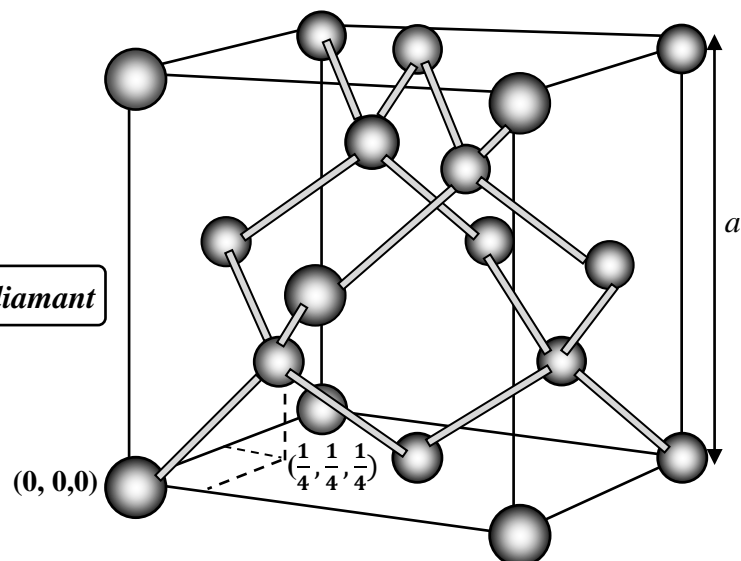
Le silicium se retrouve également comme élément de base des premières générations de cellules. Les premiers panneaux solaires utilisés dans l'aérospatiale sur le « US satellite Vanguard 1 » lancé en mars 1958 étaient basés sur une technologie silicium tout comme les panneaux solaires encore commercialisés de nos jours.

Il est également utilisé dans de nombreux dispositifs photoniques (cristaux photoniques, guides d'onde et autre cavités à photons), en tant que détecteurs (photo-détecteurs, détecteurs de particules) et dans beaucoup d'autres dispositifs à base de semiconducteurs utilisés en électronique et autres applications.

### **3-4-Propriétés du silicium :**

#### **3-4-1- Structure cristallographique :**

Le silicium, de même que le germanium cristallisent en une structure de type diamant : constitué de deux réseaux cubiques à faces centrées imbriqués. Sa cellule élémentaire contient deux atomes, l'un en position (0,0,0) et l'autre en position (1/4, 1/4 ,1/4); chaque atome établit des liaisons avec ses voisins situés sur les sommets d'un tétraèdre entourant l'atome central [44]. Le paramètre de maille du cristal est de 5.431 °A pour des conditions normales de pression et de température.

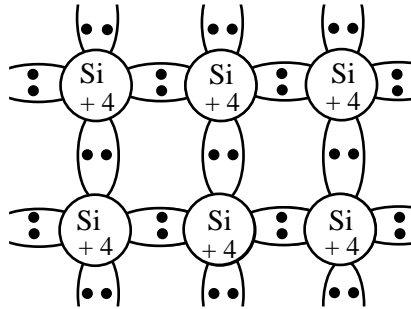


**Figure (I. 22): La structure diamant**

### 3-4-2- propriétés électroniques :

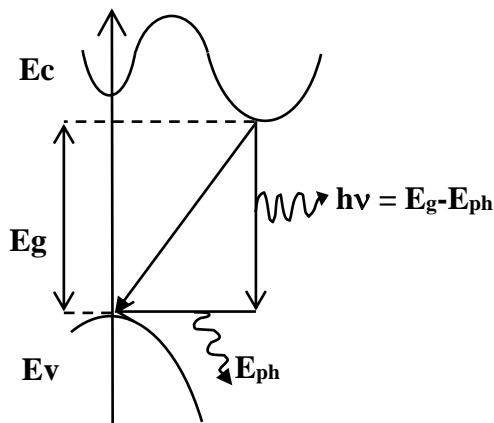
#### a- Structure de bandes :

Comme les autres éléments de la colonne IV du tableau périodique , le silicium possède une structure de bandes étroitement liée à sa structure atomique et à son réseau cristallographique . Sa structure atomique est :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ , il possède donc 4 électrons de valence par atome remplissant 8 états, en tenant compte du spin[43].



**Figure (I. 23) : Liaisons covalentes du Silicium**

En remarquant la structure de bandes, on trouve que pour toute transition de porteurs de charge entre les extremas des deux bandes doit faire intervenir un phonon du fait d'un décalage entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence. La transition est donc non radiative. On dira alors que la structure de bandes du silicium est indirecte.

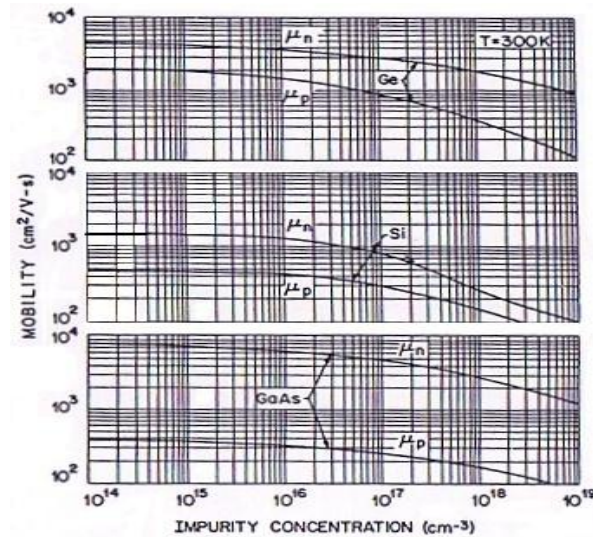


**Figure(I. 24): Structure de bandes du silicium**

#### b- Conductivité électrique :

La conductivité électrique ou son inverse la résistivité électrique, est un paramètre physique qui présente l'un des plus vastes domaines de variation.

Dans un semiconducteur, la conductivité électrique dépend fortement de  $\mu_n$  et  $\mu_p$  (la mobilité des électrons et celle des trous respectivement), ces deux paramètres sont représentés en fonction de la concentration des impuretés pour différents échantillons y compris le silicium sur la Figure (I.27).



**Figure (I. 25): La mobilité des porteurs pour différents semiconducteurs [45]**

### 3-4-3-Propriétés optiques :

Le silicium cristallin est quasiment non luminescent à température ambiante et n'émet que très faiblement à très basse température dans le domaine de l'infrarouge, puisque sa largeur de bande interdite est proche de 1.12 eV à 300°K et 1.17 eV à 0°K.

Il ne présente donc aucun intérêt pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques telles que les diodes électroluminescentes ou laser.

### 3-5-Le silicium nanostructuré :

Le silicium ayant un tel impact technologique et économique, une étude de ce matériau dans sa limite nanométrique se justifie par elle-même.

L'essor des nanomatériaux a entraîné le développement de plusieurs procédés de synthèse de silicium nanostructuré. Deux voies principales peuvent être envisagées dans le cadre de sa synthèse: l'approche par synthèse descendante [aussi appelée en anglais "top-

down"], procédant à partir d'un échantillon massif de silicium, dont on vient retirer de la matière afin de le nanostructurer, et l'approche ascendante [ou "bottom-up"] ou la nanostructuration est construite par ajout de matière, elle repose sur la formation spontanée par regroupement de structures de forme simple.

La synthèse "top-down" des nanostructures ne permet en général qu'une élaboration limitée de la structure finale obtenue. En effet, l'utilisation de cette méthode ne permette d'obtenir que des nanostructures unidimensionnelles, mais l'obtention de structure possédant une architecture avec plus de dimensions reste difficile. Cette méthode est réalisée généralement par la lithographie avec ses différents types [optique, électronique, ionique].

D'un point de vue technologique, les applications des nanostructures de silicium ont connus récemment une évolution rapide pour la fabrication des dispositifs de haute performance tels que les batteries, les cellules solaires, les détecteurs, les capteurs biologiques/chimiques.....etc. Quelques réalisations existent déjà, d'autres restent encore aujourd'hui un rêve mais qui se matérialisera très vite.

### **3-6- Effet de la vitesse de recombinaison en surface :**

Le fort rapport surface / volume apparait comme l'une des propriétés essentielles des nanostructures. D'un point de vue cristallographique, la surface est une rupture du réseau cristallin et les liaisons entre les atomes de surface et leur environnement en tant que défauts du réseau périodique donnent naissance à de nouveaux états électroniques dont les propriétés sont directement liées à la nature de ces liaisons : liaisons pendantes, liaisons Si-H, liaisons Si-O..etc. En effet, l'oxyde natif qui, dans un milieu ambiant, croit en quelques minutes sur plusieurs dizaines d'angströms ( $\text{Å}^\circ$ ) perturbe profondément la structure cristalline au voisinage de la surface

Pour réduire ces centres de recombinaison, on peut utiliser des techniques comme: la rectification, le polissage, l'attaque chimique....etc. Le contrôle de la surface et la maîtrise de son influence sur les propriétés électroniques de l'échantillon apparaissent comme un pas essentiel vers la concrétisation des applications.

## **4- La méthode Monté Carlo**

### **4-1-Introduction :**

La résolution de nombreux problèmes scientifiques nécessite de calculer des sommes, des intégrales, ou encore de résoudre des équations.

Les techniques de calcul direct, encore appelées techniques analytiques, sont très vite dépassées par la complexité des modèles : elles nécessitent souvent des hypothèses trop fortes, de sorte qu'on ne puisse pas les appliquer, ou alors, comme dans le cas de calcul des sommes, le nombre d'opérations requises ne peut être réalisé en un temps raisonnable. On doit alors nécessairement faire appel à des méthodes d'approximation [46].

Dans le domaine d'interaction électron- matière, l'histoire de la particule qui interagit avec le milieu peut être décomposée en une succession d'étapes. Simuler la trajectoire d'une particule c'est reproduire son comportement dans le milieu en prenant en compte l'aspect stochastique des interactions. La méthode Monté Carlo est particulièrement bien adaptée à cet événement puisqu'elle est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires décrivant des distributions statistiques représentatives des différents processus physiques mis en jeu [47].

Cette méthode est très prometteuse puisque sa vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème posé (ce qui n'est pas le cas des méthodes d'analyse classiques). En revanche, elle fournit non pas la solution numérique du problème, mais un intervalle de confiance la contenant avec une probabilité donnée [46] .

### **4-2-Historique :**

*On en retrouve des traces aussi lointaines qu'à l'époque de Babylone et de l'ancien testament. L'application au transport des particules a fait ses premiers pas au cours de la deuxième Guerre mondiale. C'était le nom du dossier secret de Von Neumann, Metroplois et Ulam, visant à résoudre le transport des neutrons dans les milieux fissiles [48]. L'appellation « Monté Carlo » est due à Metropolis, inspiré de l'intérêt de Ulam pour le poker, car Monte Carlo est une ville célèbre pour ses nombreux casinos.*

*Aujourd'hui, elle est utilisée fréquemment, et même pour des problèmes où elle n'était pas la plus adaptée (sciences économiques, prévision électorales, météorologie, l'astrophysique, etc...) partout où il est fructueux d'employer des procédés de simulation.*

### **4-3- Principe :**

La résolution d'un problème probabiliste par la méthode Monté Carlo consiste à déterminer le comportement des nombres aléatoires qui simulent directement les processus physiques qui se produisent, puis à déduire la solution désirée. Cependant, et à cause du nombre important de phénomènes physiques intervenant lors des interactions rayonnements-matière, l'application de la méthode Monté Carlo nécessite de disposer d'une grande population de nombres aléatoires pour simuler l'histoire de chaque particule depuis sa création jusqu'à sa disparition dans le milieu. Ces nombres proviennent généralement de suites mathématiques intégrées dans des algorithmes appelés *générateurs*. La qualité du générateur dépend de sa capacité à fournir un grand nombre de valeurs uniformément distribuées et statistiquement indépendantes, avec une période (temps au bout duquel la séquence de nombres est répétée) longue[47].

### **4-4-Nombres aléatoires :**

Le principe du tirage aléatoire est une des pierres angulaires de la méthode Monté Carlo. Une suite  $u_i$  de nombres aléatoires est un échantillon distribué sur un intervalle  $[0,1]$ . Le processus est initié par un germe  $u_0$ . Chaque germe engendre une suite déterministe, d'où l'expression de nombres pseudo-aléatoires, mais le choix du germe peut être confié à un aléa : par exemple à partir des secondes de l'horloge du calculateur.

La plupart des logiciels de calcul et même certaines calculettes possèdent une fonction de génération sous des noms : RANDOM, RND, RAN, ALETOIRE.....

Un générateur possède certaines propriétés :

- **Périodicité** : le codage numérique est effectué sur un nombre fini de bits pour trouver la période  $p$  tel que :  $u_{i+p} = u_i$  est possible. Il est bien sur nécessaire de disposer d'un générateur dont la période est largement supérieure à la taille de l'échantillon.

- **Convergence** : Il faut également se rappeler qu'il s'agit d'une génération statistique nécessitant un nombre de tirages  $N$  suffisant. La loi des statistiques montrent que la convergence est  $\sqrt{N}$ .

#### **4-5- Génération de nombres aléatoires :**

Bien qu'il soit toujours possible de construire une séquence aléatoire à partir des réalisations d'une expérience aléatoire (lancer une pièce de monnaie, placer des boules numérotées dans une urne et effectuer des tirages au hasard et avec remise.....etc), ce procédé est laborieux et peu automatisable. Il est donc utile de disposer d'une méthode arithmétique capable de produire une telle séquence avec un minimum d'effort.

Des méthodes numériques ont été utilisées pour générer des nombres aléatoires, on va détailler seulement celle qui nous intéresse :

##### **La Méthode de congruence (génération à récurrence linéaire modulo) :**

La méthode la plus simple et la plus couramment utilisée est la méthode des congruences linéaires (génération à récurrence linéaire modulo).

Cette méthode consiste à générer une suite  $(x_n)_{n \geq 0}$  de nombres entiers compris entre 0 et  $m - 1$  de la façon suivante :

$$\begin{cases} x_0 = \text{la valeur initiale} \in \{0, 1, \dots, m-1\} \\ x_{n+1} = (a x_n + b) \bmod m \end{cases} \quad (\text{I.29})$$

On appelle  $m$  (le module) supérieur à 0.

$a$  (le multiplicateur) compris entre 0 et  $m$ .

$b$  (l'incrément) également compris entre 0 et  $m$ .

$x_0$  est la première valeur de la séquence (germe ou graine).

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

Sedgewick préconise le choix suivant [49]:

$$\begin{cases} a = 31415821 \\ b = 1 \\ m = 10^8 \end{cases} \quad (\text{I.30})$$

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

Le générateur précédent fournit des résultats acceptables dans les cas courants. Cependant sa période (ici  $m = 10^8$ ) peut se révéler parfois insuffisante. On peut, alors, obtenir des générateurs de nombres aléatoires de période arbitrairement longue en augmentant  $m$  [49].

On parle plus précisément de nombres pseudo-aléatoires puisque ces derniers sont générés via une expression récurent analytique.



## *Chapitre N° 2*

## *Chapitre II: Modélisation*

### *1-Introduction:*

Une étude expérimentale en utilisant la technique EBIC nécessite la réalisation d'une jonction (jonction p-n, diode Schottky ou nano-contact pour les structures nanométriques) ce qui est une tâche à la fois longue et complexe que ce soit pour la préparation des échantillons et qui n'est pas toujours réussie, ou la préparation du dispositif expérimental qui nécessite beaucoup de réglages afin de mieux réussir une image ou un spectre. En effet, l'une des causes principales est la petitesse du courant induit qui, si l'on ne fait pas une préparation préalable des dispositifs de mesure et d'acquisition, serait « bruité » et réduirait la résolution de la technique.

Grâce aux progrès constants des moyens de calculs informatiques, la simulation numérique est devenue incontournable en science des matériaux, en parallèle avec les moyens expérimentaux classiques. Elle permet d'effectuer des expériences virtuelles à moindre coût ou des expérimentations impossibles techniquement, de tester et de valider des modèles théoriques.

Effectivement, pour aider à la compréhension des caractéristiques des matériaux à l'échelle nanométrique, les chercheurs ont trouvé un allié : la simulation numérique, cette branche qui est à mi-chemin entre la théorie et l'expérience, là où on cherche à reproduire sur ordinateur le comportement d'un phénomène dans la matière.

Les études qui concernent l'application de la technique EBIC pour la caractérisation des matériaux ont été traitées dans plusieurs papiers [1,10,12,20,21,24,28-31....]. Pour cette grande importance de ce domaine, on a voulu créer notre propre modèle qui sera inspiré de l'étude de l'interaction électron matière en général et son utilisation à l'application de la technique EBIC au silicium nanostructuré en particulier.

En tenant compte des avantages fournis par la méthode Monté Carlo, on a préféré que ce modèle soit numérique dans toutes ses étapes en se basant sur les propriétés de cette dernière.

En conséquence, nous développerons dans ce chapitre un algorithme de simulation Monté Carlo, pour étudier et suivre le mouvement d'un électron incident et son énergie perdue lors des collisions le long de son trajet dans un échantillon de silicium nanostructuré. Le courant EBIC collecté et l'effet de plusieurs paramètres sur ces phénomènes très importants sont aussi traités. Rappelons qu'il ne s'agit aucunement de simuler la technique EBIC standard, mais plutôt la technique nano-EBIC étant donné que le courant induit sera collecté par un nano-contact.

## *2- Aperçu général sur des études antérieures:*

Le nombre d'interactions d'un électron primaire pendant sa pénétration, avec les atomes de l'échantillon étudié, est très grand. L'étude des trajectoires de tous les électrons primaires, en prenant en compte chaque événement individuellement, nécessite des temps de calcul très vite prohibitifs malgré les performances acquises par l'informatique d'aujourd'hui. Ainsi, une méthode détaillée qui consiste à ce que le trajet peut être suivi pas à pas ne pourra être appliquée que si l'énergie primaire est relativement faible.

Dans le cas des énergies plus élevées, la méthode "condensée" proposée par Berger [50] est généralement employée. Elle consiste à regrouper un nombre d'évènements du même type (profondeur de pénétration par exemple) en simulant un événement global. L'histoire de l'électron est découpée en plusieurs partis appelés pas, où on trouve une profondeur de pénétration moyenne.

Donc, et selon ce classement, on trouve trois types de codes: les codes de type "I" utilisent la méthode condensée alors que les codes de type "II", dits aussi codes mixtes, associent méthode condensée et méthode détaillée. Ces deux types de codes suivent les électrons pénétrants sous une haute énergie primaire.

Il existe aussi le troisième type pour la simulation détaillée, il suit les électrons de faible énergies primaires ( $< 100$  KeV), jusqu'à ce qu'elles atteignent une valeur de quelques eV.

Ces codes, sont mis au point pour des applications très spécifiques comme la micro-et la nano-dosimétrie, ou la radiobiologie. Parmi eux, on trouve les codes **OREC** (**O**ak **R**idge **E**lectron transport **C**ode), **MOCA** (**M**onte **C**arlo simulator code)...etc. Dans la plupart des cas, ils ont été mis au point pour des milieux bien particuliers et bien déterminés. Très performants pour ce type de problèmes spécifiques, ils sont en revanche rarement transposables à des géométries ou des milieux différents.

Le code **MCNP** (**M**onte **C**arlo **N**-**P**articles) a été élaboré pour simuler le transport des particules non chargées.


Le code **GEANT** (**G**Eometry **A**ND **T**racking) est relativement utilisé, mais au domaine des très basses énergies (moins de 16 eV) il n'est valide que pour le silicium [51].

Deux codes sont plus récents, le code **PENELOPE** (**P**ENetration and **E**nergy **L**O of **P**ositrons and **E**lectrons) et le code **CASINO** qui est l'acronyme de (monte **C**ARLO **S**imulation of electro**N** trajectory in **s**OLID) développé par le professeur Dominique Drouin et ses collègues à l'université de Sherbrooke.

Ces codes - en particulier les deux derniers - ont plusieurs versions (chaque version est plus récente que sa précédente en ajoutant chaque fois plus de paramètres).

Mais le problème essentiel avec ces codes réside toujours dans le fait qu'ils ne sont pas élargis à l'application au domaine des microscopies (Cathodoluminescence, EBIC, LBIC, Microanalyse X ....etc) et ils se limitent à l'interaction entre les particules et le milieu étudié pour quelques domaines d'énergies ou quelques types de particules, alors qu'en réalité ces interactions ne sont qu'un outil utilisé au regard de la microscopie.

### 3- Le générateur des nombres aléatoires utilisé :

*"Le vrai hasard étant hasardeux, contentons-nous d'un pseudo-  
hasard et adaptons le à nos besoins" *

J.P. DELAHAYE

La méthode Monté Carlo repose sur la génération d'une grande population de nombres aléatoires. Chaque langage informatique de programmation adopte son propre générateur de ces nombres.

#### 3-1-La fonction "Ran":

Avant d'utiliser le générateur des nombres aléatoires adopté par le langage Fortran (langage de programmation choisi pour l'élaboration de notre modèle numérique) qui est bien la fonction "**Ran**", il nous a fallu connaître ses propriétés.

La génération des nombres aléatoires a été introduite sous sa forme bien détaillée au langage Fortran par James [52].

La fonction Ran est définie comme étant la fonction d'exécution qui génère un nombre aléatoire supérieur ou égal à zéro et moins de un.

Cette fonction utilise le générateur congruentiel linéaire suivant :

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

Où :  $m = 2^{31}$ ,  $a = 843314861$ ,  $c = 453816693$  [53]

Sa période est bien sûr égale à  $m$ .

Pour se ramener à des nombres réels compris dans l'intervalle  $[0,1]$ , il faut diviser les entiers obtenus par  $m$ .

La syntaxe de la fonction Ran est la suivante :

**Le résultat = Ran (*iseed*) (II.2)**

Le terme *iseed* (germe en français), est la valeur initiale donnée pour faire tourner le programme. Par défaut le germe est  $X_0 = 0$  [53].

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

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

Notons que tous les nombres aléatoires générés par ordinateur sont des suites parfaitement déterministes qui apparaissent comme aléatoires (pour les bons générateurs) selon un certain nombre de tests statistiques.

### 3-2-Vérification de l'efficacité de "Ran ":

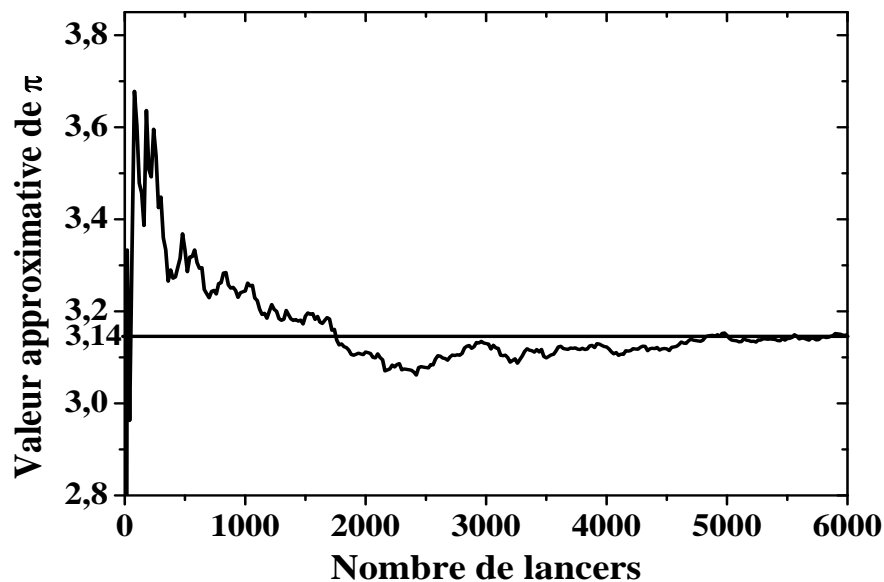
Le test d'un générateur de nombres aléatoires en général consiste à vérifier son efficacité à faire générer des nombres qui ne dépendent qu'aux lois du hasard.

#### Aiguille de Buffon:

On a choisi pour effectuer ce test, de calculer la valeur de " $\pi$ " en appliquant l'expérience du savant connu "Buffon".

L'expérience consiste à trouver la probabilité pour qu'une aiguille lancée au hasard coupe une des droites parallèles équidistantes tracées - (La description de cette expérience en plus de notre organigramme concernant le calcul de  $\pi$  en se basant sur elle seront détaillés dans **Annexe I**) -.

**Résultat** : Après un certain nombre suffisamment élevé de lancers, on trouve des résultats qui sont en bonne concordance avec la valeur de  $\pi$  trouvée souvent dans la littérature.



*Figure (II.1): Tester l'efficacité de la fonction "Ran" en utilisant l'expérience de Buffon*

#### 4- Les principes physiques du modèle :

Il est nécessaire d'avoir une parfaite connaissance de tous les paramètres influençant les phénomènes physiques englobant notre étude:

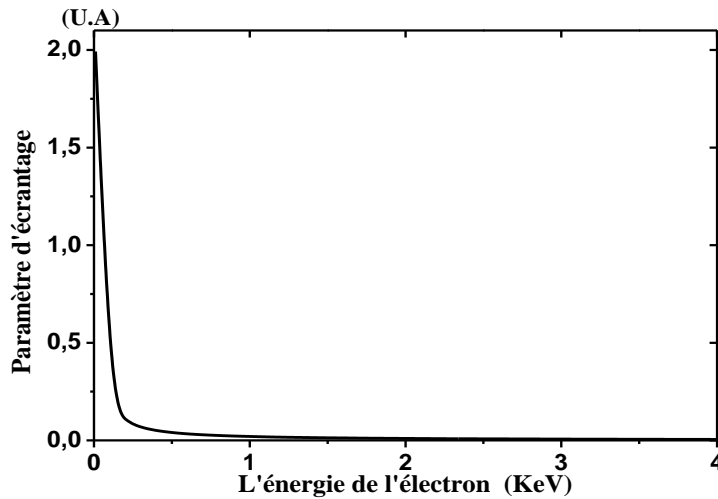
##### 4-1-Paramètre d'écrantage:

Le paramètre d'écrantage de la diffusion " $\delta$ " 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 orbites.

Ce facteur est donné par l'expression suivante [54]:

$$\delta = (3,4 \cdot 10^{-3}) \cdot \frac{Z^{0,67}}{E(KeV)} \quad (II.3)$$

Où  $Z$  est le numéro atomique et  $E$  est l'énergie instantanée de l'électron.



**Figure (II.2):** Le paramètre d'écrantage dans le cas du silicium en fonction de l'énergie instantanée de l'électron

#### 4-2-La section efficace élastique totale :

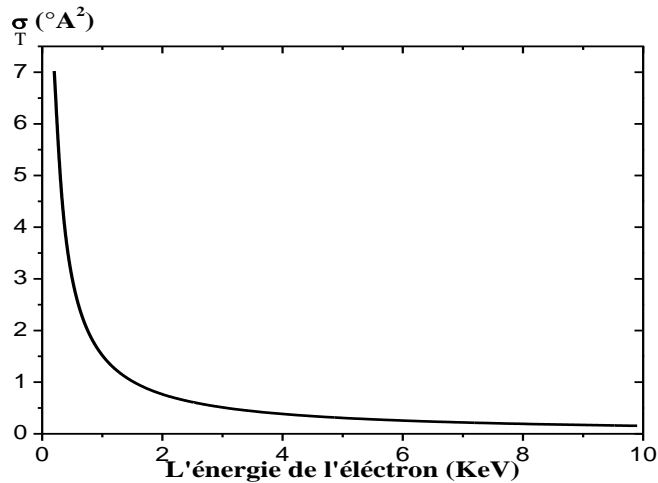
La section efficace totale de diffusion élastique  $\sigma_T$  est donnée par la formule [25]:

$$\sigma_T = (5,21 \cdot 10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E+m_0c^2}{E+2m_0c^2} \right]^2 \cdot \frac{4\pi}{\delta(\delta+1)} \quad [cm^2/atome] \quad (II.4)$$

Où  $m_0$  est la masse de l'électron au repos et  $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide.

$\sigma_T$  diminue lorsque l'énergie augmente, cela signifie que les électrons auront de plus en plus de chance de passer sans interactions élastiques à travers un plan atomique.





**Figure (II.3):** La section efficace totale du diffusion élastique dans le cas du silicium en fonction de l'énergie instantanée de l'électron

### 4-3-Le libre parcours moyen :

Le libre parcours moyen est défini comme étant la distance entre deux collisions successives du même type (élastiques ou inélastiques).

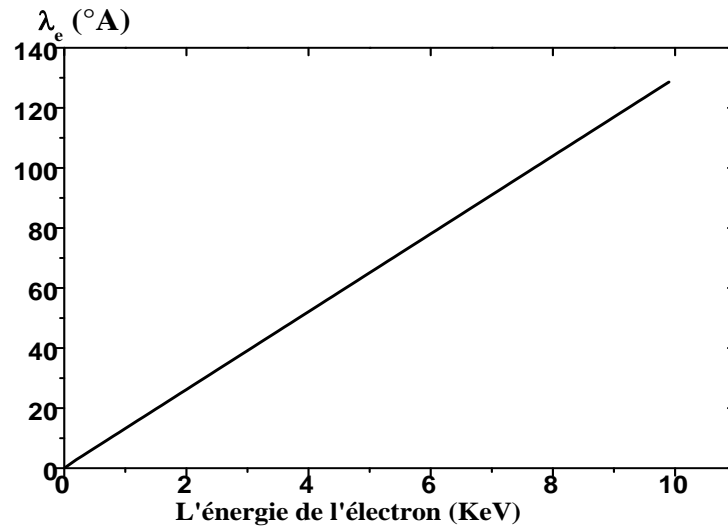
#### a-élastique:

Le libre parcours moyen élastique  $\lambda_e$  a été définie par Bauer [55]:

$$\lambda_e = \frac{1}{N \cdot \sigma_T} \quad (^{\circ}A) \quad (II.5)$$

Avec :  $N$  : densité des atomes / $^{\circ}A^3$

$\sigma_T$  : en  $^{\circ}A^2$



**Figure (II.4):** Le libre parcours moyen élastique  $\lambda_e$  dans le cas du silicium en fonction de l'énergie instantanée de l'électron

**b-inélastique:**

Tanuma et al.[56] ont publié les valeurs du parcours moyen inélastique pour 56 matériaux entre des éléments purs et composés, leur modèle a été publié en 1993 sous la forme de l'équation suivante :

$$\lambda_i = \frac{E}{\left[ E_p^2 \left( \beta \ln(\gamma E) - \frac{C}{E} - \frac{D}{E^2} \right) \right]} \quad \text{(II.6)}$$

Où  $E_p, \beta, \gamma, C$  et  $D$  sont des constantes dépendantes de:

$N_v$ : Le nombre d'électrons de valence par atome ou molécule.

$\rho$ : La masse volumique ( $\text{g/cm}^3$ )

$E_g$ : Le gap du matériau (eV)

$A$ : La masse atomique ou moléculaire (g)

avec:

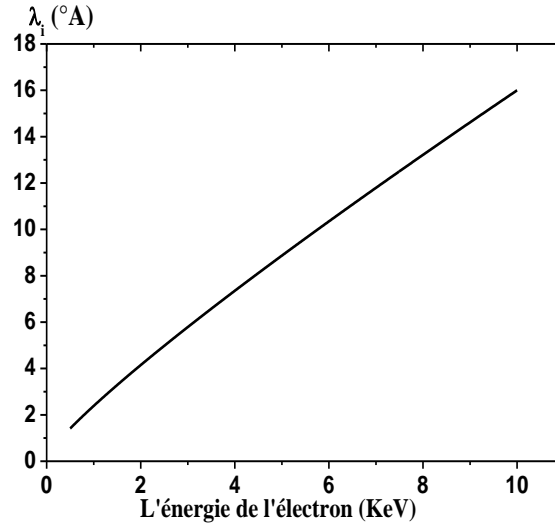
$$E_p = 28,8 \left( \frac{\rho N_v}{A} \right)^{1/2}$$

$$\beta = -0,10 + 0,944(E_p^2 + E_g^2)^{-1/2} + 0,069\rho^{0.1}$$

$$C = 1,97 - 0,91 \frac{N_v \rho}{A}$$

$$D = 53,4 - 20,8 \frac{N_v \rho}{A}$$

$$\gamma = 0.191 \rho^{-0.5}$$



**Figure (II.5):** Le libre parcours moyen inélastique  $\lambda_i$  dans le cas du silicium en fonction de l'énergie instantanée de l'électron

**c-total:**

$\lambda_{Tot}$  est le libre parcours moyen total donné par l'expression suivante : (Adesida et al. [57];,Kang-Yoon et al. [58]:)

$$\frac{1}{\lambda_{Tot}} = \frac{1}{\lambda_e} + \frac{1}{\lambda_i} \quad (II.7)$$

#### 4-4- La perte d'énergie :

Lorsqu'un électron énergétique interagit avec un échantillon semiconducteur, il va céder une partie ou la totalité de son énergie en créant des paires électron-trou.

On va prendre en considération, que cette énergie est perdue de façon continue suivant les interactions qu'il subira à l'intérieur de l'échantillon.

La perte d'énergie de l'électron (pouvoir d'arrêt du matériau) par unité de distance parcourue est déterminée par [59]:

$$\frac{E_{i+1}-E_i}{S} = - \left| \frac{dE}{dS} \right|_{E_i} \quad (\text{II.8})$$

Où  $(dE/dS)$  est la dissipation d'énergie par unité de distance parcourue "S".

La distance **S** dépend directement du libre parcours moyen et ce dernier dépend à la fois de l'énergie de l'électron incident et de la nature du matériau cible comme on l'a vu ci dessus.

D'après l'expression de Bethe [22]:

$$\frac{dE}{dS} = -7,85.10^4 \left( \frac{\rho \cdot Z}{A \cdot E} \right) \cdot \ln \left( \frac{1.166 E}{J} \right) \quad (\text{keV/cm}) \quad (\text{II.9})$$

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

**J** : le potentiel moyen d'ionisation du matériau qui a été étudié par plusieurs chercheurs :

pour les éléments où  $Z < 6$  [10]:  $J (eV) = 13 Z$  (II.10)

et pour les éléments  $Z > 25$  [59]:  $J (eV) = 11.5 Z$  (II.11)

Dans des formules plus générales on trouve :

soit la formule de Berger - Selzer [60]:

$$J (eV) = (9.76Z + \frac{58.5}{Z^{0.19}}) \quad (\text{II.12})$$

Soit par la formule de Zeller [61]:

$$J (eV) = 10.04 Z + 8.25 Z \exp\left(-\frac{Z}{11.22}\right) \quad (\text{II.13})$$

Dans le cas du silicium les deux formules (II.12) et (II.13) donnent les valeurs 172.07 et 173.72 eV respectivement qui ne diffèrent pas trop l'une de l'autre.

On peut se rendre compte que l'expression (II.9), donnée par Bethe, n'est plus valide quand l'énergie de l'électron primaire se trouve inférieure au potentiel moyen d'ionisation  $J$ .

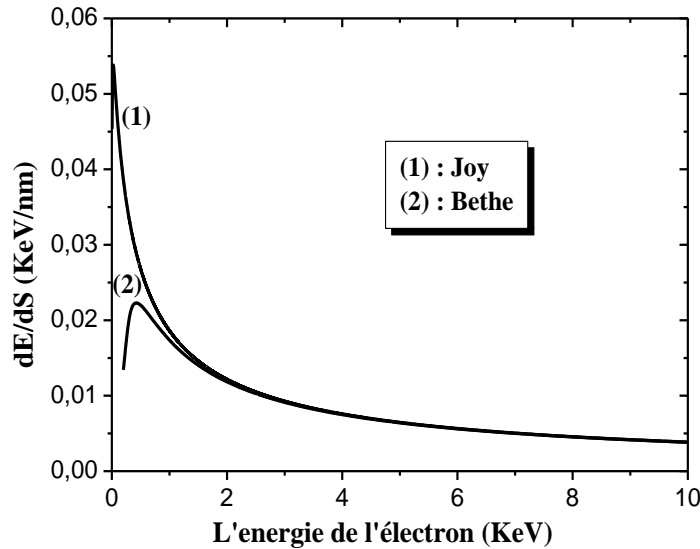
En effet, le facteur  $\ln(1.166 E/J)$  devient négatif rendant cette expression inutilisable. Pour surmonter ce problème Joy [62] a remplacé cette expression par:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \cdot 10^4 \left(\frac{\rho \cdot Z}{A \cdot E}\right) \cdot \ln\left(\frac{1.166 \cdot (E + K + J)}{J}\right) \quad (\text{KeV/cm}) \quad (\text{II.14})$$

Où  $K$  est une constante dépendante du matériau,  $K= 0.85$  pour le silicium.

Cette expression permet d'effectuer une simulation de la perte d'énergie pour des énergies électroniques inférieures au potentiel moyen d'ionisation.

La figure suivante représente la perte d'énergie suivant les formules de Joy [62] et Bethe[22] avec le potentiel moyen d'ionisation  $J$  de Zeller [61].



**Figure (II.6): La perte d'énergie d'un électron primaire selon Bethe[22] et Joy[62] dans un échantillon en silicium**

Après une certaine valeur d'énergie, on trouve que le choix entre les deux valeurs 1 et 1.166 n'a plus d'influence parce qu'elle est à l'intérieur du logarithme.

#### 4-5- L'énergie de formation d'une paire électron-trou :

Pour déterminer cette valeur, on s'est basé sur le modèle de Klein qui conduit à une énergie de formation d'une paire sous la forme d'une somme de trois termes [1]:

$$E_{e-h} = E_g + \langle E_k \rangle + \langle E_r \rangle \quad (\text{II.15})$$

$E_g$  : l'énergie du gap.

$\langle E_k \rangle$  : l'énergie moyenne de thermalisation par vibration du réseau et qui égal à [1]:

$$\langle E_k \rangle = (9/5) E_g \quad (\text{II.16})$$

$\langle E_r \rangle$ : l'énergie moyenne de la création d'un phonon optique.

Ce dernier terme a été évalué par Shockley [1]:

$$\langle E_r \rangle = r_0 h \nu \quad (\text{II.17})$$

Pour le silicium,  $r_0$  est estimé à 8 et  $h\nu$  est déterminé expérimentalement à 0.037 eV [1].

Dans ces conditions, la valeur de  $E_{e-h}$  est de 3.6 eV.

## 5- Elaboration du modèle :

### 5-1-Simulation de l'interaction électron-matière :

On considère un faisceau d'électrons primaires d'énergie " $E_0$ " et d'angle d'incidence " $\alpha$ " par rapport à la normale de la surface de l'échantillon.

Chaque électron va subir une étude individuelle qui représente le suivi de son parcours jusqu'à ce qu'il subisse une interaction inélastique, une réflexion vers l'extérieur de l'échantillon ou être transmis à partir de la surface arrière de ce dernier.

Pour appliquer notre modèle numérique, il est nécessaire de connaître :

- (1): les angles des déviations que subit l'électron.
- (2): la distance parcourue par l'électron entre deux interactions sous une énergie incidente donnée.
- (3): la fraction d'énergie perdue lors de chaque interaction inélastique.

#### 5-1-1-Simplifications :

Pour simplifier le calcul, nous allons dans notre étude ignorer quelques effets, donc :

- 1- Le diamètre du faisceau électronique incident est négligé (faisceau ponctuel).
- 2- Nous travaillons sous température ambiante, et l'augmentation de cette dernière pendant les interactions est négligée.

#### 5-1-2- Collisions des électrons primaires avec l'échantillon :

Les trajectoires électroniques dans un semiconducteur ont un aspect aléatoire, sachant que la création des paires électrons-trous se déroule tout au long du parcours[10]; c'est pour cette raison que la simulation de Monté Carlo est généralement utilisée.

Lorsque l'électron primaire franchira la surface du semiconducteur, il va être dévié de sa direction initiale. Cette déviation dépend du type de l'interaction:

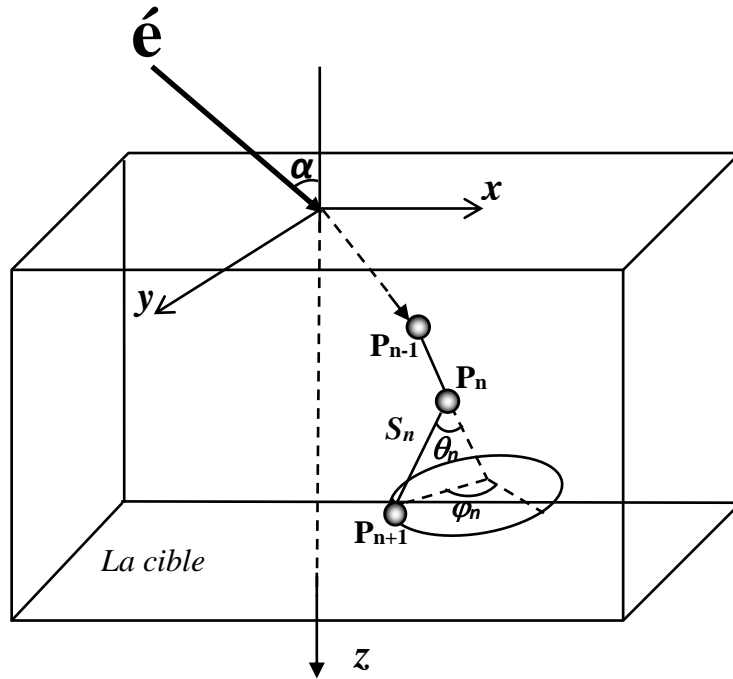
- 1- Si l'interaction est élastique, l'angle de déviation varie typiquement de  $0^\circ$  jusqu'à  $180^\circ$ .
- 2- Dans le cas d'une interaction inélastique, il dépend de l'énergie perdue; plus l'énergie perdue est grande, plus l'angle de déviation est grand, mais il reste relativement très faible. Effectivement, la contribution de ce type d'interaction à la diffusion des trajectoires est prise en compte très grossièrement en ajoutant à la section efficace élastique totale un facteur correctif dit facteur de Fano [70]. Dans notre étude, elle est considérée négligée.

La déviation de cette orientation peut être déterminée en utilisant deux angles  $\theta$  (angle de diffusion longitudinale qui est l'angle entre la direction initiale de l'électron incident et la direction de diffusion) et  $\varphi$  (angle de diffusion azimutale déterminé dans le plan perpendiculaire à la direction des électrons).

Ces deux angles sont ceux qui contrôlent la direction de l'électron incident à l'intérieur de la cible dans les trois directions de l'espace et ils sont déterminés de façon aléatoire[54].

L'application de la méthode Monté Carlo consiste à décomposer la trajectoire de chaque électron en un grand nombre de séquences (Figure (II.7)) :





**Figure (II.7):** Représentation d'une séquence de la trajectoire d'un électron primaire dans la cible

$\theta$  et  $\varphi$  sont sélectionnés aléatoirement, ils sont distribués entre  $0^\circ$  et  $\pi$  pour  $\theta$ , et entre  $0^\circ$  et  $2\pi$  pour  $\varphi$ . Ce qui signifie que l'électron diffuse à un autre point de la cible avec une équiprobabilité suivant toutes les directions[54].

$\varphi$  est exprimé par [54] :

$$\varphi = 2 \pi R_1 \quad (\text{II.18})$$

L'angle  $\theta$  peut être déterminé en utilisant l'expression [54]:

$$\text{Cos } \theta = 1 - \frac{2 \delta R_2}{1 + \delta - R_3} \quad (\text{II.19})$$

Où  $R_1$ ,  $R_2$  et  $R_3$  sont des nombres aléatoires distribués dans l'intervalle  $[0,1]$ .

Après chaque collision l'électron incident diffuse sur une certaine distance avant d'avoir une nouvelle collision.  $S$  est la longueur d'étape de la trajectoire électronique séparant deux événements de diffusion (deux collisions), sachant que cet électron va subir des collisions aléatoires et successives jusqu'à la fin de sa trajectoire.

Le nombre des électrons qui restent dans l'échantillon après cette distance est :

$$n_S = n_{ele} e^{-S/\lambda_{Tot}} \quad (II.20)$$

Où  $n_{ele}$  est le nombre des électrons incidents primaires (initial).

Donc la probabilité pour qu'un électron subira une autre collision après cette dernière est:

$$P_S = \frac{n_{ele} - n_S}{n_{ele}} = 1 - e^{-S/\lambda_{Tot}} \quad (II.21)$$

Alors, on aura:

$$S = -\lambda_{Tot} \ln (1 - P_S) \quad (II.22)$$

En changeant  $(1 - P_S)$  par un nombre aléatoire on trouvera que [57]:

$$S = -\lambda_{Tot} \ln (R_4) \quad (II.23)$$

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

Dans ce cas, on a choisi que  $R_4$  sera une valeur aléatoire appartenant à l'intervalle semi-ouvert  $]0, 1]$  pour éviter une impossibilité dans le calcul de  $S$  ( $S$  tend vers  $(-\infty)$  quand  $R_4$  égal à 0).

### **5-1-3-Les trajectoires des électrons primaires :**

Comme on l'a déjà mentionné, notre programme simule la trajectoire 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 nouvelles paires.

Donc, l'électron primaire continu de créer des paires après plusieurs collisions jusqu'à ce que son énergie atteigne une énergie minimale, valeur à partir de laquelle nous considérons que l'électron est fortement ralenti et qu'il ne peut plus générer de nouvelles paires. Cette valeur est connue sous le nom de  $E_{cutt-off}$  [63] :

$$E_{\text{cutt-off}} = 50 \text{ eV}$$

(II.24)

L'énergie  $E_{\text{cutt-off}}$  est prédéfinie. Notons que le choix de cette valeur d'énergie est basé sur le fait que les paires électron-trou auront à la fois un nombre très faible et une énergie très réduite, ce qui conduit à une recombinaison instantanée.

Si l'énergie de l'électron incident est moins ou égale à cette valeur, alors le programme s'arrêtera, puis la même procédure est répétée pour le prochain électron primaire etc....

Lorsqu'on connaît la direction prise et la distance parcourue par l'électron on peut déterminer sa position suivante dans le matériau.

La position des électrons est déterminée en utilisant les coordonnées sphériques. Si on connaît les angles de diffusion  $\theta$  et  $\varphi$ , on peut trouver les expressions des cosinus directeurs qui nous permettent de connaître la position de l'électron à l'étape  $n+1$  (point  $p_{n+1}$ ).

On répète ce travail un grand nombre de fois dans le but d'avoir toutes les trajectoires électroniques.

À partir de la Figure (II.7) on trouve que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos \theta_{n+1} = \cos \theta_n \cos \theta - \sin \theta_n \sin \theta \cos \varphi \\ \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n) = \frac{\cos \theta - \cos \theta_n \cos \theta_{n+1}}{\sin \theta_n \sin \theta_{n+1}} \end{array} \right. \quad \text{(II.25)}$$

(II.26)

On peut donc obtenir :

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{n+1} = x_n + S_n (\sin \theta_n \cos \varphi_n) \\ y_{n+1} = y_n + S_n (\sin \theta_n \sin \varphi_n) \\ z_{n+1} = z_n \cos \theta_n \end{array} \right. \quad \text{(II.27)}$$

(II.28)

(II.29)

Les calculs qu'on a effectués pour trouver ces formules sont détaillés à l'Annexe II.

Dans notre approche, le type de collision est sélectionné aléatoirement suivant la valeur du nombre aléatoire  $R_5$  :

Si la condition

$$R_5 \leq (1/\lambda_e) / (1/\lambda_i) \quad (\text{II.30})$$

est satisfaite alors la collision est élastique, si non c'est le cas contraire (collision inélastique).

Par contre, le type de la première collision est introduit dans notre programme manuellement (choix d'une collision élastique).

#### 5-1-4-Le maximum de la profondeur de pénétration :

On va étudier le parcours électronique entier suivant deux directions:

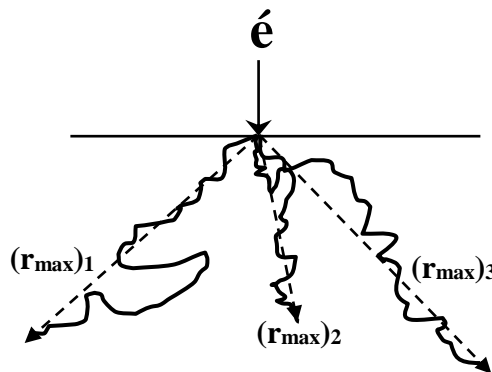
En profondeur : qui est la même direction de l'arrivée du faisceau électronique primaire (en incidence normale).

En largeur : ou transversal, qui est la direction perpendiculaire au faisceau électronique primaire (en incidence normale).

##### a- En profondeur :

Le maximum de la profondeur de pénétration est calculé simplement comme étant la distance dont laquelle la particule diffuse avant de perdre toute son énergie.

Dans notre modèle on a fait appel à une variable désignée par le nom " $r_{max}$ " qui est la distance la plus grande qui peut être traversée par un électron incident.



**Figure (II.8): Représentation des distances maximales  $(r_{max})_i$  parcourues par les électrons primaires**

Donc :

$$(r_{max})_i = [(x_n)_i^2 + (y_n)_i^2 + (z_n)_i^2]^{1/2} \quad (\text{II.31})$$

Avec  $((x_n)_i, (y_n)_i, (z_n)_i)$  sont les coordonnées du point  $n$  correspondant à la dernière collision de l'électron  $i$ .

Par conséquent, pour un faisceau électronique contenant  $n_{ele}$  électrons pénétrants dans l'échantillon, le maximum de la profondeur de pénétration sera la moyenne des  $(r_{max})_i$  :

$$R_e = \frac{\sum_{i=1}^{n_{ele}} (r_{max})_i}{n_{ele}} \quad (\text{II.32})$$

### 6- En largeur:

D'après la figure (II.8) et par similarité par rapport à la formule (II.32), on aura :

$$X_{max} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{ele}} |(X_n)_i|}{n_{ele}} \quad (\text{II.33})$$

### 5-1-5-Les électrons rétrodiffusés:

Pratiquement on définit le coefficient de rétrodiffusions  $\eta_B$  comme étant le rapport des électrons sortants de l'échantillon dont l'énergie excède 50 eV aux électrons injectés [2].

De notre part et concernant notre modèle, il suffit de commencer avec un nombre d'électrons rétrodiffusés nul, et que chaque fois qu'un électron sortira de la même surface d'entrée (ceci correspond à une profondeur  $z$  négative) ce nombre augmentera d'un électron.

Donc pour chaque étape corresponde à cette condition on aura :

$$n_{retro} = n_{retro} + 1 \quad (\text{II.34})$$

Si non il restera inchangé.

5-1-6-Les électrons transmis :

Les électrons transmis sont les électrons qui traversent l'échantillon et ressortent de la surface arrière à cause de l'épaisseur limitée de ce dernier.

Par similarité aux rétrodiffusés et secondaires, ils sont déterminés par leur coefficient qui est le rapport entre leur nombre et celui des électrons injectés.

La transmission est liée en particulier à l'épaisseur de l'échantillon, c'est pour cela qu'on a fait appel à une variable portant le nom de "**thickness**" dans notre programme.

Cette variable peut prendre aisément n'importe quelle valeur logique. Cependant, à cause des limites de notre sujet de recherche (échelle nanométrique), on s'est limité aux valeurs appartenant à cette gamme.

On commencera par un nombre d'électrons transmis nul, et dans chaque étape d'exécution si la condition suivante aura lieu :  $z > \text{thickness}$  , alors le nombre des électrons transmis augmentera :

$$n_{trans} = n_{trans} + 1 \quad (\text{II.35})$$

Si non il restera inchangé.

5-1-7-La perte d'énergie :

On va considérer que l'électron perd son énergie par transfert aux électrons des orbites en négligeant la perte radiative avec les noyaux (rayonnement de Bremsstrahlung).

Entre deux interactions inélastiques successives (là où le type de collision est déterminé par la formule (II.30)) l'électron incident va perdre une partie de son énergie  $\Delta E$ .

On va faire appel aux deux variables "**Energ 1**" et "**Energ 2**" correspondant aux énergies des deux interactions étudiées.

Donc :

$$(\Delta E) = (Energ2 - Energ1) \quad (\text{II.36})$$

La perte d'énergie par unité de distance est :

$$\boxed{(\Delta E / \Delta S) = (Energ2 - Energ1) / S} \quad (\text{II.37})$$

Après avoir déterminer la valeur de  $S$  (équation (II.23)) et en se basant sur la formule (II.14) de Joy[62], sachant que la première valeur de l'énergie qui correspond à la première interaction inélastique dans l'échantillon est la même que l'énergie du faisceau primaire  $E_0$ , on pourra déterminer l'énergie de l'électron incident après chaque interaction inélastique.

A la fin de chaque étape, on déclare au programme que la variable "Energ2" sera la nouvelle valeur de la variable " Energ1" pour la prochaine collision, et ainsi de suite jusqu'à la fin du parcours.

### 5-1-8-Les électrons secondaires :

Seuls les électrons secondaires produits à une certaine profondeur proche de la surface de l'échantillon peuvent émerger. Le maximum de cette profondeur " $\Lambda$ " est comme on l'a vu auparavant est appelé profondeur d'échappement des électrons secondaires.

Dans notre simulation on a adopté les deux paramètres de Joy [64] qui caractérisent ce phénomène; l'énergie nécessaire pour la création d'un électron secondaire " $\epsilon$ " et la profondeur d'échappement " $\Lambda$ ".

Joy [64] a déterminé ces deux paramètres dans le cas du silicium en leur donnant les valeurs suivantes :

$$\epsilon = 70 \text{ eV} \text{ et } \Lambda = 3.0 \text{ nm}. \quad (\text{II.38})$$

Les conditions qu'on va donc introduire au programme pour qu'un électron secondaire soit comptabilisé sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta E - \epsilon \geq 0 \\ z \leq \Lambda \end{array} \right. \quad (\text{II.39})$$

$$(\text{II.40})$$

**5-1-9-L'émission électronique totale :**

Dans notre modèle, une fois les valeurs des deux émissions rétrodiffusée et secondaire seront déterminées (calculées numériquement) pour chaque valeur d'énergie primaire, le rendement total sera très facile à déterminé de son tour, car il suffit de faire une simple sommation des deux valeurs précédentes.

**5-1-10-Programme de simulation :**

On a réalisé un programme simple d'utilisation et performant en se basant sur les bases précédentes. On a écrit ce programme en langage Fortran pour sa souplesse et sa rapidité.

Après avoir achever l'écriture du programme, la procédure est très simple: Il suffit de faire entrer les données qui figurent dans le tableau suivant :

<i>Matériau</i>	<i>Faisceau électronique</i>	<i>Génération de nombres aléatoires</i>
Nombre atomique	Nombre d'électrons incident	Germes de la fonction <b>Ran</b>
Masse atomique	Energie primaire	
Masse volumique	Angle d'incidence	
Epaisseur		
Profondeur d'échappement d'un électron secondaire		
Energie de création d'un électron secondaire		

**Tableau (II.1) Données initiales pour l'exécution du programme**

La figure (II.9) représente l'organigramme de notre programme :



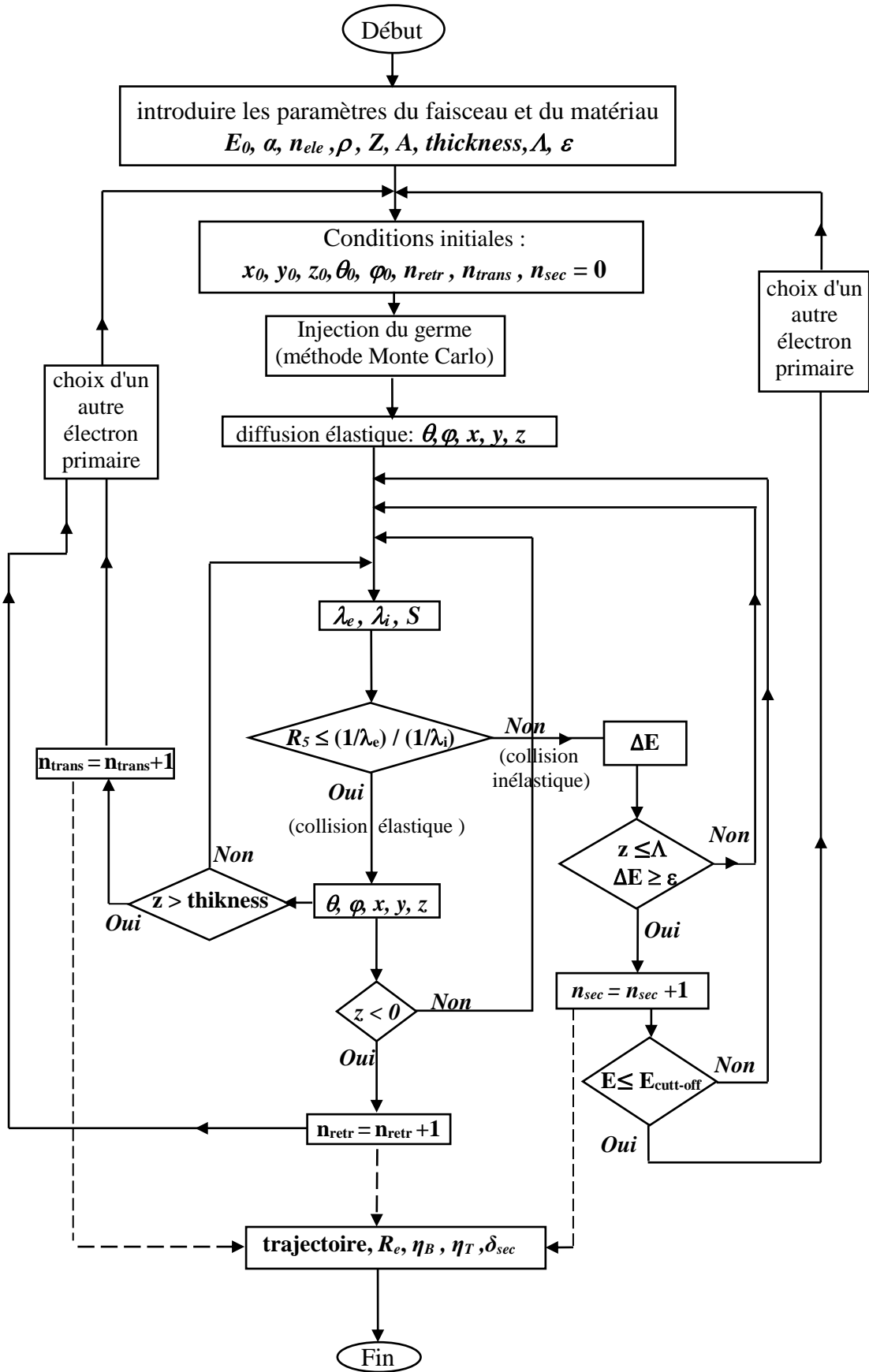
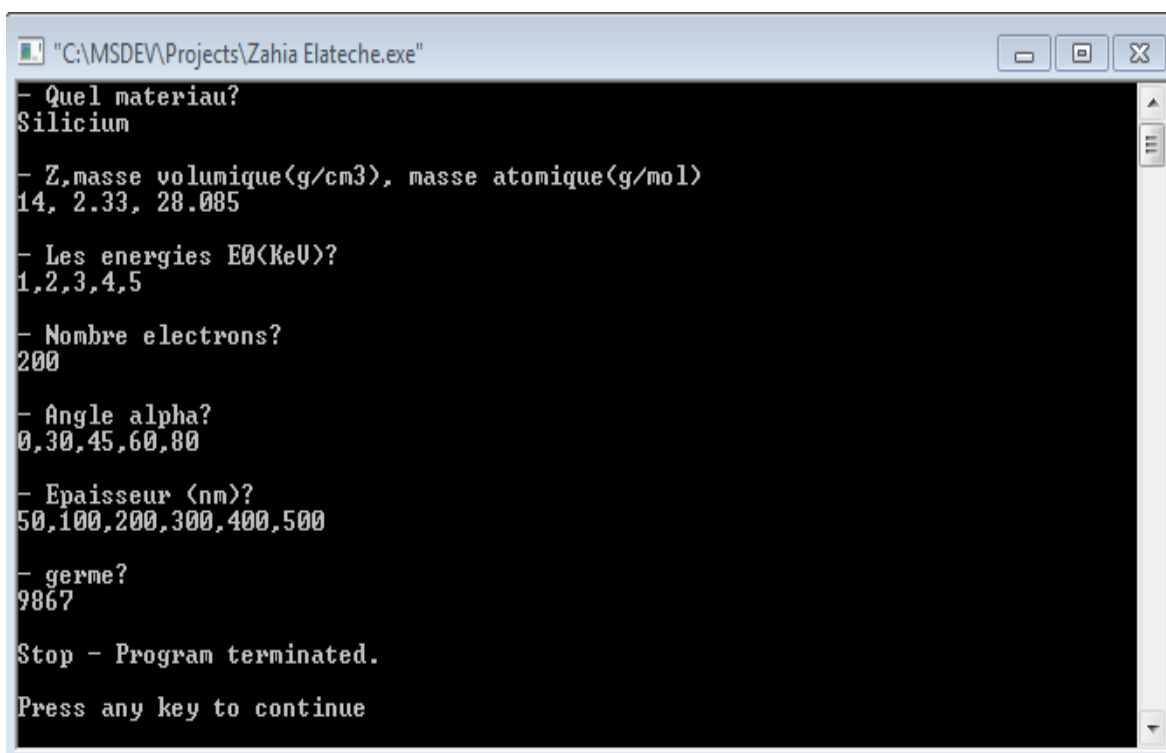


Figure (II.9): Notre organigramme de l'interaction électron - matière

La figure (II.10) représente la fenêtre d'exécution du programme.



```
"C:\MSDEV\Projects\Zahia Elateche.exe"
- Quel materiau?
Silicium
- Z,masse volumique(g/cm3), masse atomique(g/mol)
14, 2.33, 28.085
- Les energies E0(KeV)?
1,2,3,4,5
- Nombre electrons?
200
- Angle alpha?
0,30,45,60,80
- Epaisseur (nm)?
50,100,200,300,400,500
- germe?
9867
Stop - Program terminated.
Press any key to continue
```

***Figure (II.10): La fenêtre d'exécution de notre programme***

Ce programme va réaliser la simulation désirée si on lui fourni les données nécessaires. Au cas contraire, un message d'erreur s'affiche sur l'écran et le programme s'interrompt.

## 5-2-Simulation du signal EBIC:

La présence d'un gap indirect dans le cas du silicium nécessite un traitement particulier lors de sa caractérisation. En effet, la structure de bandes indirecte conduit à une faible photoluminescence (une faible efficacité optique parce que l'émission de luminescence est très difficile à observer), donc la caractérisation d'un échantillon en silicium par la cathodoluminescence est très difficile si ce n'est pas impossible. La technique EBIC s'avère être la meilleure technique pour caractériser un tel échantillon.

### 5-2-1-Profil de distribution des paires :

La création des paires électron-trou forme avec la perte d'énergie et l'émission des électrons secondaires la triade majeure de la microscopie électronique à balayage.

L'étude de la création de ces paires constitue le volet introductif du courant collecté par la technique EBIC.

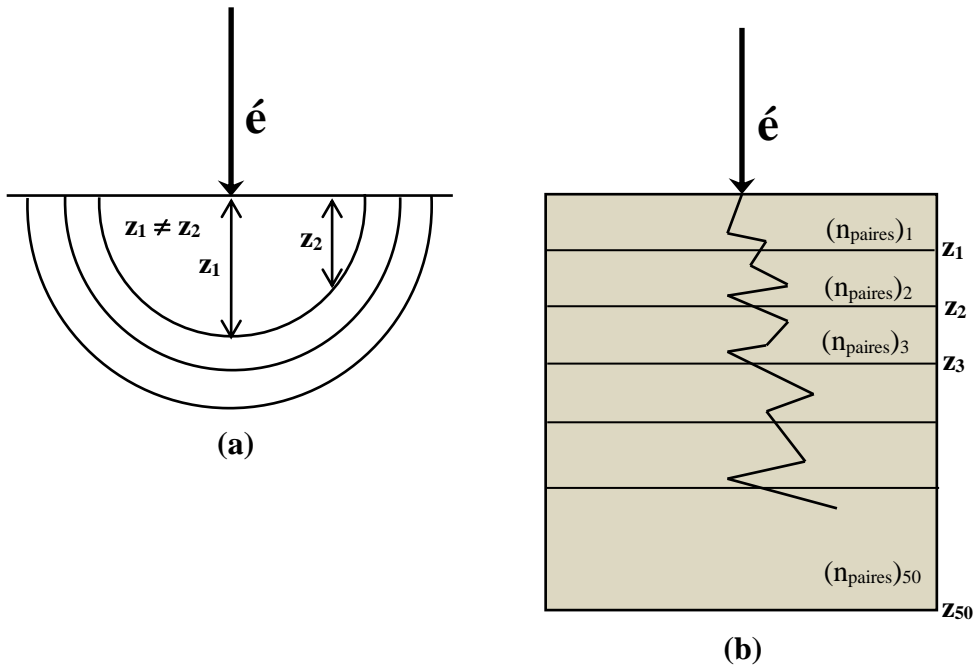
Au cours de la distance "S" se crée un nombre de paires :

$$(n_{\text{paire}}) = (\Delta E) / E_{e-h} \quad (\text{II.41})$$

Comme le volume de génération prend la forme d'une poire (dans le cas du silicium), il sera évident de répartir ce volume théoriquement en demi-cercles, et dans chaque zone  $i$  une quantité  $(n_{\text{paires}})_i$  de paires sera générée.

Mais à cause des dimensions limitées de notre échantillon (échelle nanométrique), de la gamme d'énergie utilisée et pour éviter le problème que les distances qui séparent deux paires qui appartiennent à la même zone de la surface seront inégales, on a choisi que ce volume de génération sera divisé en plusieurs zones horizontales (Figure(II.11)).

On a préféré que cette répartition contiendra  $n_{\text{zones}} = 50$  zones horizontales, nombre qu'on trouve moyen et logique pour l'appliquer à l'épaisseur voulue.



**Figure (II.11) : La répartition théorique de l'échantillon**  
**(a) : répartition en demi-cercles (b) : répartition en zones horizontales**

Pour trouver le profil de distribution des paires, on a poursuivi les étapes suivantes pour chaque valeur d'énergie primaire  $E_0$  :

- 1- Calculer le nombre des paires  $(n_{\text{paires}})_i$  générées dans chaque zone.
- 2- D'autres études [26,65] ont trouvé le profil de génération des paires par unité de profondeur (à une seule variable), qui est pratique seulement dans le cas d'un faisceau normal à la surface. Par contre, dans notre étude on a préféré trouver ce profil par unité de surface pour surmonter ce problème.

Donc, la deuxième étape sera le calcul de la surface rectangulaire "Surf" de chaque zone :

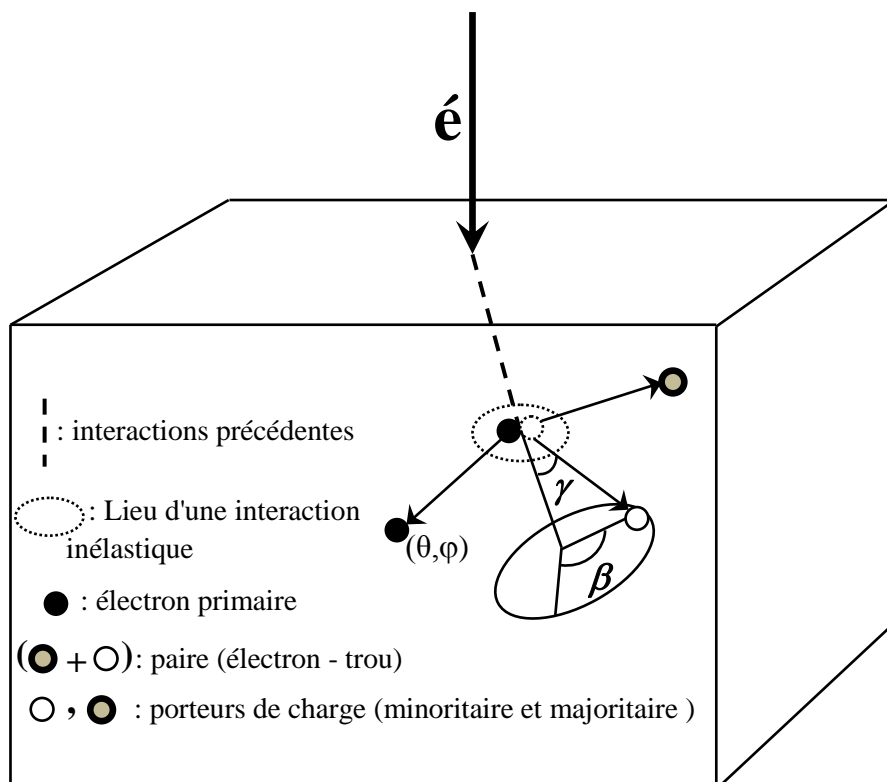
$$\text{Surf} = (R_e / 50) \cdot (2 X_{\text{max}}) \quad \text{(II.42)}$$

- 3- Calculer la concentration des paires dans la zone voulue :

$$C_i = (n_{\text{paires}})_i / \text{Surf} \quad \text{(II.43)}$$

### 5-2-2- Trajectoires des charges minoritaires :

L'équation de continuité gouverne la diffusion des porteurs de charge (issus de la création des paires) dans l'échantillon. La résolution de cette équation est souvent impossible à cause des difficultés mathématiques [65]. Pour cette raison on a voulu traiter ces trajectoires d'une façon purement numérique.



**Figure (II.12): Illustration de la création et la diffusion des porteurs de charge**

Dans d'autres études [65,66], ils considèrent par raison de simplification que la charge minoritaire est située au milieu du parcours entre deux collisions successives. Par contre, dans notre modèle on considère que la charge se trouve au même endroit que celui de la collision qui a été la cause de sa création (Figure (II.12)).

On va considérer que chaque charge minoritaire peut diffuser selon les coordonnées sphériques  $\gamma$  et  $\beta$  suivant les relations suivantes [65,66]:

$$\boxed{\cos \gamma = 1 - 2R_5} \quad (\text{II.44})$$

$$\boxed{R_6 = \frac{\int_0^\beta \sin(\beta) d\beta}{\int_0^\pi \sin(\beta) d\beta}} \quad (\text{II.45})$$

Par simple calcul, on trouve :  $\boxed{\beta = 2 \pi R_6} \quad (\text{II.46})$

$R_5$  et  $R_6$  sont des nombres aléatoires dans l'intervalle [0,1].

Ces deux angles vont déterminer la destination que va prendre la charge minoritaire.

En effet l'angle  $\gamma$  définit la direction de la diffusion par rapport à celle qui précède (celle de l'électron primaire). D'un autre côté, pour un angle  $\gamma$  donné,  $\beta$  varie entre 0 et  $2\pi$  pour décrire toutes les directions possibles.

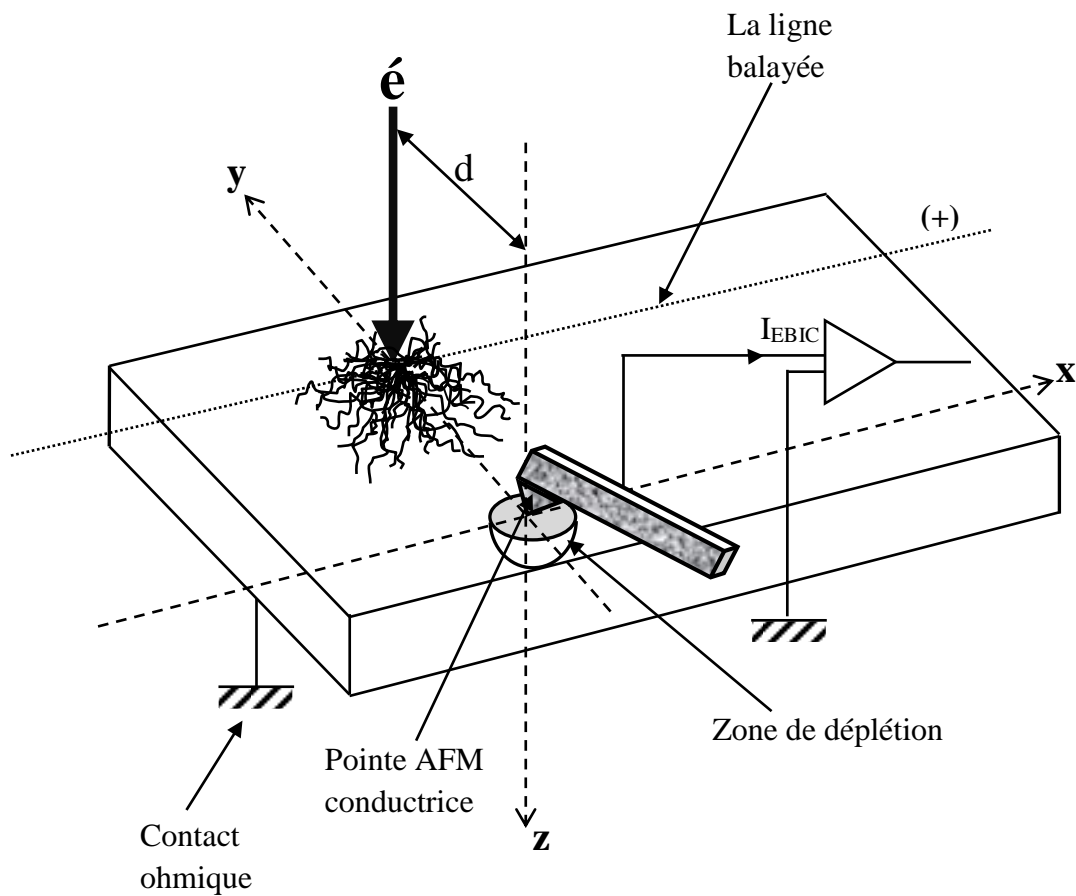
### 5-2-3- Description du protocole de mesure :

Comme on l'a déjà vu, la différence majeure entre la technique nano-EBIC et l'EBIC classique est bien le mode de collecte du courant induit qui est une pointe conductrice d'un AFM pour la technique nano-EBIC au lieu d'une électrode métallique macroscopique dans le cas de la technique standard.

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. Dans notre étude, on considère le cas d'un nano-contact de type Schottky.

On va adopter le mode balayage en ligne (l'échantillon et la pointe sont fixés et c'est le faisceau électronique qui est en mouvement perpendiculaire par rapport à l'axe du microlevier pour balayer l'échantillon).

La figure (II.13) représente cette description :



**Figure (II.13) : Illustration du protocole de mesure**

On va considérer que le point (0,0,0) correspond au point de contact de la pointe conductrice avec la surface de l'échantillon. Le sens positif de l'axe (OX) se dirige vers le sens positif du mouvement du faisceau électronique.

**5-2-4- Collecte des charges minoritaires :**

Les charges minoritaires qui sont créées dans la zone de déplétion seront automatiquement collectées. Pour les autres, leur collecte (ou leur recombinaison) dépendra de la vitesse de recombinaison en surface.

Les deux cas extrêmes de cette dernière sont :

**a-  $V_s \rightarrow \infty$**  : signifie que toute charge minoritaire qui émerge à la surface libre de l'échantillon (hors de la zone du nano-contact) est instantanément recombinaisonnée. Elle ne peut donc être collectée[67].

Par conséquent, la condition qui caractérise ce cas est :

$$\Delta p (\Delta n) [z=0] = 0 \quad (\text{II.47})$$

**b-  $V_s = 0$**  : ce qui signifie que toute charge qui émerge en surface a une certaine probabilité d'être collectée[67].

La condition ici se traduit par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta p (\Delta n)[z = 0] = 0 & \text{au nano-contact} \\ \frac{\partial \Delta P(\partial \Delta n)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0 & \text{hors nano-contact} \end{array} \right. \quad (\text{II.48})$$

Dans notre programme et par simplification, on a exprimé ces probabilités de collecte en faisant entrer les conditions suivantes :



**a-  $V_s \rightarrow \infty$ :**

Les charges minoritaires en excès qui diffusent en dehors du nano-contact ont une probabilité nulle d'être collectées (automatiquement recombinaées). Donc, c'est seulement celles qui sont créées dans la zone de déplétion qui seront collectées.

Si la charge minoritaire en excès est créée dans la zone de déplétion, le nombre des charges collectées va augmenter :

$$\boxed{\sqrt{x_c^2 + y_c^2 + z_c^2} \leq r \Rightarrow n_{\text{collectée}} = n_{\text{collectée}} + 1} \quad (\text{II.49})$$

$r$  : le rayon du nano-contact.

$x_c$ ,  $y_c$  et  $z_c$  : les coordonnées de la charge minoritaire en excès.

Dans le cas contraire, on considère qu'elle a été recombinaée et donc la charge collectée reste inchangeable.

$x_c$ ,  $y_c$  et  $z_c$  sont les coordonnées de la charge minoritaire par rapport au repère du nano-contact. Cette même charge occupe le lieu d'une interaction inélastique (Equations(II.27), (II.28), (II.29)) par rapport au repère du point d'impact du faisceau primaire.

Donc, un changement de repère se justifie énergétiquement, voir détails à l'**Annexe III**.

**b-  $V_s = 0$ :**

En plus des charges minoritaires qui sont créées dans la zone de déplétion, celles qui atteindront cette zone par diffusion seront collectées aussi, si non elles seront recombinaées.

**1-** Si la charge minoritaire est générée dans la zone de déplétion elle sera automatiquement collectée (formule (II.49)).

**2-** Les charges minoritaires en excès qui atteignent par diffusion cette zone seront aussi collectées :

**a- La destination :**

La destination de la charge minoritaire en excès est déterminée en utilisant les formules (II.44) et (II.46)):

$$\cos \gamma = 1 - 2R_5 \quad \text{et} \quad \beta = 2 \pi R_6$$

Dans notre programme on a fait entrer la condition suivante pour qu'on puisse admettre que la charge s'est dirigée vers la zone de déplétion (détailles de calcul sont présentés dans **AnnexeIII**) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Arctan} \left( \frac{z_c - r}{y_c} \right) \leq \gamma \leq \text{Arctan} \left( \frac{z_c}{y_c - r} \right) \\ \text{Arctan} \left( \frac{\sqrt{y_c^2 + z_c^2}}{r} \right) \leq \beta \leq \pi - \text{Arctan} \left( \frac{\sqrt{y_c^2 + z_c^2}}{r} \right) \end{array} \right. \quad \text{(II.50)}$$

**b- La distance parcourue :**

La destination prise par la charge minoritaire n'est pas le seul point qui conditionne la probabilité de sa collecte. Il faut aussi vérifier la condition de la distance parcourue par elle aussi.

En effet, il faut que la charge atteindra la zone de déplétion en ayant parcouru une distance inférieure ou égale à la longueur de diffusion des charges minoritaires "L" :

$$\sqrt{x_c^2 + y_c^2 + z_c^2} \leq (L + r) \quad \text{(II.51)}$$

Si les conditions (II.50) et (II.51) se réalisent au même temps alors le nombre des charges minoritaires collectées va augmenter :

$$\mathbf{n}_{\text{collectée}} = \mathbf{n}_{\text{collectée}} + \mathbf{1} \quad \text{(II.52)}$$

Dans le cas contraire, on considère que la charge a été recombiniée et dans ce cas le nombre des charges collectées reste inchangeable.

À la fin, l'efficacité de collecte sera calculée comme étant le rapport entre toutes les charges collectées et les charges générées [66]:

$$\eta = \frac{\Sigma \text{charges collectées}}{\Sigma \text{charges générées}} \quad (\text{II.53})$$

La figure (II.14) représente l'organigramme de calcul de l'efficacité de collecte :

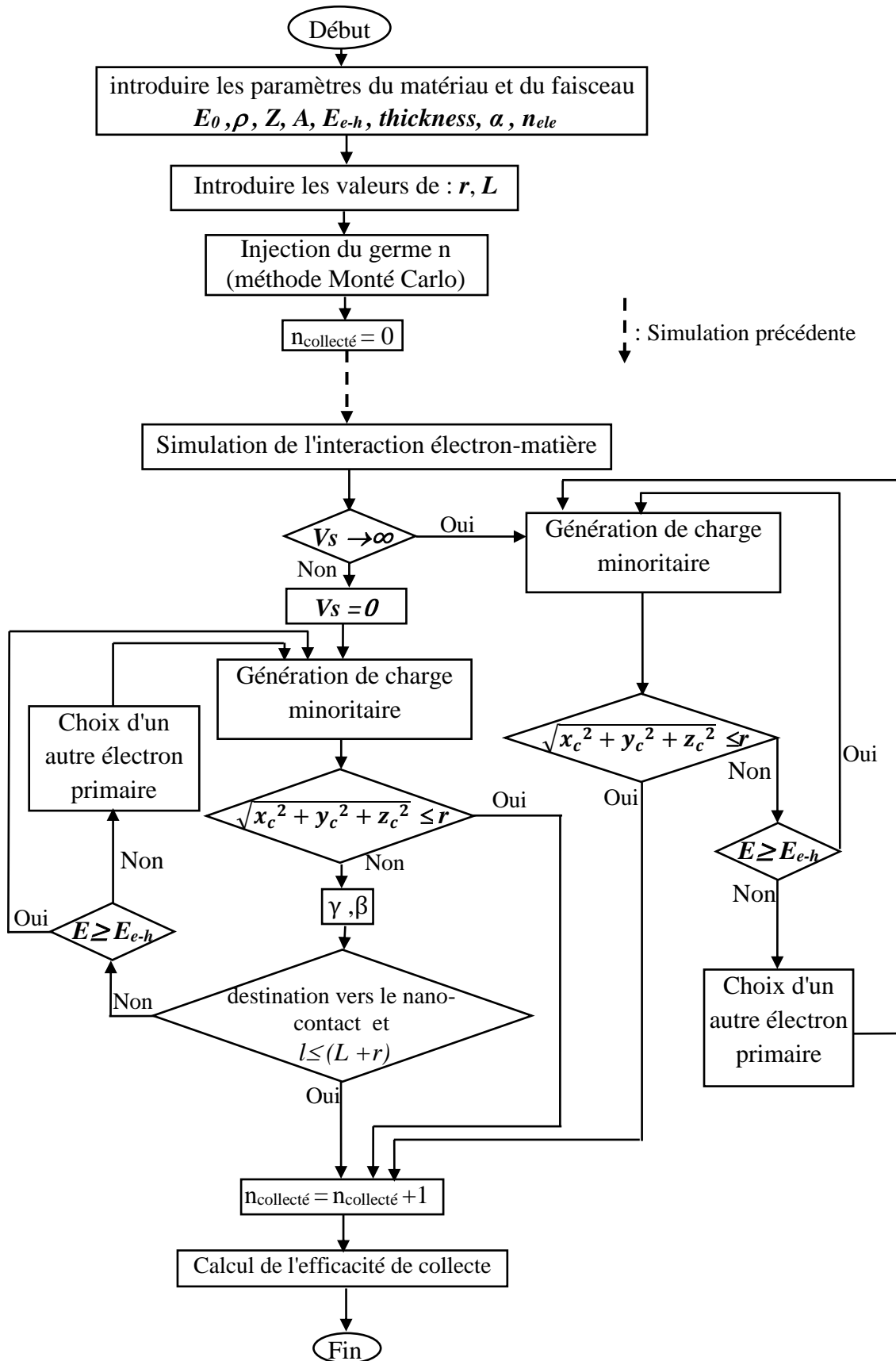


Figure (II.14): L'organigramme de calcul de l'efficacité de collecte

Ceci ne concerne que les porteurs de charge minoritaires, alors que les porteurs de charge majoritaires seront repoussés et évacués par le contact ohmique [65].

**5-2-5- Le courant EBIC :**

Il y a une forte relation entre l'efficacité de collecte et le courant EBIC. La formule la plus connue qui représente cette relation est celle de Yakimov [68] :

$$\boxed{\eta = \frac{I_{EBIC} E_{e-h}}{E_0 \cdot E_A \cdot I_0}} \quad (\text{II.54})$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{I_{EBIC}}{I_0} = \frac{\eta E_0 E_A}{E_{e-h}}} \quad (\text{II.55})$$

$E_{e-h}$  : l'énergie de formation d'une paire électron-trou .

$E_0$  : l'énergie primaire ,  $I_0$  : le courant primaire.

$E_A$  : l'énergie absorbée par l'échantillon.

Concernant la détermination de  $E_A$ , on trouve dans quelques études qu'ils ont adopté des valeurs approximatives ( $E_A = 0,9$  [10,66],  $E_A = 0,92$  [69]..... ).

Par contre et dans notre étude, on ne prend pas de valeurs approximatives mais on calcule cette fraction d'énergie par notre modèle en se basant sur nos calculs des énergies  $E_B$  (l'énergie perdue par rétrodiffusion) et  $E_T$  (l'énergie perdue par transmission).

Donc on aura:

$$\boxed{E_A = E_0 - (E_B + E_T)} \quad (\text{II.56})$$

## **6- L'échantillon étudié :**

Les nanostructures sont les matériaux dont au moins une dimension est nanométrique de l'ordre de  $10^{-9}$  m. On distingue les nanostructures suivantes:

- a-* "0D" : objet de dimension zéro [cristaux]
- b-* "1D" : objet unidimensionnel [nano-tube, nano-fil]
- c-* "2D" : objet bidimensionnel [nano-film]

En général, les matériaux prennent des formes nanostructurées qui sont compatibles avec leurs caractéristiques (nanotubes de carbone, nanocristaux de germanium....etc.).

Le silicium nanostructuré dans ses types les plus courants prend la forme d'un nano-fil ou d'un nano-film. Notre étude est valable pour les deux formes sans aucun problème, mais pour rendre cette étude plus générale et plus utile on va l'appliquer aux nano-films de silicium. Sachant qu'on peut passer facilement à la structure nano-fil en négligeant l'axe 'OY' dans notre étude.

## **7-Conclusion:**

Pour l'élaboration de notre modèle, on a utilisé la méthode Monté Carlo en se basant sur la génération des nombres aléatoires qui se traduit au langage Fortran par la fonction "Ran". Cette dernière a montré son efficacité dans notre étude.

À chaque collision que l'électron primaire peut subir on a trouvé une probabilité de présence (détermination des coordonnées) et une estimation de la valeur énergétique qui lui correspond.

Quand le trajet de l'électron est terminé, le même processus est répété pour un autre électron primaire. C'est cette répétition un très grand nombre de fois qui va réaliser notre étude de l'interaction électron- silicium nanostructuré.

On s'est basé sur cette interaction pour étudier l'application de la technique nano-EBIC à notre échantillon. Cette étude comporte plusieurs points (la création des paires, leur profil de distribution, la profondeur de pénétration, le trajet des porteurs de charge minoritaires en excès, l'efficacité de collecte et le courant nano-EBIC).

Le bon jugement de cette étude est bien l'évaluation des résultats obtenus, ce qui va faire le sujet du prochain chapitre.

## *Chapitre N°3*



## *Chapitre III: Résultats et discussions*

### *1-Introduction :*

Pour poursuivre le trajet des électrons primaires au sein d'un échantillon en silicium nanostructuré, la collecte des porteurs minoritaires en excès par un nano-contact, l'étude du courant induit par la technique nano-EBIC et l'influence de plusieurs paramètres sur ces points, nous avons élaboré un modèle numérique qui décrit d'une manière aussi précise que possible ces phénomènes.

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

Donc, dans ce chapitre on présentera les résultats de calcul concernant: les trajectoires des électrons primaires, la profondeur de pénétration, les rendements d'émission rétrodiffusée et secondaire, la concentration des paires créées (profil de distribution), l'efficacité de collecte et le courant nano-EBIC...etc. En plus de cela, on va étudier l'influence de plusieurs paramètres comme: l'énergie primaire, l'angle d'incidence, la longueur de diffusion, la forme de la zone de déplétion et la taille du nano-contact sur ces résultats.

Ces résultats seront validés par la confrontation avec ceux analytiques et expérimentaux trouvés par d'autres chercheurs.

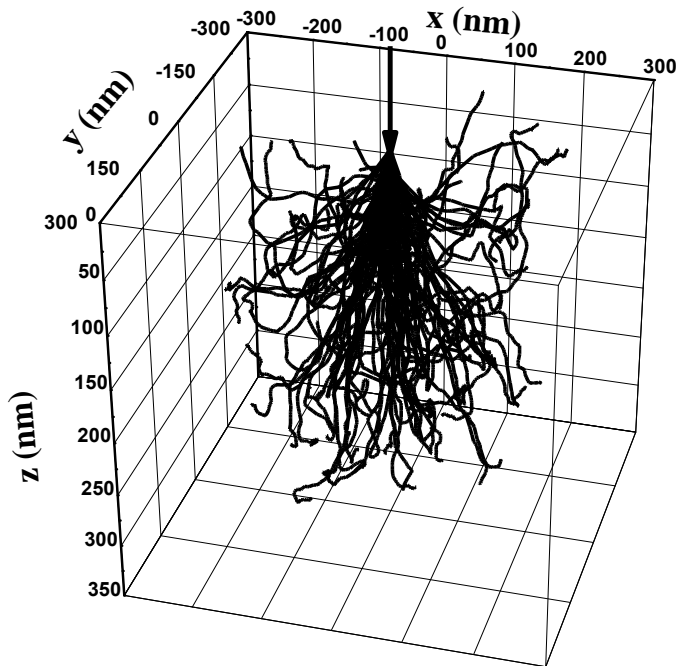
Sachant que certains résultats sont introduits et détaillés pour conforter la fiabilité de notre modèle pour plusieurs phénomènes et sous plusieurs paramètres.

## 2- Simulation de l'interaction électron-matière:

### 2-1- Trajectoires des électrons :

Un exemple de nos résultats pour l'allure des trajectoires des électrons primaires dans le cas d'un échantillon irradié par un faisceau électronique composé de 100 électrons et d'énergie primaire  $E_0 = 5\text{KeV}$  et pour une incidence  $\alpha=0^\circ$  (incidence normale) est représenté à la Figure (III.1).

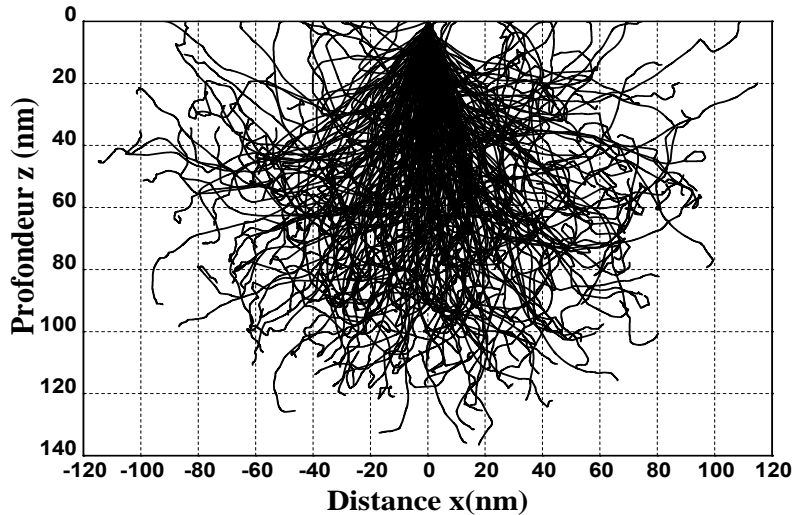
On a représenté cet exemple en forme 3D.



**Figure (III.1):** Trajectoires de 100 électrons primaires en forme 3D avec une énergie  $E_0 = 5\text{ KeV}$

Un autre exemple de nos résultats pour les trajectoires des électrons primaires dans le cas d'un échantillon irradié par un faisceau électronique de 250 électrons et d'énergie primaire de 2.5 KeV et pour une incidence  $\alpha=0^\circ$  est représenté à la Figure (III.2).

On a représenté cet exemple en forme 2D (projection plane).



**Figure (III.2): Trajectoires de 250 électrons primaires en forme 2D avec une énergie  $E_0 = 2.5 \text{ KeV}$**

Les figures (III.1) et (III.2) montrent bien que nos résultats ne diffèrent pas de ceux trouvés dans la littérature [70]. En effet, on remarque que les trajectoires sont des lignes brisées et de longueurs bien déterminées et ils sont vraiment aléatoires en ne suivant aucune loi prédictive.

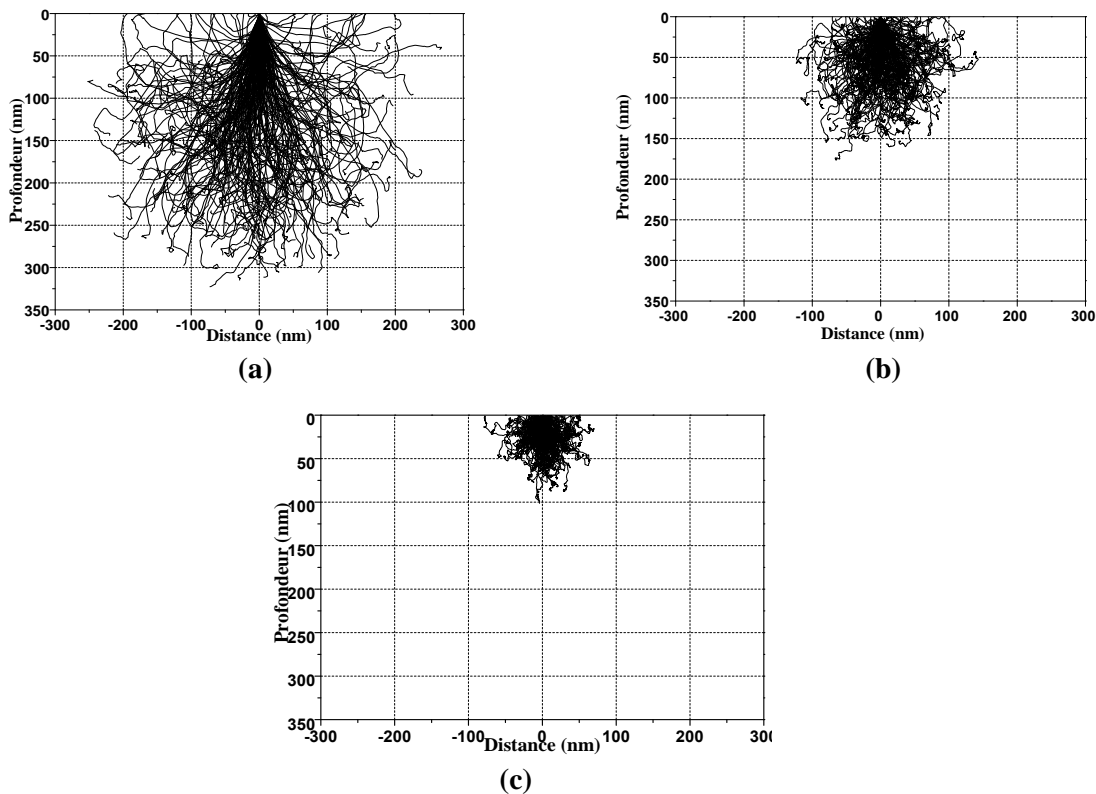
Pour les énergies primaires choisies dans ces deux exemples, on remarque que: Pour  $E_0=5\text{KeV}$ , la profondeur de pénétration ne dépasse pas les 350 nm, et pour  $E_0=2.5\text{KeV}$  elle ne dépasse pas les 140 nm. Donc, cette gamme d'énergie (de 0 jusqu'à quelques KeV) est très acceptable pour être appliquée à notre échantillon (épaisseur pouvant aller jusqu'à quelques centaines de nm).

### 2-1-1- Influence du numéro atomique :

La composition de l'échantillon influence énergétiquement la section efficace élastique totale (Equation (II.4)). En effet, plus l'échantillon est composé d'un élément lourd ( $Z$  élevé), plus la probabilité des diffusions élastiques est élevée de son tour. Par conséquence, de nombreuses déviations vont être réalisées.

En plus, la perte d'énergie dépend fortement de  $Z$  (Equation (II.9)), elle est plus élevée quand  $Z$  est élevé. On aura donc une faible profondeur de pénétration des électrons primaires.

La Figure (III.3) représente l'évolution de la forme du volume de génération dans le cas des échantillons respectivement en Si (léger), Ge (moyen) et Ag (lourd) pour une énergie primaire de 5 KeV.



**Figure (III.3):** Trajectoires de 200 électrons dans plusieurs échantillons  
 (a): Silicium ( $Z=14$ ), (b): Germanium ( $Z=32$ ), (c): Argent ( $Z=47$ ) ( $E_0 = 5 \text{ KeV}$ )

Pour les petits  $Z$ , le volume de génération s'élargi faiblement dans la zone proche de la surface de l'échantillon, et la profondeur de pénétration s'agrandi. Par contre, ce volume s'élargi beaucoup dans les zones lointaines de la surface. Donc, il prend la forme d'une poire.

Pour les grands  $Z$ , ce volume est d'une forme hémisphérique avec une profondeur de pénétration moins grande.

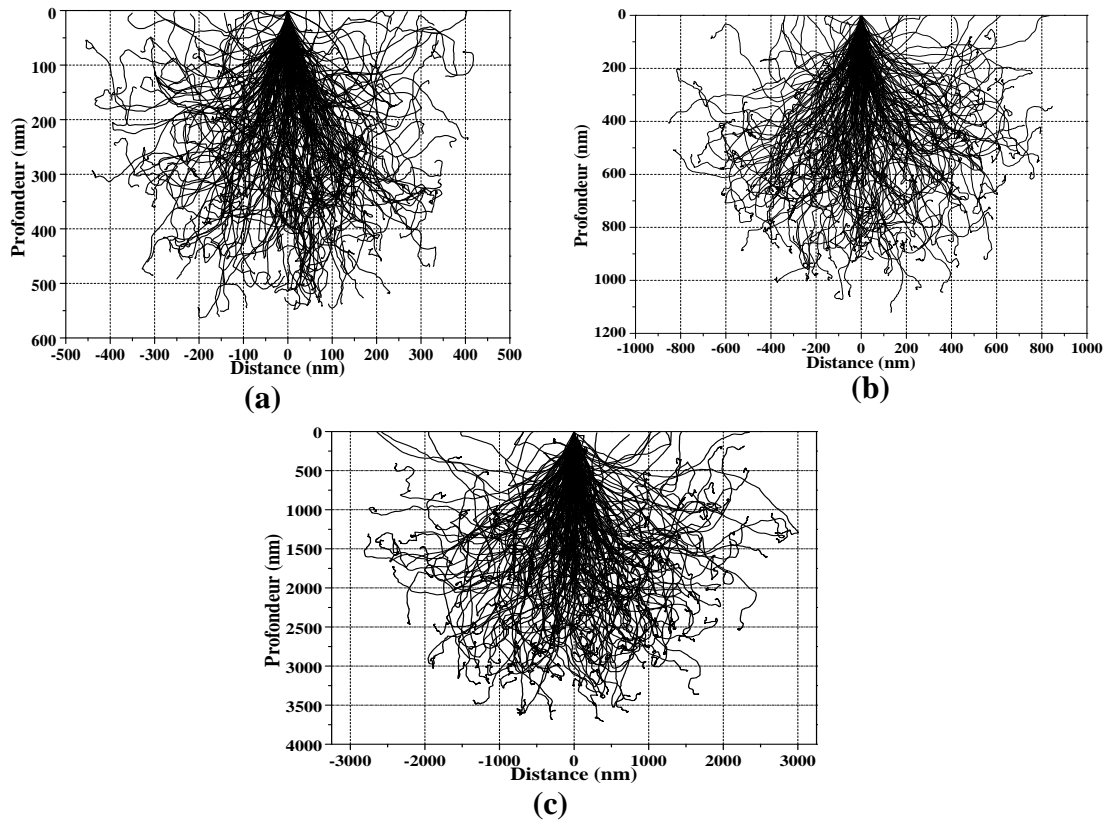
Ces résultats sont similaires aux ceux de Kanaya-Okayama [13].

### **2-1-2-Influence de l'énergie primaire :**

La section efficace totale de la diffusion élastique dépend fortement de l'inverse de l'énergie des électrons primaires ( $1/E^2$ ) (Equation (II.4)). Donc, pendant que l'énergie primaire s'augmente, cette section se diminue (diminution de la probabilité des déviations). Au même temps, la perte d'énergie se diminue car elle dépend fortement de cet inverse ( $1/E$ ) (Equation (II.9)). Donc, il y aura une augmentation de la profondeur de pénétration.

La Figure (III.4) représente nos résultats des volumes de génération pour un échantillon en silicium pour différentes énergies primaires, à savoir 7, 10 et 20 KeV.

On remarque que la forme générale des volumes est semblable, par contre leurs dimensions sont différentes.



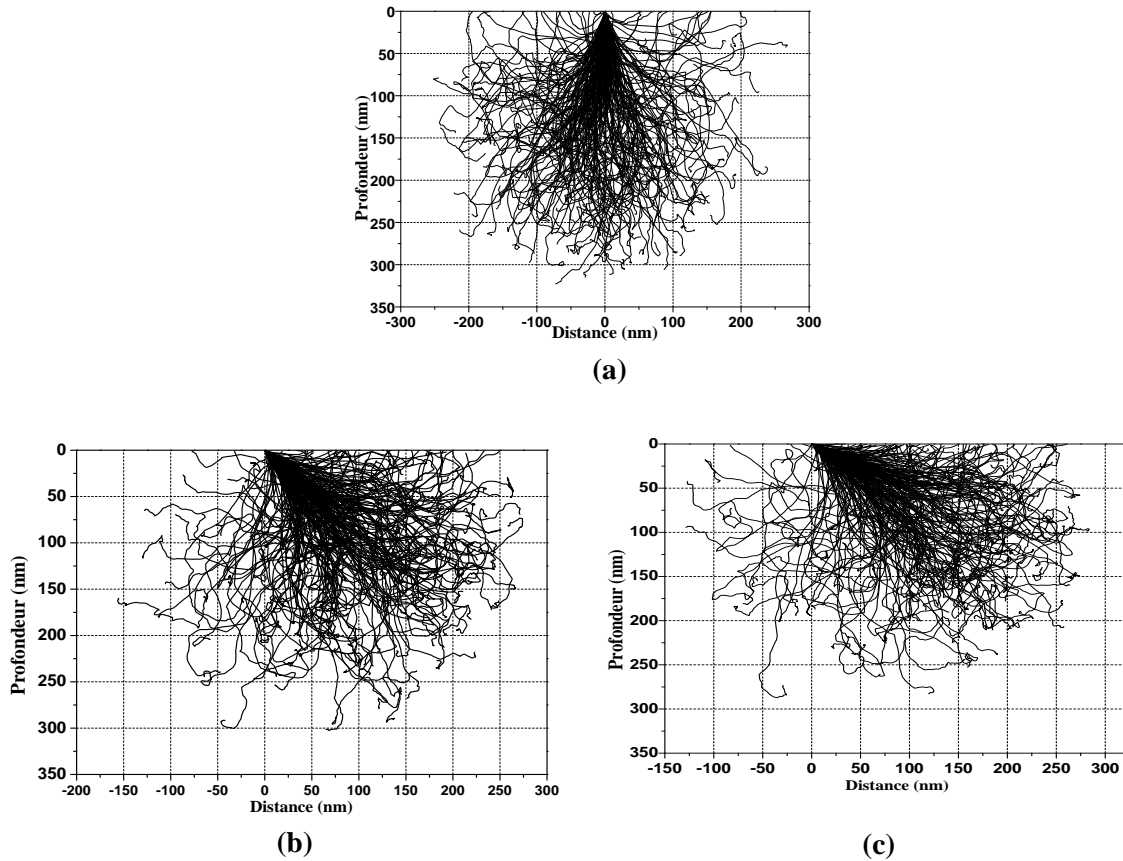
**Figure (III.4): Trajectoires de 200 électrons pour différentes valeurs d'énergie primaire (a) : 7 KeV, (b) : 10 KeV, (c) : 20 KeV**

### 2-1-3-Influence de l'angle d'incidence :

L'angle d'incidence du faisceau d'électrons  $\alpha$ , appelé aussi "tilt", est défini comme étant l'angle entre le faisceau électronique et la normale à la surface de l'échantillon.

Le volume de génération est modifié si la direction d'incidence est différente de la normale: Le volume devient asymétrique et plus réduit (Figure (III.5)).

Ce phénomène s'explique par le fait que plus cet angle est important, plus le faisceau électronique est rasant. En conséquence, l'axe de la symétrie du volume de génération s'incline et une partie des électrons primaires vont intercepter la surface.



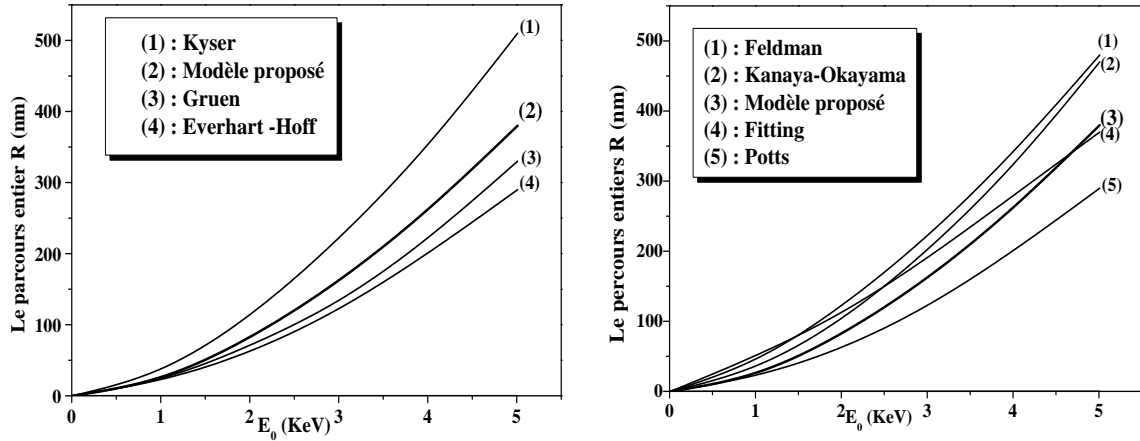
**Figure (III.5):** Trajectoires de 200 électrons pour différentes valeurs d'angle d'incidence (a) :  $0^\circ$ , (b) :  $45^\circ$ , (c) :  $60^\circ$  et pour  $E_0 = 5 \text{ KeV}$

## 2-2- Le maximum de la profondeur de pénétration :

### 2-2-1-En profondeur:

Après le calcul du parcours entier en profondeur des électrons primaires (le maximum de la profondeur de pénétration  $R_e$ ) par notre modèle, on a fait une comparaison de notre résultat avec ceux d'autres chercheurs :

À cause du chevauchement entre ces nombreux résultats, et pour une meilleure clarté des figures, on les a fait répartir en deux parties (a) et (b) de la Figure (III.6):



**Figure (III.6) : Variation du parcours entier  $R_e$  en fonction de l'énergie primaire pour plusieurs modèles y compris le notre**

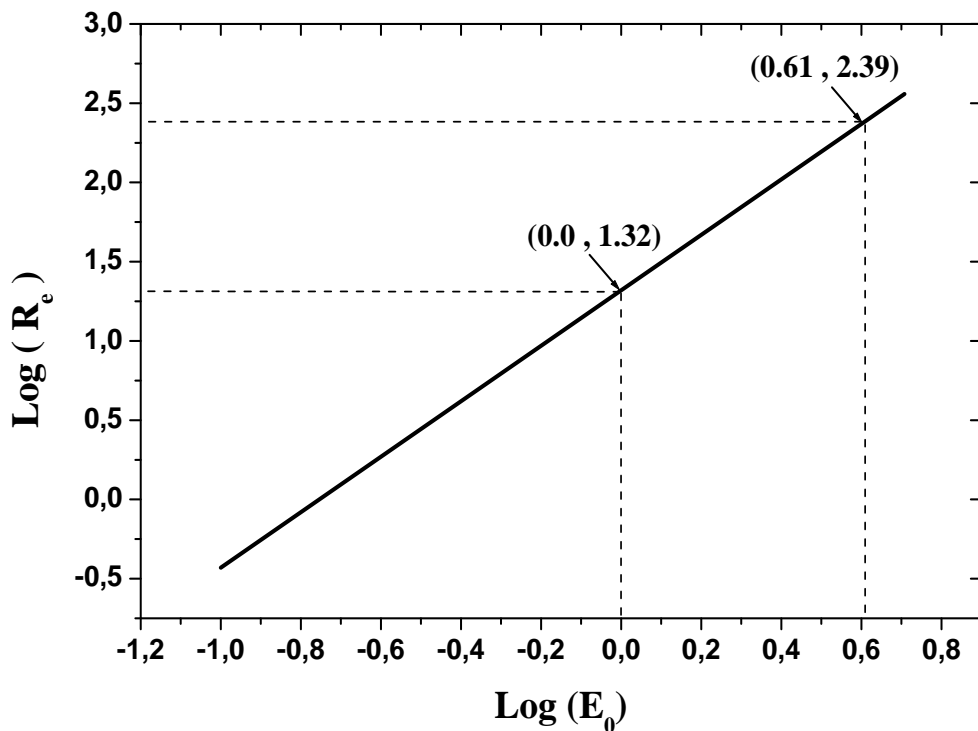
Comme on peut remarquer facilement, il y a une bonne concordance entre notre résultat du maximum de la profondeur de pénétration et la majorité des résultats (Kyser [18], Gruen [12], Everhart-Hoff [16], Feldman [23], Kanaya-Okayama [13], Potts [71] et Fitting [72]). De plus, notre résultat se trouve à l'intérieur de la dispersion résultante de ces calculs antérieurs. Ceci est de bonne augure pour la suite des procédés de simulation.

La formule générale (I.18) donne le parcours électronique entier en profondeur en fonction de l'énergie primaire. En se basant sur cette formule, on constate qu'il suffit de calculer les valeurs de  $k'$  et  $a$  pour trouver notre propre formule qui correspond à notre échantillon :

$$R_e = (K') (E_0)^a \Rightarrow \boxed{\text{Log}(R_e) = \text{Log } K' + a \text{ Log } E_0} \quad \text{(III.1)}$$

À partir de la figure (III.6), on peut retracer la courbe  $\text{Log } R_e$  ( $\text{Log } E_0$ ) facilement :





**Figure (III.7): Représentation de la fonction  $\text{Log } R_e (\text{Log } E_0)$**

A partir de cette figure on peut conclure que :

(1).....  $\text{Log}(K') = 1.32$

Sachant que  $K' = k/\rho \Rightarrow k = 48.6 \text{ [ g/cm}^3\text{]}^{-1}$  (dans le cas du silicium)

(2).....  $a = (2.39-1.32)/(0.61-0.0) \Rightarrow a = 1.75$

Donc, on aura à la fin, notre propre formule du parcours électronique qui correspond à notre échantillon qui est :

$$R_e = \frac{48.6}{\rho} (E_0)^{1.75} \quad \text{(III.2)}$$

On peut remarquer que la procédure poursuivie pour déterminer notre propre formule était très simple et comprend peu d'étapes. Dans la littérature, on trouve d'autres études aussi, qui ont trouvé leur propre formule en utilisant d'autres méthodes (Par exemple le travail de Beggah-Tabet[12] là où ils avaient besoin d'utiliser la méthode des moindres carrées pour un échantillon en germanium).

2-2-2-En largeur :

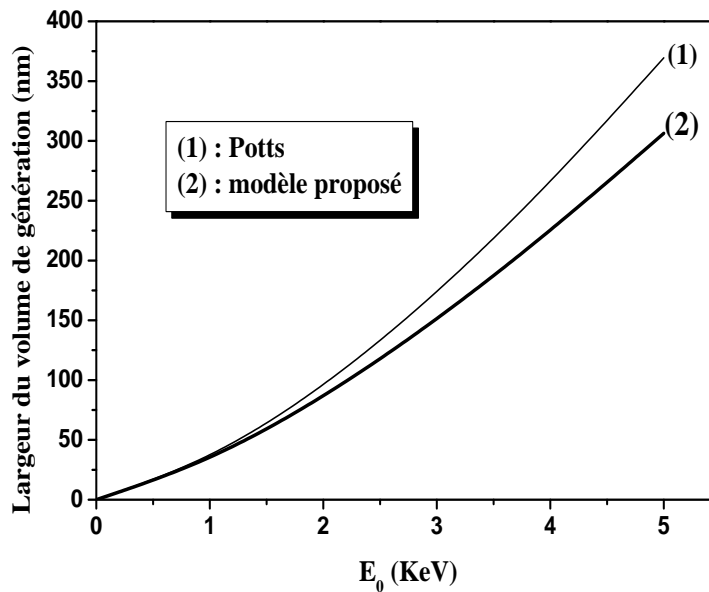
Notre résultat de l'évolution de la largeur du volume de génération (la diffusion suivant l'axe (OX)) en fonction de l'énergie primaire  $E_0$  est représenté à la figure (III.8).

On a fait une comparaison avec le résultat trouvé par Potts [71] et qui est traduit par la formule suivante:

$$\mathbf{X(nm) = (77. E_0^{1.5}) / \rho} \quad \mathbf{(III.3)}$$

On remarque que  $X(E_0)$  augmente avec l'augmentation de  $E_0$  à cause de l'accroissement du pouvoir de pénétration.

(Notre résultat coïncide bien avec celui de Potts surtout pour les basses énergies).



**Figure (III.8):** La largeur du volume de génération en fonction de l'énergie primaire  $E_0$

On remarque que la largeur du volume de génération est du même ordre de grandeur que celui du maximum de la profondeur de pénétration.

### 2-3- Les électrons transmis:

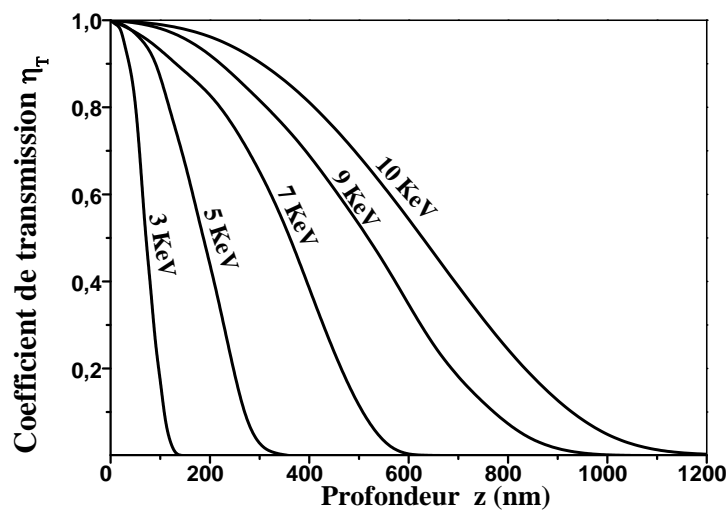
Des études précédentes, ont déclarés qu'elles ne peuvent pas trouver le coefficient de transmission électronique pour une grande gamme d'énergie et pour plusieurs éléments. Effectivement, le travail de Chang et al.[73] trouve des résultats en accord avec ceux de l'expérience pour des échantillons caractérisés par  $Z < 50$  et  $E_0 < 100$  KeV. D'autres travaux aussi [74-76] n'ont pas réussi à trouver une solution à ce problème.

Dans notre modèle purement numérique, c'est plus le cas. En effet, son application pour les électrons transmis est étendue sur une très grande gamme d'énergies (de zéro jusqu'aux très grandes énergies - plusieurs MeV-).

Notre étude a confirmé que plusieurs paramètres influencent le taux de ces électrons comme on va le montrer :

#### 2-3-1- Influence de l'épaisseur de l'échantillon :

À la figure (III.9) on a montré l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'épaisseur de l'échantillon pour plusieurs valeurs d'énergie primaire.



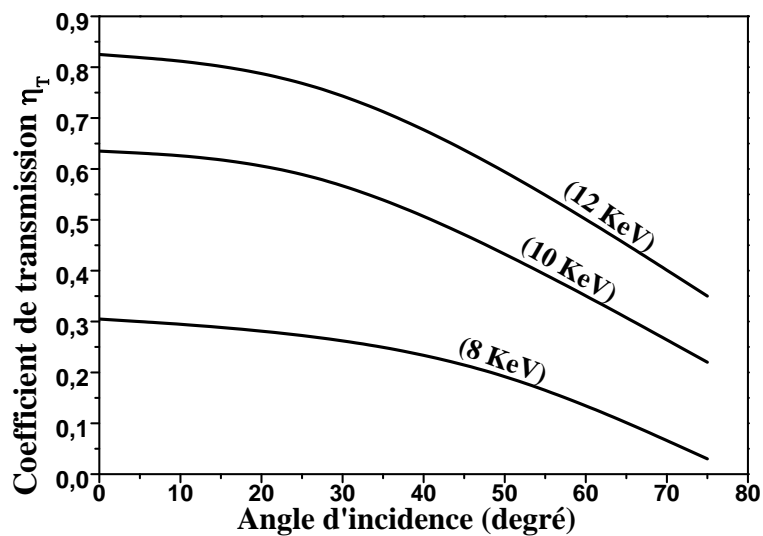
**Figure (III.9): Le coefficient de transmission pour différentes valeurs d'épaisseur et d'énergie primaire**

Pour une énergie primaire  $E_0$  fixe, il est clair que le taux des électrons transmis diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de l'échantillon. Effectivement, quand l'épaisseur de l'échantillon sera plus grande, la surface arrière de l'échantillon se trouve éloignée de la profondeur de pénétration, et par conséquent, il y aura moins d'électrons qui sortent de cette surface induisant une diminution, voire la disparition du phénomène de transmission.

Par contre, pour une épaisseur donnée où le phénomène de transmission est présent, quand l'énergie primaire augmente il y aura une augmentation de ce coefficient suite à l'augmentation de la profondeur de pénétration.

### 2-3-2- Influence de l'angle d'incidence :

La figure (III.10) représente l'évolution du coefficient de transmission en fonction de l'angle d'incidence pour plusieurs valeurs d'énergie primaire:



**Figure (III.10):** Le coefficient de transmission en fonction de l'angle d'incidence pour plusieurs valeurs d'énergie primaire (thickness = 500nm).

Pour une épaisseur bien déterminée et pour une énergie primaire fixe, on remarque que le coefficient de transmission diminue quand l'angle d'incidence augmente.

L'explication de cette remarque est que, l'augmentation de l'angle  $\alpha$  entame la déviation des électrons primaires vers la même direction de l'arrivée du faisceau électronique, ce qui va conduire à la diminution de la profondeur de pénétration (diminution du nombre des électrons transmis qui sortent de la surface arrière de l'échantillon).

### **2-4- Les électrons rétrodiffusés:**

Dapor [63] a confirmé qu'il n'y a pas assez de résultats expérimentaux concernant les électrons rétrodiffusés dans le domaine des énergies très basses (moins de 1000 eV). Braga [2] a mentionné que même les études analytiques sont très rares en dessous de 2KeV.

À partir de nos résultats on a montré que notre modèle a dépassé cet obstacle. En effet, nos résultats donnant les électrons rétrodiffusés s'étalent sur un intervalle allant de zéro jusqu'à n'importe quelle énergie théorique (mais qui doit être acceptée expérimentalement bien sûr).

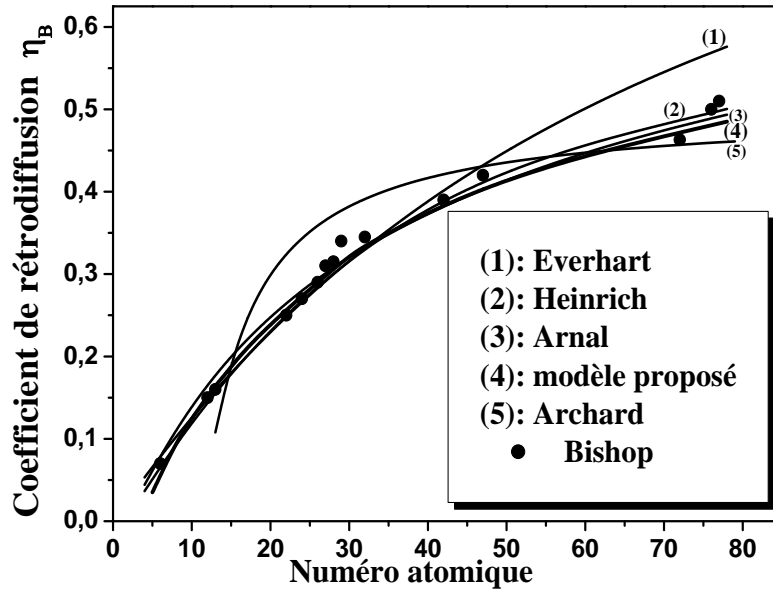
Pour déterminer le coefficient de rétrodiffusion, on va étudier son comportement sous l'effet de plusieurs paramètres :

#### **2-4-1-Influence du numéro atomique :**

Pour l'influence du numéro atomique sur le coefficient de rétrodiffusion on a comparé notre résultat avec ceux de: Arnal [6] , Heinrich - Reuter [7], Everhart[8], Archard[9] et les données expérimentales de Bishop [4] .

La figure (III.11) représente cette comparaison.

Comme on peut remarquer, notre résultat de  $\eta_B(Z)$  coïncide bien avec ceux de Arnal, Heinrich, Everhart et Bishop. Sachant que le résultat d'Archard se trouve assez loin de ces modèles.



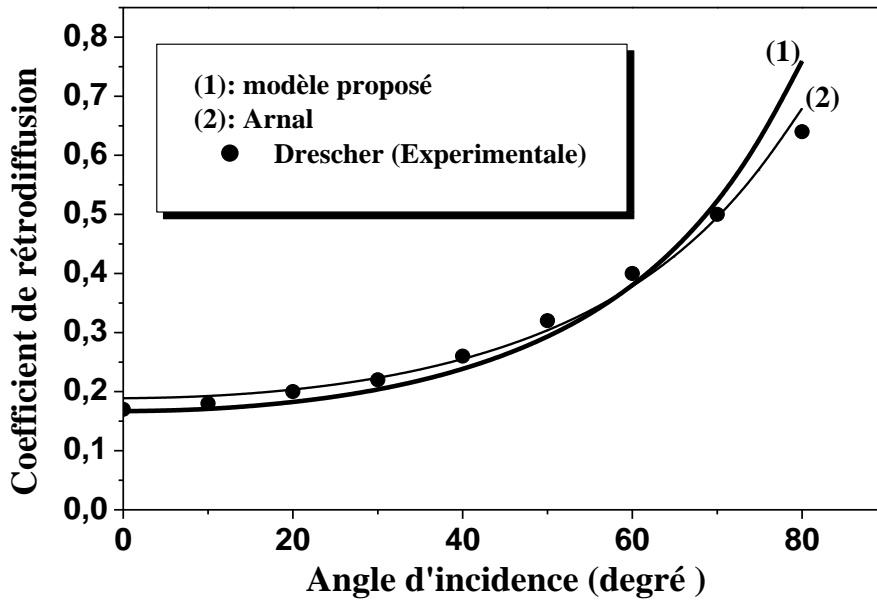
**Figure (III.11):** Le coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique.

Notre résultat montre que ce coefficient croit d'une manière monotone avec le nombre atomique  $Z$ .

Ceci s'explique par le fait que la section efficace totale de la diffusion élastique dépend fortement de  $Z$  (Equation (II.4)) ce qui était vérifié aussi expérimentalement par plusieurs auteurs [77]. Donc, les déviations sont de plus en plus probables lorsque  $Z$  augmente.

#### 2-4-2-Influence de l'angle d'incidence:

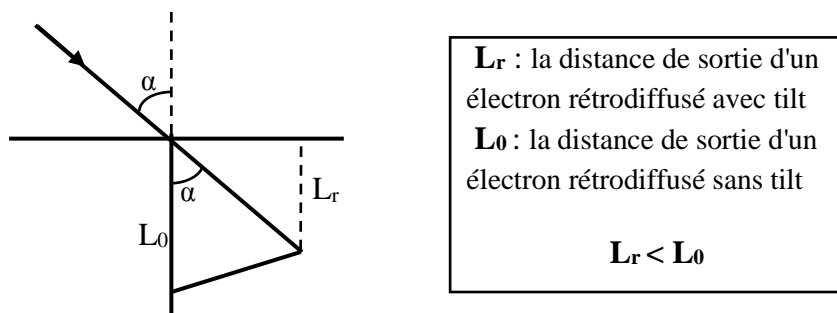
La figure suivante représente la comparaison entre notre résultat et celui d'Arnal [6] et les données expérimentales de Drescher [78] pour l'évolution du coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'angle d'incidence.



**Figure (III.12):** Le coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'angle d'incidence

D'après cette figure, on remarque que le taux des électrons rétrodiffusés augmente avec l'augmentation de l'angle d'incidence.

Par conséquent à l'asymétrie du volume de génération en fonction de l'angle d'incidence, le coefficient de rétrodiffusion en est directement influencé. C'est logique, l'augmentation de cet angle entame l'augmentation de la probabilité de sortir des électrons par la surface d'incidence car leur distance de sortie diminuera (Figure (III.13)).



**Figure (III.13):** Illustration de la relation géométrique entre l'angle d'incidence et la distance de sortir des électrons rétrodiffusés.

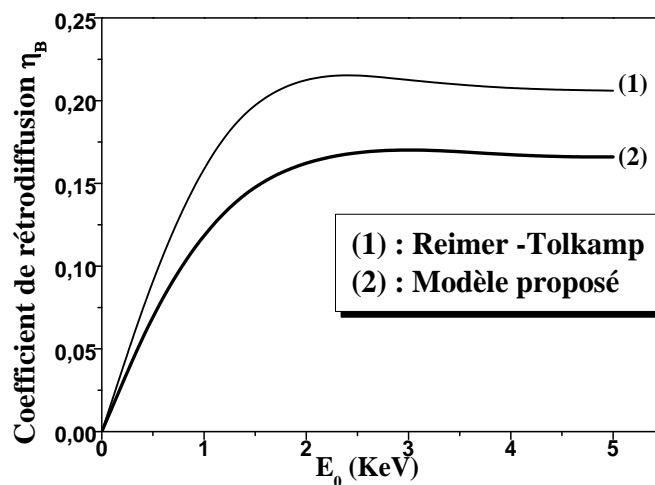
Donc, l'angle d'incidence du faisceau électronique doit être le plus petit possible pour minimiser le coefficient de rétrodiffusion afin d'avoir plus de courant EBIC.

### 2-4-3-Influence de l'énergie primaire :

La figure (III.14) représente l'évolution du coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie primaire  $E_0$  d'après notre résultat et de celui de Reimer -Tolkamp [79].

Il apparaît nettement d'après cette figure, qu'il y a une augmentation de ce coefficient en fonction de  $E_0$  dans les très basses énergies .

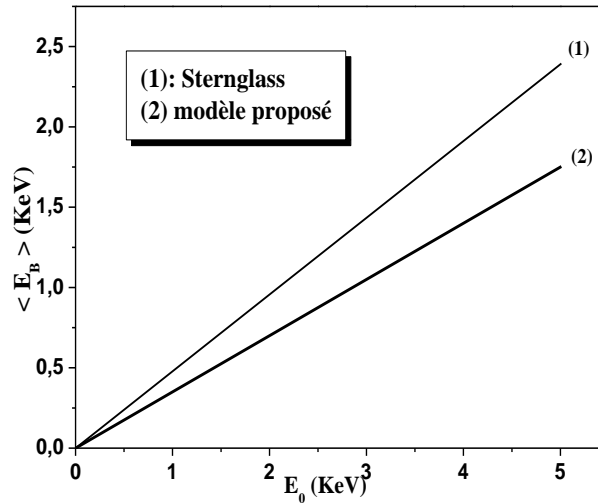
Après une certaine valeur de  $E_0$  (presque 3 KeV dans notre cas ) on remarque que ce coefficient est pratiquement indépendant de  $E_0$ , autrement dit, il n' ya plus de nouveaux électrons rétrodiffusés et tous le reste des électrons seront absorbés ou transmis de l'échantillon. Ca s'explique par le fait qu'après une certaine valeur critique de  $E_0$  la profondeur de pénétration sera assez grande et que les électrons seront assez loin de la surface de pénétration et ne peuvent plus être rétrodiffusés.



**Figure (III.14) : Le coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie primaire  $E_0$**



### 2-4-4-L'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés :



***Figure (III.15): L'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés en fonction de l'énergie primaire***

La figure (III.15) représente une comparaison entre notre résultat et celui de Sternglass[14] concernant l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés. Cette énergie n'est d'autre que le rapport entre la somme des énergies de ces électrons et leur nombre total.

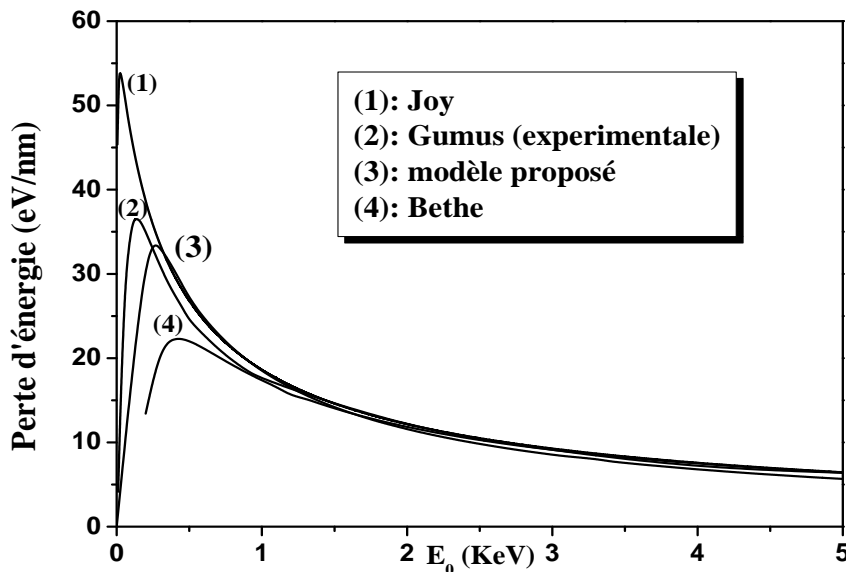
L'énergie des électrons rétrodiffusés est proche de l'énergie primaire  $E_0$  (par rapport aux autres électrons -secondaires et transmis-). Donc, quand il y aura une augmentation de  $E_0$  il y aura automatiquement une augmentation de  $\langle E_B \rangle$ .

### 2-5- La perte d'énergie :

Pour étudier la perte d'énergie, beaucoup de modèles ont été élaborés. Par exemple, la méthode de la gaussienne modifiée, la fonction du déplacement exponentielle et la méthode Monté Carlo [29].

On a représenté notre résultat de la perte d'énergie à la figure (III.16). Comme on peut voir, il y a une bonne concordance entre notre résultat et ceux de: Bethe [22], Joy [81] et Gumus [82].

L'allure générale de cette perte a une forme d'un pic qui est créé dans les très basses énergies primaires, puis il diminue au fur et à mesure avec l'augmentation de ces dernières.



**Figure (III.16):** Variation de la perte d'énergie en fonction de l'énergie primaire

Effectivement, la perte d'énergie de l'électron primaire est significative dans la gamme des très basses énergies primaires qui correspondent au cas où il sera dans la zone intense du volume de génération là où il y a la majorité des interactions inélastiques. Mais une fois l'énergie primaire augmentera et atteindra un certain seuil, la profondeur de pénétration sera assez grande et les électrons auront moins de probabilité d'avoir des interactions inélastiques (moins d'énergie perdue).

## 2-6- Les électrons secondaires:

Le rendement d'émission secondaire est régi au même temps par le nombre des électrons secondaires générés et la profondeur de leur génération.

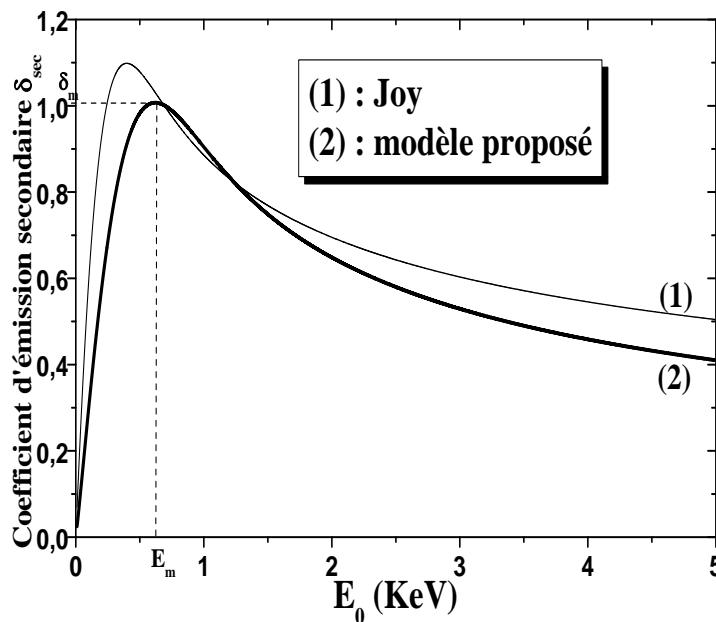
### 2-6-1- Influence de l'énergie primaire :

Dans son étude de ce rendement, Joy à adopté la formule suivante [81] :

$$\left( \frac{\delta_{sec}}{\delta_m} \right) = 1.11 \left( \frac{E_0}{E_m} \right)^{-0.35} \left[ 1 - \exp \left\{ -2.3 \left( \frac{E_0}{E_m} \right)^{1.35} \right\} \right] \quad (III.4)$$

pour le silicium il a mentionné que :  $\delta_m = 1.10$  et  $E_m = 0.4$  KeV.

Le coefficient d'émission secondaire calculé par notre modèle vari avec l'énergie primaire comme le montre la figure (III.17). Cette figure représente aussi la comparaison entre notre résultat et celui de Joy.



**Figure (III.17):** Coefficient d'émission secondaire en fonction de l'énergie primaire  $E_0$

Comme on peut remarquer, ces deux courbes ne sont pas trop loin l'une de l'autre.

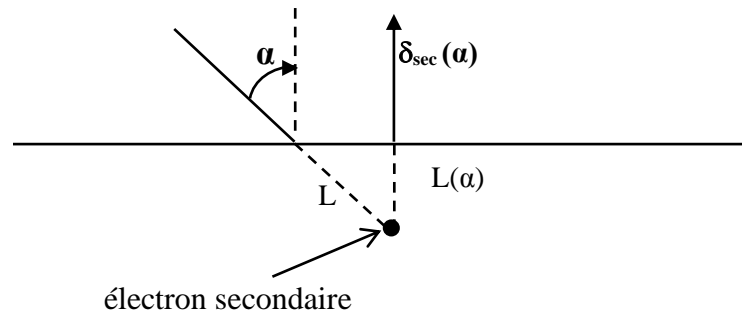
Dans le domaine des très basses énergies, le nombre des électrons secondaires augmente avec l'énergie primaires (élévation de la valeur de la profondeur de pénétration). Cette augmentation s'effectue jusqu'à une valeur maximale du rendement  $\delta_m \approx 1.009$  correspondant à l'énergie  $E_m = 0.625 \text{ KeV}$ .

Cette énergie critique n'est que l'énergie là où la profondeur de pénétration maximale  $R_e$  égalera à la profondeur d'échappement  $\Lambda$ .

### 2-6-2-Influence de l'angle d'incidence :

Pareille au cas des électrons rétrodiffusés, la distance parcourue par un électron secondaire depuis sa création jusqu'à la surface s'en trouve diminuée avec l'angle d'incidence selon la loi [2] :

$$\mathbf{L(\alpha) = L \cos\alpha} \quad \mathbf{(III.5)}$$



***Figure (III.18): Illustration de l'influence de l'angle d'incidence sur la distance parcourue par un électron secondaire***

Le nombre des électrons secondaires ayant une énergie suffisante pour atteindre et franchir la surface va donc augmenter. Autrement dit, plus l'incidence est rasante plus la production d'électrons secondaires est importante.

Les travaux expérimentaux de Bruining [83] et ceux de Shimizu-Murata [59] par simulation ont permis d'obtenir la loi suivante :

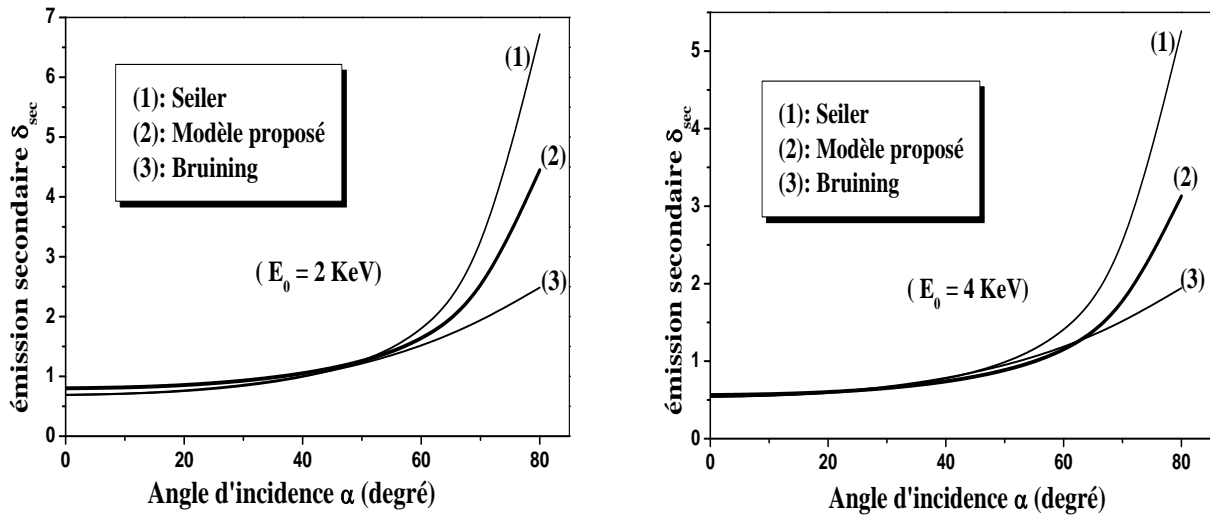
$$\delta(\alpha) = \delta(0) \exp(-1.55 (\cos \alpha - 1)) \quad (III.6)$$

Une autre formule dans ce sujet est celle de Seiler [84]:

$$\delta(\alpha) = \delta(0) (\cos \alpha)^{-n} \quad (III.7)$$

Avec  $n=1.3 \rightarrow Z < 30$   
 $n=1 \rightarrow Z=30$   
 $n=0.8 \rightarrow Z > 30$

La figure (III.19) a englobé notre résultat avec ceux des deux formules précédentes:



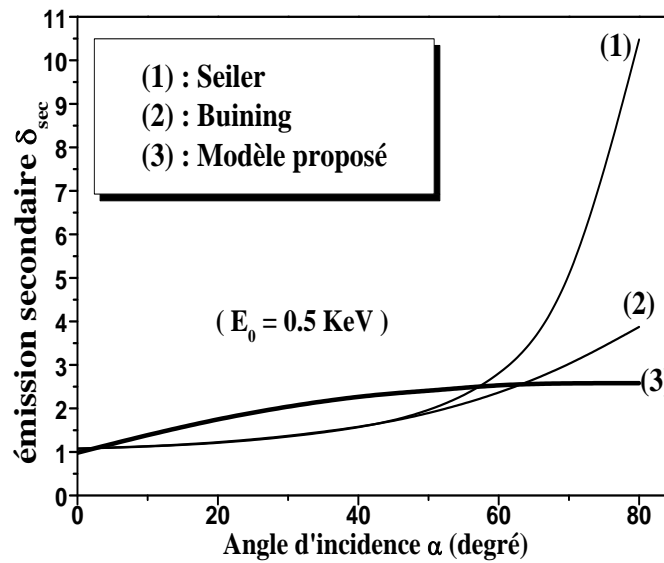
**Figure (III.19): Influence de l'angle d'incidence sur le rendement d'émission secondaire dans le domaine des basses énergies**

Sachant qu'on a pris pour les deux formules de Bruining et Seiler une valeur initiale  $\delta(0)$  basée sur la formule de Joy (III.4). Par contre pour notre résultat cette valeur a été calculée par notre modèle.

On remarque que notre résultat coïncide bien avec les deux autres dans le domaine des basses énergies (quelques keV).

Au contraire, et dans le domaine des énergies très basses (moins de 1 KeV) on remarque que c'est plus le cas (Figure(III.20)). Dans ce domaine d'énergies, notre modèle donne un résultat plus réaliste que les deux autres modèles généralisés.

Effectivement, à très basse énergie la profondeur de pénétration est proche de la profondeur d'échappement, donc, le taux des électrons secondaires est grand et il va encore augmenter avec l'angle d'incidence jusqu'il y aura plus de création d'autres électrons secondaires ( au-delà, l'angle d'incidence n'aura plus d'influence).



**Figure (III.20): Influence de l'angle d'incidence sur le rendement d'émission secondaire dans le domaine des très basses énergies**

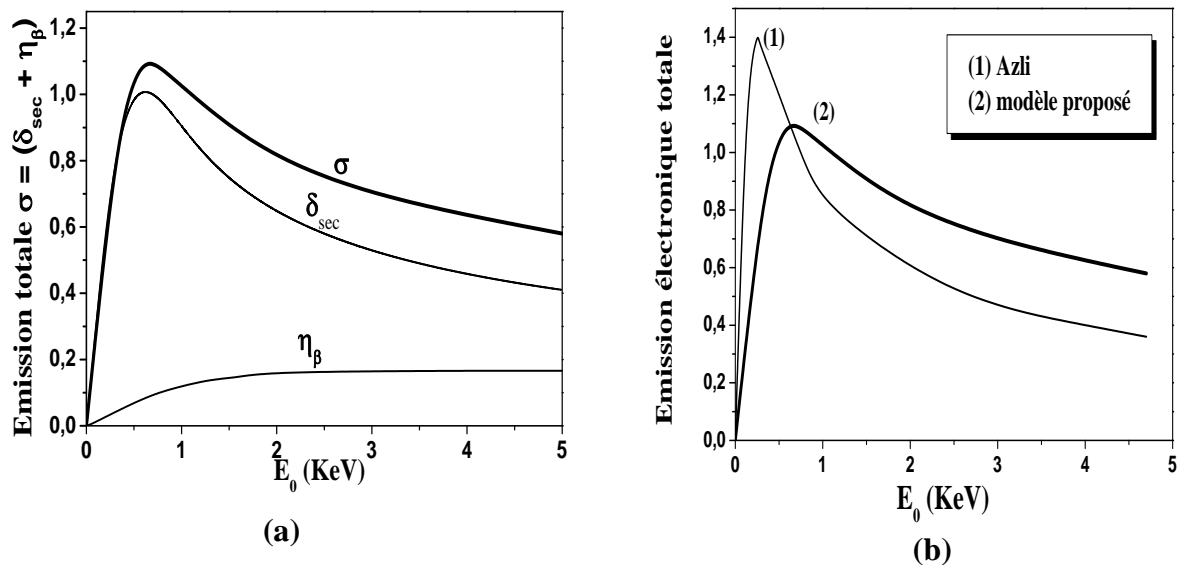
D'après les formules (II.38) et (III.2), et pour notre échantillon, la profondeur maximale de pénétration égale à la profondeur d'échappement pour une énergie primaire  $E_0=0.33\text{KeV}$ .

### 2-7- L'émission électronique totale :

Le rendement d'émission électronique totale est la sommation des deux émissions rétrodiffusée et secondaire (Equation (I.6)).

À partir des deux résultats (Figure (III.14)) et (Figure (III.17)) on peut obtenir la courbe de l'émission électronique totale comme le montre la figure (III.21-a-). Alors que la figure (III.21-b-) représente la comparaison entre notre résultat et celui de Azli [85].

Comme on peut remarquer, et du fait du faible rendement des électrons rétrodiffusés, la courbe de l'émission totale est régnée par celle de l'émission électronique secondaire.



**Figure (III.21): Le rendement d'émission électronique totale en fonction de l'énergie primaire  $E_0$  (KeV)**

En parallèle de l'augmentation de la profondeur de pénétration (augmentation de l'énergie primaire  $E_0$ ), il y aura une augmentation du nombre d'électrons rétrodiffusés et secondaires. Dans le domaine des très basses énergies, ces électrons seront proches de la surface et leur probabilité de sortir sera grande.

Puis, ce nombre diminuera avec la continuation de l'augmentation de la profondeur de pénétration (la diminution de la probabilité de sortir).

On remarque que cette figure (III.21-a-) ressemble bien à la figure (I.7) tirée de la littérature [2] ce qui prouve la validité de notre modèle.

L'étude de l'interaction électron-matière est le pilier principal pour l'application de la technique EBIC.



### 3 - Simulation du signal nano-EBIC :

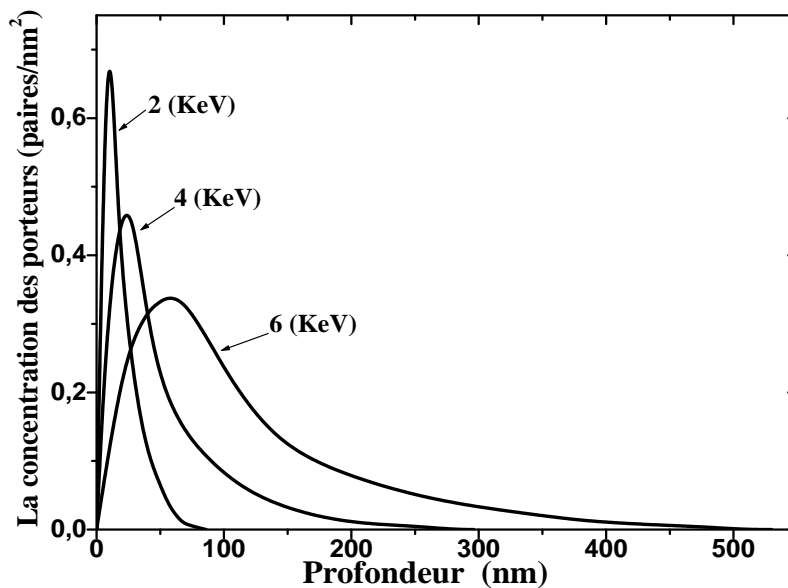
Après avoir présenté les résultats précédents préliminaires et en même temps primordiaux, nous allons maintenant passer à l'étude du signal nano-EBIC qui est le point le plus important dans cette technique de caractérisation.

#### 3-1- Le profil de distribution des paires :

##### 3-1-1-Influence de l'énergie primaire :

Avant de détailler l'étude consacrée à la technique nano-EBIC, il est intéressant de rappeler certaines caractéristiques. L'un des points les plus importants et qui va influencer sur la présente technique est la distribution des paires électrons-trous dans le volume de génération.

Le résultat donné dans la figure qui suit résulte de notre démarche:



**Figure (III.22): Profil de distribution des paires pour 100 électrons pénétrants en fonction de la profondeur de pénétration et de l'énergie primaire**

La figure (III.22) représente le profil de distribution des paires électron-trou créées lors de la pénétration de 100 électrons dans notre échantillon en fonction de la profondeur  $z$  pour différentes valeurs de  $E_0$  (incidence normale).

On remarque que ces courbes ont la forme d'une Gaussienne dans les faibles énergies avec un étalement dans les énergies de plus en plus élevées. Le même résultat était trouvé dans le cas d'un échantillon semi-infini en silicium [10,26].

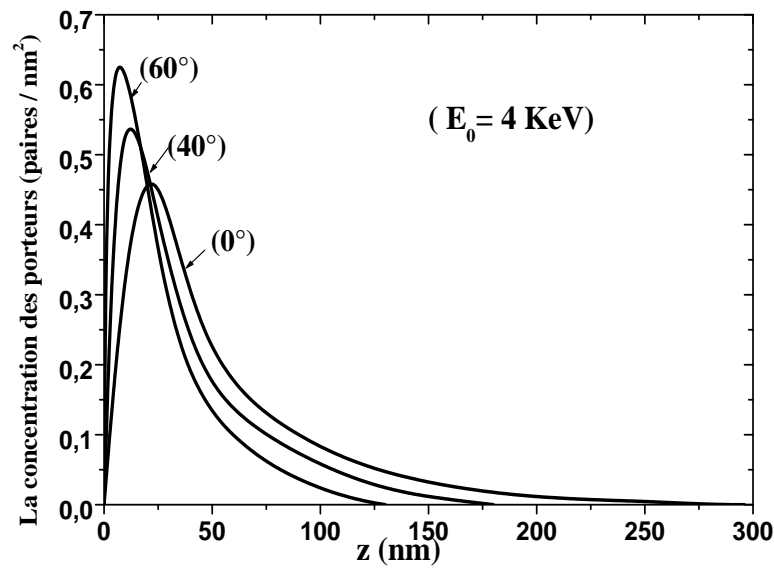
Ces courbes ont la même forme que celle de la perte d'énergie (Figure (III.16)) à cause de la grande relation entre les deux phénomènes (la perte d'énergie est la cause principale et unique de la génération des paires -dans le cas d'une génération induite-).

### **3-1-2-Influence de l'angle d'incidence :**

Comme on a vu précédemment, l'angle d'incidence est très important dans une étude qui se base sur l'utilisation de la technique EBIC, et que cet angle doit être le plus petit possible pour minimiser le coefficient de rétrodiffusion et avoir plus de courant collecté dans cette technique à sa version classique.

Malgré cette remarque, on trouve des études qui se basent sur l'utilisation de la technique nano-EBIC, et pour des raisons purement expérimentales ont choisi de travailler sous une incidence allant de  $45^\circ$  jusqu'à  $60^\circ$ [66,69]. C'est pour cela qu'une étude de l'influence de cet angle est inévitable.

La figure (III.23) représente le profil de distribution des paires créées lors de la pénétration de 100 électrons avec une énergie de 4KeV dans notre échantillon en fonction de la profondeur  $z$  pour différentes valeurs d'angle d'incidence.



**Figure (III.23) : Profil de distribution des paires pour 100 électrons pénétrants en fonction de la profondeur de pénétration et de l'angle d'incidence ( $E_0 = 4\text{KeV}$ )**

On remarque, que dans ce cas aussi, la forme des courbes est une Gaussienne qui inspire son allure du déplacement de la largeur maximale du volume de génération avec l'augmentation de l'angle d'incidence.

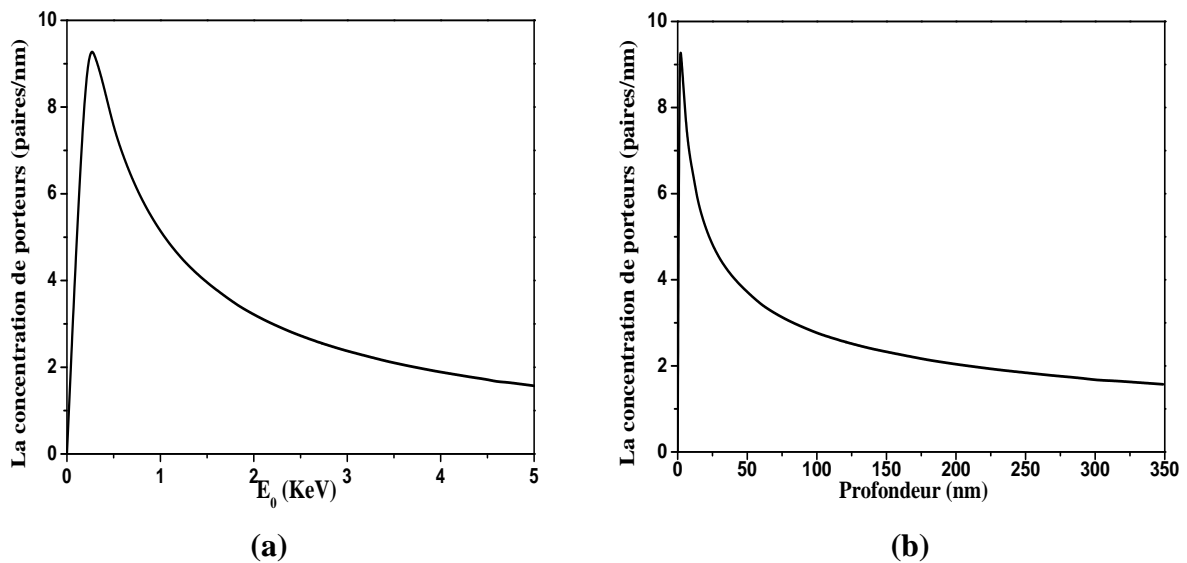
Pour  $E_0 = 4\text{KeV}$  on trouve que :

Le profil présente un maximum de  $0.53 \text{ paires/nm}^2$  à la profondeur  $z = 12.5\text{nm}$  et il s'étale jusqu'à une profondeur de  $177 \text{ nm}$  pour  $\alpha=40^\circ$ . Au même temps, il présente un maximum de  $0.62 \text{ paires/nm}^2$  à la profondeur  $z = 8\text{nm}$  en s'étalant jusqu'à une profondeur de  $129 \text{ nm}$  pour  $60^\circ$ . Par contre, pour  $\alpha=0^\circ$  il présente un maximum de  $0.46 \text{ paires/nm}^2$  à la profondeur  $z = 22.7\text{nm}$  en s'étalant jusqu'à une profondeur de  $276 \text{ nm}$ .

Donc, il y a une très grande influence de l'angle d'incidence sur le profil des paires créées, et contrairement à la version classique, la version nanométrique de la technique EBIC privilégie les angles d'incidence importants pour être fiable dans des échantillons de moins en moins dimensionnels.

En cas de nécessité, et pour avoir ce profil de distribution en fonction d'unité de profondeur (paires/nm), notre modèle peut s'adapter simplement à ce besoin.

En effet, il suffit de faire introduire un petit changement à notre résultat représenté à la figure (III.16) en le divisant par l'énergie de formation d'une paire électron-trou pour avoir ce résultat en fonction de l'énergie primaire (Figure (III.24-a-)), et en se basant sur la formule  $R_e(E_0)$  (Formule (III.2)) pour l'avoir en fonction de la profondeur de pénétration maximale (Figure (III.24-b-)).



***Figure (III.24) : Profil de distribution des paires par unité de profondeur en fonction de: (a) l'énergie primaire, (b) la profondeur de pénétration***

L'utilisation de notre modèle numérique pour l'étude de la génération des paires électron-trou nous a permis d'étudier seulement la génération induite (par faisceau électronique) en évitant l'étude de la génération spontanée due à l'agitation thermique qui représente un problème dans certaines expériences.

### 3-2- L'efficacité de collecte :

Nous allons étudier l'efficacité de collecte des porteurs de charge minoritaires en excès (leur contribution au courant nano-EBIC) en fonction de plusieurs paramètres :

#### 3-2-1- En fonction de la forme de la zone de déplétion :

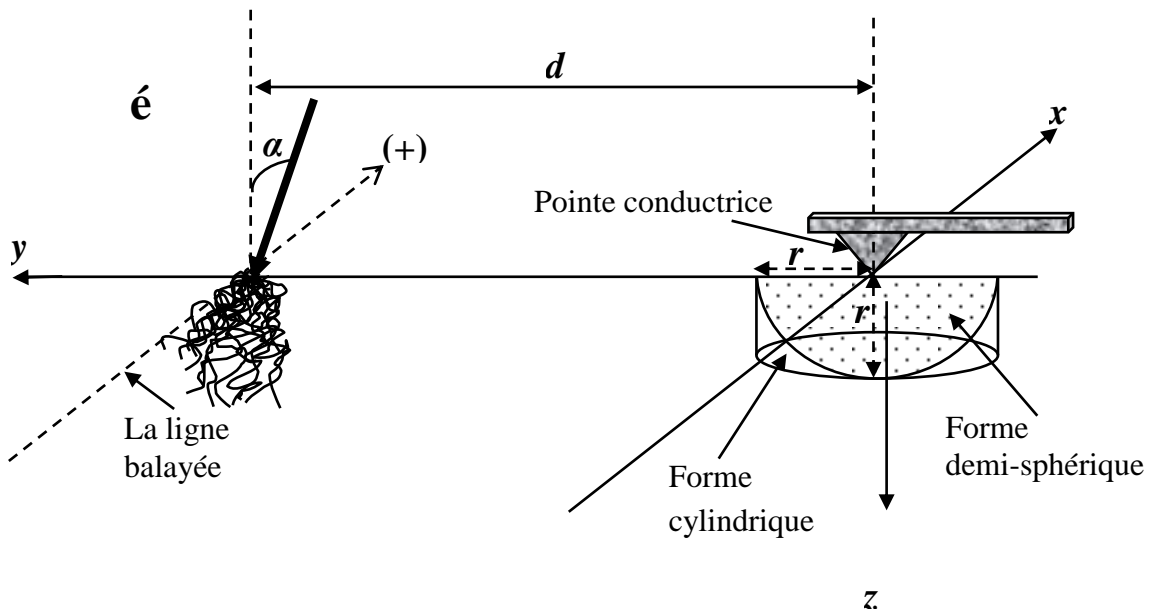
La zone de déplétion est le lieu là où il y a une accélération dans le cas des charges minoritaires et une répulsion dans le cas des charge majoritaires.

Il n'est pas facile de connaître la forme géométrique de cette zone, parce que son extension dépend des niveaux de Fermi de la pointe de l'AFM et de ceux de l'échantillon [66].

Doan-Elhdiy[66] dans leur étude du germanium nanostructuré, ont limité leurs probabilités de la forme de cette zone aux deux cas: la forme demi-sphérique et la forme cylindrique. Ces deux choix ont été proposés en se basant sur la forme circulaire du nano-contact.

De notre part, on ne va pas sortir des limites de ce cadre, donc on va étudier ces deux formes dans le cas de notre échantillon et l'influence de chacune sur l'efficacité de collecte.

On considère que " $r$ " est le rayon commun de ces deux formes (Figure (III.25)).



**Figure (III.25): Illustration des deux formes proposées pour la zone de déplétion**

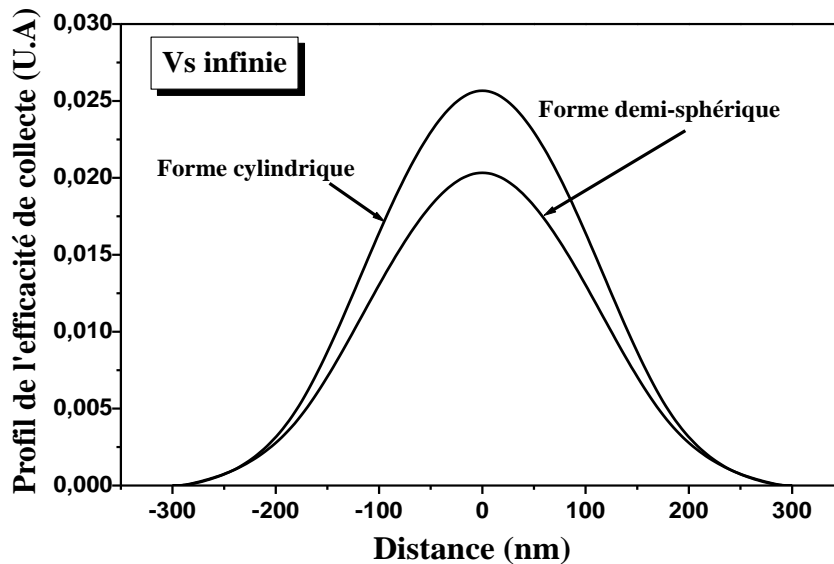
Les figures (III.26) et (III.27) représentent le profil de l'efficacité de collecte (suivant les deux cas extrêmes de la vitesse de recombinaison en surface).

On a considéré les paramètres suivants:

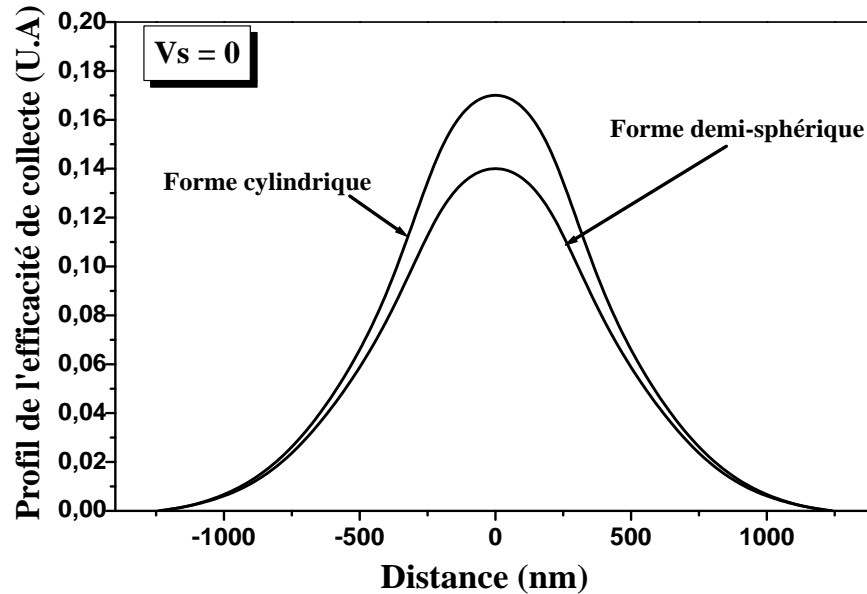
$$\left\{ \begin{array}{l} r = 50 \text{ nm} \\ L = 1 \mu\text{m} : \text{longueur de diffusion des charges minoritaires en excès.} \\ d = 50 \text{ nm} \\ E_0 = 5 \text{ KeV} \end{array} \right.$$

Le choix de la valeur de la longueur de diffusion  $L=1\mu\text{m}$  est basé sur le fait que l'échantillon étudié est supposé dopé. En effet, cette longueur peut diminuer d'environ  $100\mu\text{m}$  à environ  $2\mu\text{m}$  lorsque la concentration du dopage varie d'environ  $8 \times 10^{16}$  à  $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  [86]. Notre choix reste acceptable et il est aussi basé sur des travaux ultérieurs [87, 88].

a - Cas de  $V_s \rightarrow \infty$ :



**Figure (III.26):** Le profil de l'efficacité de collecte pour les deux formes proposées dans le cas de  $V_s \rightarrow \infty$

b - Cas de  $V_s = 0$  :

**Figure (III.27):** Le profil de l'efficacité de collecte pour les deux formes proposées dans le cas de  $V_s = 0$

Dans le cas des positions de bombardement éloignées (sachant que l'origine du repère est le point de contact entre la pointe conductrice et la surface de l'échantillon), les deux profils se chevauchent. Par contre, dans le cas des positions proches, on remarque que la forme cylindrique collecte plus de charges que la forme demi-sphérique (ce résultat concorde parfaitement avec celui de Doan-Elhdiy [66]).

Ceci peut être expliqué par le fait que, le volume de la forme cylindrique est plus grand que celui de la demi-sphère (Equations (III.8) et (III.9)). Donc, les charges minoritaires en excès auront plus de chance (augmentation de la probabilité) d'être collectées dans le cas de la première forme.

$$\text{Le volume du cylindre est : } V_{\text{Cylindre}} = \pi r^3 \quad \text{(III.8)}$$

$$\text{Le volume du demi-sphère est : } V_{(1/2) \text{ sphère}} = (4/6) \pi r^3 = 0.6666 \pi r^3 \quad \text{(III.9)}$$

Alors que pour les positions du bombardement éloignées, cette différence de volume n'aura pas d'influence à cause de la petitesse du nombre de charges collectées.

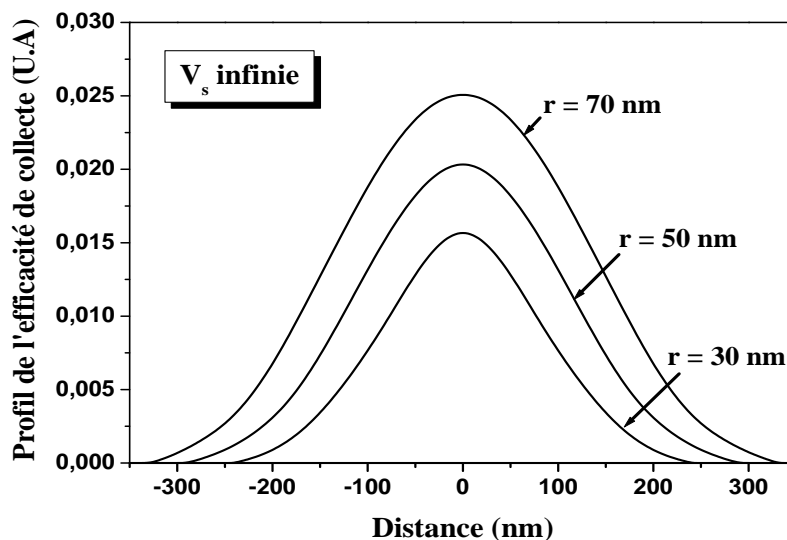
D'un point de vue simplificatrice, nous avons opté pour le choix de la forme demi-sphérique car la tête de la pointe a un bout hémisphérique d'un côté et d'un autre côté cette forme va nous faciliter la tâche en raison de la symétrie, donc nous adopterons cette forme pour le reste du travail.

### 3-2-2- En fonction de la taille du nano-contact :

D'habitude, la taille de la zone de déplétion est fortement influencée par le taux du dopage et par la nature du contact entre métal et semiconducteur. Par contre, dans le cas du nano-EBIC, le rayon du nano-contact est maintenu expérimentalement par le réglage de la force d'appui pointe-surface, le rayon de courbure de la pointe et le module élastique effectif représentant l'interaction pointe-surface [66,68].

Dans notre modèle, la taille du nano-contact influence plus l'efficacité de collecte dans le cas d'une vitesse de recombinaison en surface infinie, c'est pour cette raison qu'on s'est contenté d'étudier ce cas.

La figure (III.28) représente cette influence. Comme on peut remarquer, quand la taille du nano-contact augmente, l'efficacité de collecte (la probabilité de collecte) augmente aussi.



**Figure (III.28): Profil de l'efficacité de collecte en fonction de la taille du nano-contact ( $d = 50$  nm,  $E_0 = 5$  KeV,  $V_s \rightarrow \infty$ )**



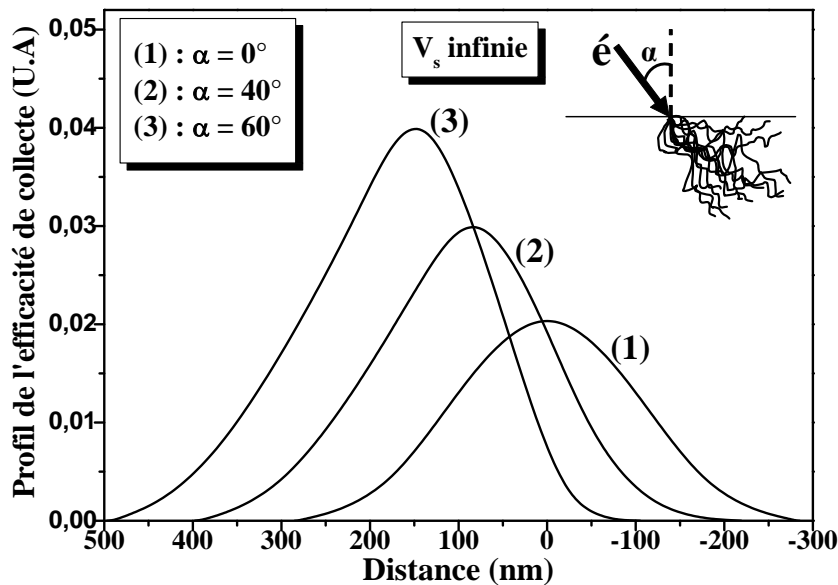
### 3-2-3- En fonction de l'angle d'incidence :

La particularité de l'angle d'incidence dans le cas de la technique nano-EBIC réside dans le fait que l'application d'un bombardement incliné est une obligation expérimentale (pour éviter de bombarder la pointe à cause de la grande petitesse de la distance "d").

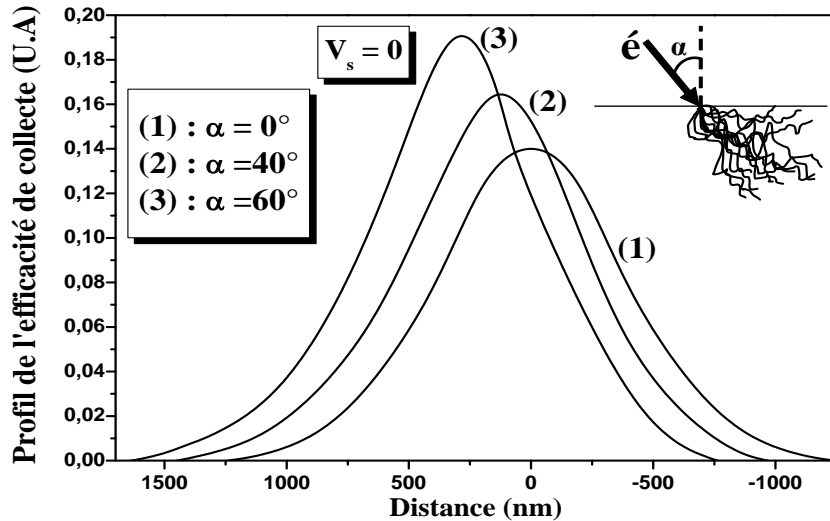
Les expérimentateurs rencontrent un autre problème qui est bien la dissymétrie observée dans leurs courbes [30,66,69]. Ils ont essayé d'expliquer cette dissymétrie par beaucoup de propositions (l'effet du photo-courant dans le cas des recombinaisons radiatives pour certains échantillons, la saturation du courant à cause de l'accumulation des charges dans des nano-objets .....etc.).

De notre part, et pour faciliter l'ajustement entre nos résultats et ceux des expérimentateurs on a pris par simplification que l'angle d'incidence est pris dans la même direction du déplacement du faisceau électronique (Figure (III.25)).

Les figures (III.29) et (III.30) représentent la variance de l'efficacité de collecte dans le cas de  $V_s \rightarrow \infty$  et  $V_s = 0$  respectivement en fonction de cet angle :



**Figure (III.29):** Profil de l'efficacité de collecte en fonction de l'angle d'incidence ( $d, r = 50 \text{ nm}$ ,  $E_0 = 5 \text{ KeV}$ ,  $V_s \rightarrow \infty$ )

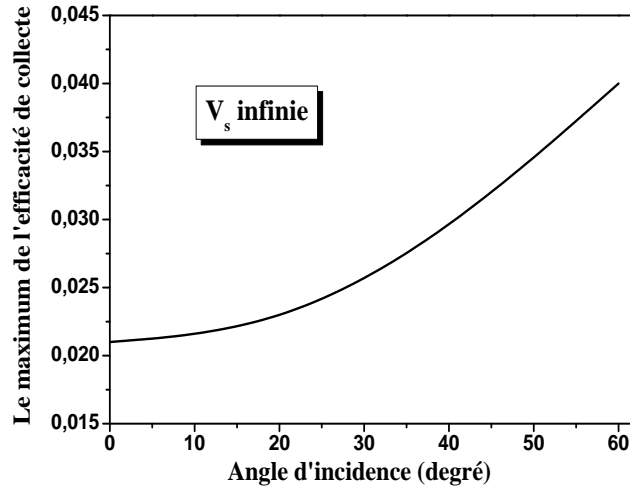


**Figure (III.30): Profil de l'efficacité de collecte en fonction de l'angle d'incidence ( $d, r = 50 \text{ nm}$ ,  $L = 1 \mu\text{m}$ ,  $E_0 = 5 \text{ KeV}$ ,  $V_s = 0$ )**

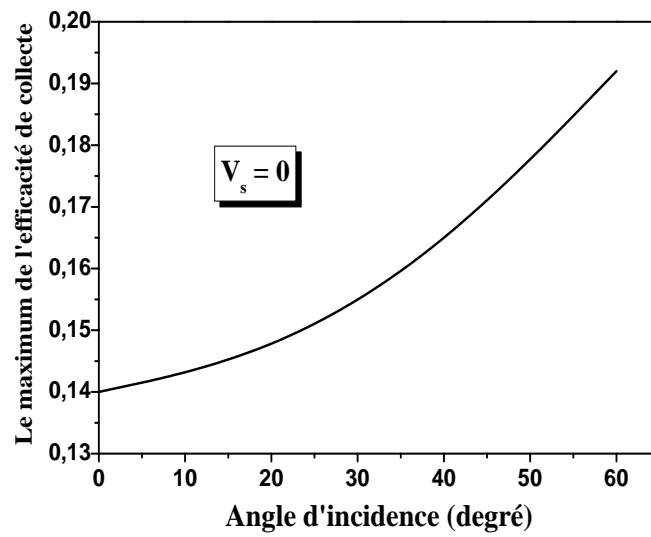
Le maximum de l'efficacité de collecte se déplace au même sens que celui du déplacement du faisceau électronique et avec l'augmentation de l'angle d'incidence qui est un résultat attendu.

La valeur de ce maximum augmente aussi avec ce déplacement par conséquent à l'approchement du volume de génération du nano-contact (augmentation du nombre de charge minoritaires en excès collectées).

Les figures (III.31) et (III.32) représentent l'évolution du maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'angle d'incidence :



**Figure (III.31):** L'évolution du maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'angle d'incidence ( $d, r = 50 \text{ nm}$ ,  $E_0 = 5 \text{ KeV}$  et  $V_s \rightarrow \infty$ )



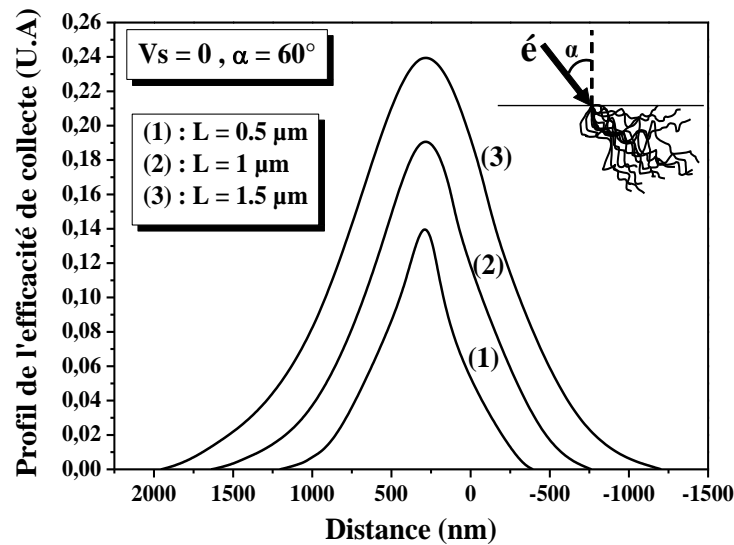
**Figure (III.32):** L'évolution du maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'angle d'incidence ( $d, r = 50 \text{ nm}$ ,  $L = 1 \mu\text{m}$  et  $E_0 = 5 \text{ KeV}$ ) pour  $V_s = 0$

Pour le reste de notre travail on prendra l'angle d'incidence  $\alpha = 60^\circ$ .

### 3-2-4- En fonction de la longueur de diffusion des minoritaires:

Dans notre modèle, la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès influence plus l'efficacité de collecte dans le cas d'une vitesse de recombinaison en surface nulle, c'est pour cette raison qu'on s'est contenté d'étudier ce cas.

La figure (III.33) représente cette influence :



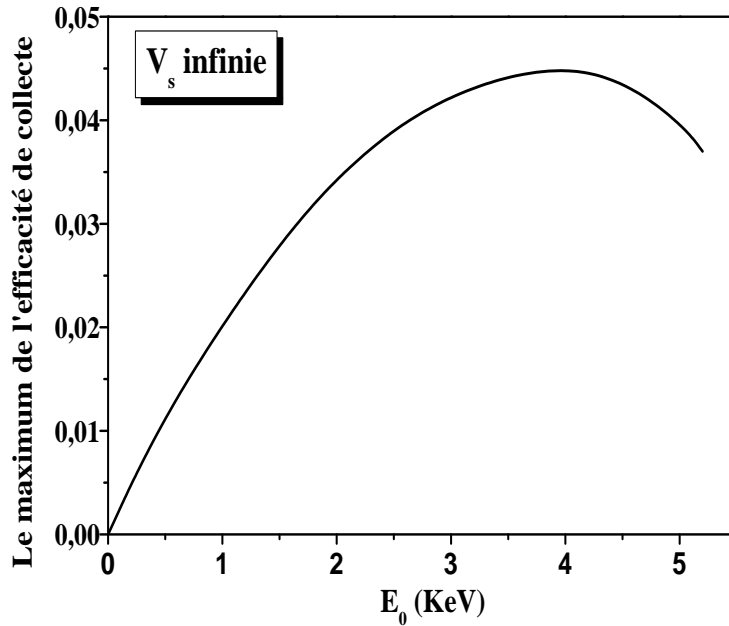
**Figure(III.33) :** Le profil de l'efficacité de collecte en fonction de la longueur de diffusion pour  $V_s = 0$  ( $d, r = 50 \text{ nm}$   $E_0 = 5 \text{ KeV}$ ).

Le profil de l'efficacité de collecte s'élargit et son maximum s'agrandit de plus en plus avec l'augmentation de la longueur de diffusion des minoritaires en excès (augmentation de la probabilité d'atteindre les limites de la zone de déplétion par ces porteurs).

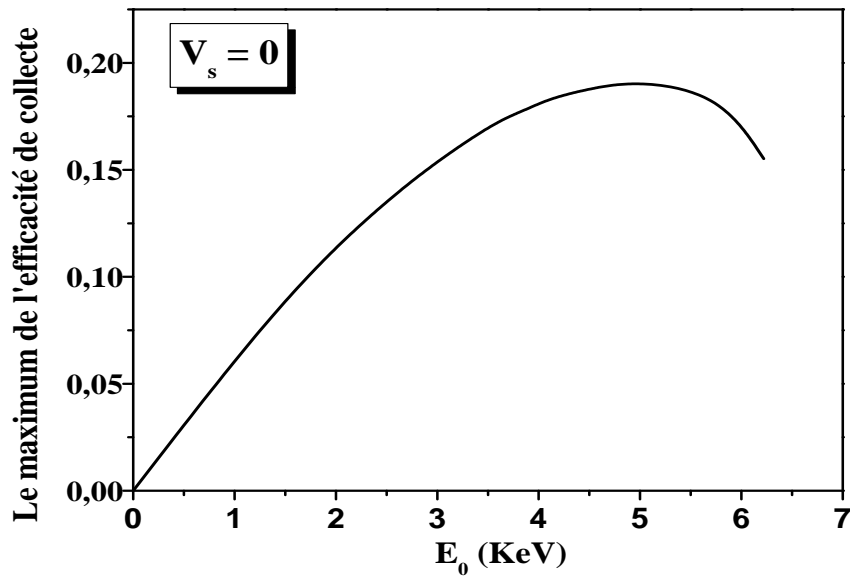
### 3-2-5- En fonction de l'énergie primaire :

Dans le cas de la technique EBIC classique (échantillon semi-infini), l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire converge vers 1 quand  $E_0$  égal à 0 suivant Ledra[89], qui a expliqué ce point par le fait que les pertes dans l'épaisseur du métal sont négligées.

Par contre, dans le cas de cette technique dans sa version nanométrique on trouve :



**Figure(III.34) :** Le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s \rightarrow \infty$  ( $\alpha= 60^\circ, r, d = 50$  nm) .

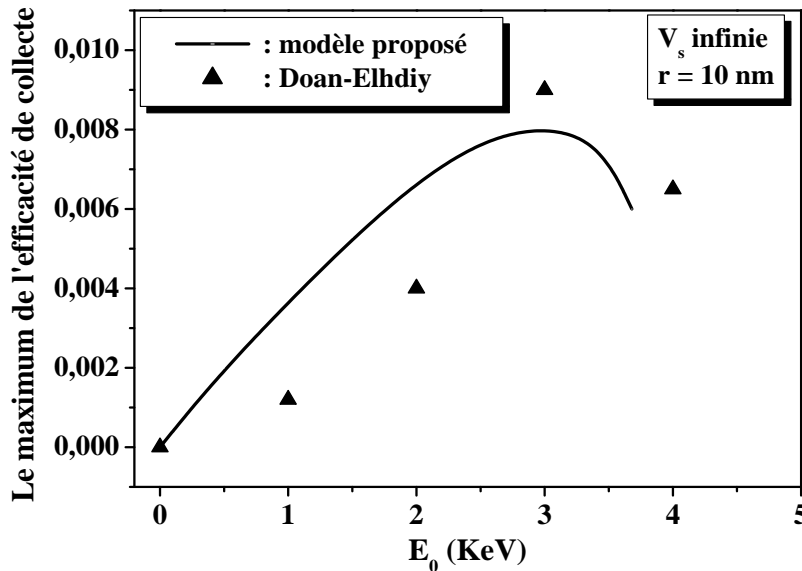


**Figure (III.35) :** Le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s = 0$  ( $\alpha= 60^\circ, L= 1\mu\text{m}, d, r = 50$  nm) .

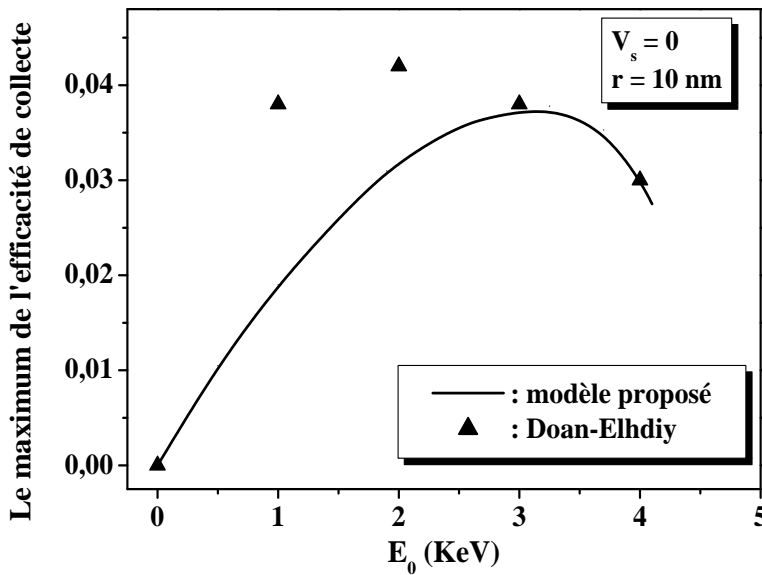
Le maximum de l'efficacité de collecte augmente avec l'augmentation de l'énergie primaire à cause de l'élargissement du volume de génération (augmentation du nombre de charges minoritaires qui sont créées dans ou proches de la zone de déplétion) jusqu'à un certain seuil. Au-delà l'efficacité de collecte diminue par conséquence à l'éloignement des

minoritaires de cette zone (une grande partie des porteurs générés se recombinent avant d'atteindre le nano-contact, c'est ce qui explique cette diminution dans le cas des énergies élevées).

Pour évaluer nos résultats, on les a fait comparé avec ceux de Doan-Elhdiy [66] :



**Figure (III.36) :** Le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s \rightarrow \infty$  ( $\alpha = 60^\circ, d = 100$  nm) .



**Figure (III.37) :** Le maximum de l'efficacité de collecte en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s = 0$  ( $\alpha = 60^\circ, L = 1 \mu\text{m}, d = 100$  nm) .

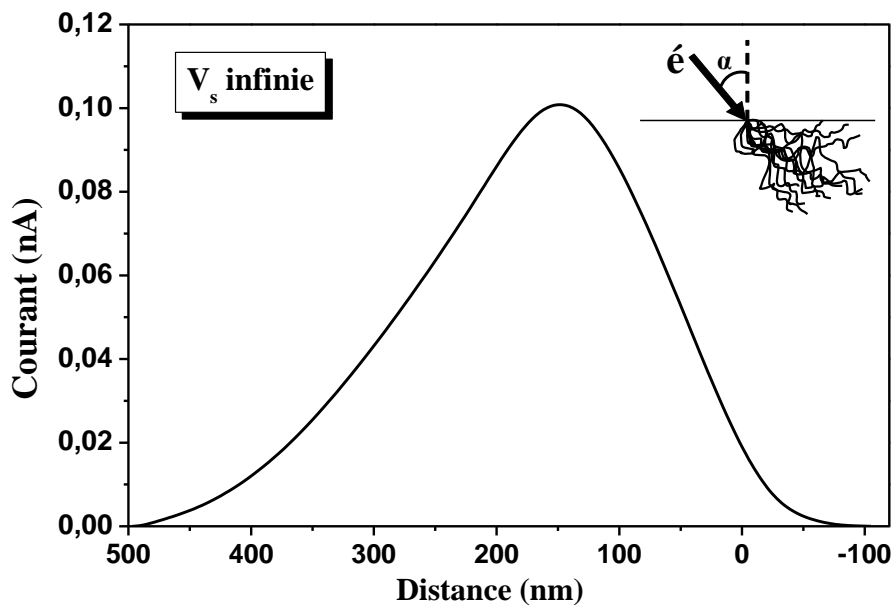
Comme on peut remarquer, nos résultats sont relativement des mêmes ordres de grandeurs que ceux de Doan-Elhdiy [66].

### 3-3- Le courant nano-EBIC :

En se basant sur nos résultats de l'efficacité de collecte et la formule (II.55) de Yakimov[68] on trouve :

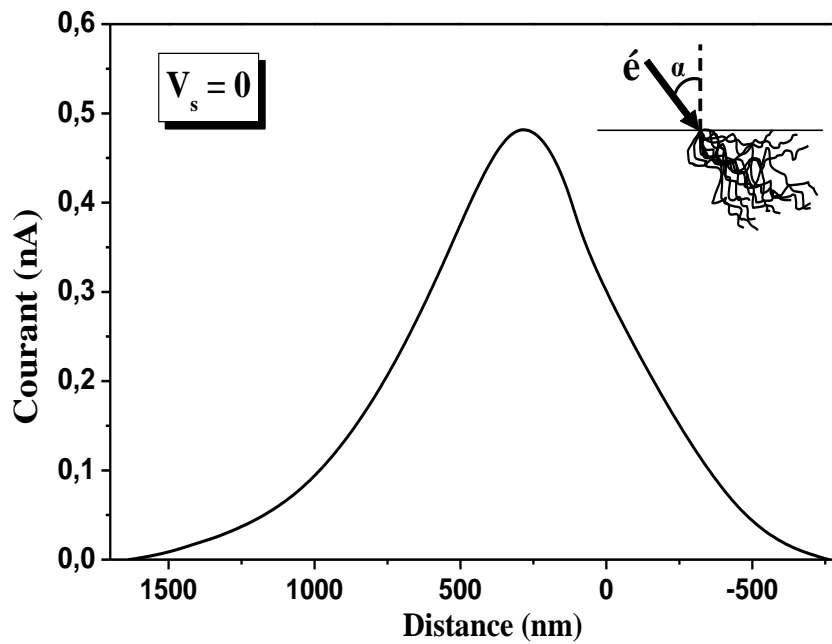
#### 3-3-1- Le profil du courant nano-EBIC :

Les figures (III.38) et (III.39) représentent le profil du courant nano-EBIC :



***Figure (III.38) : Le profil du courant nano-EBIC pour  $V_s \rightarrow \infty$***

***( $\alpha = 60^\circ$ ,  $d, r = 50$  nm,  $E_0 = 5$  KeV,  $I_0 = 2$  nA) .***



**Figure(III.39) : Le profil du courant nano-EBIC pour  $V_s = 0$**   
 ( $\alpha = 60^\circ$ ,  $d, r = 50 \text{ nm}$ ,  $L = 1 \mu\text{m}$ ,  $E_0 = 5 \text{ KeV}$ ,  $I_0 = 2 \text{ nA}$ ).

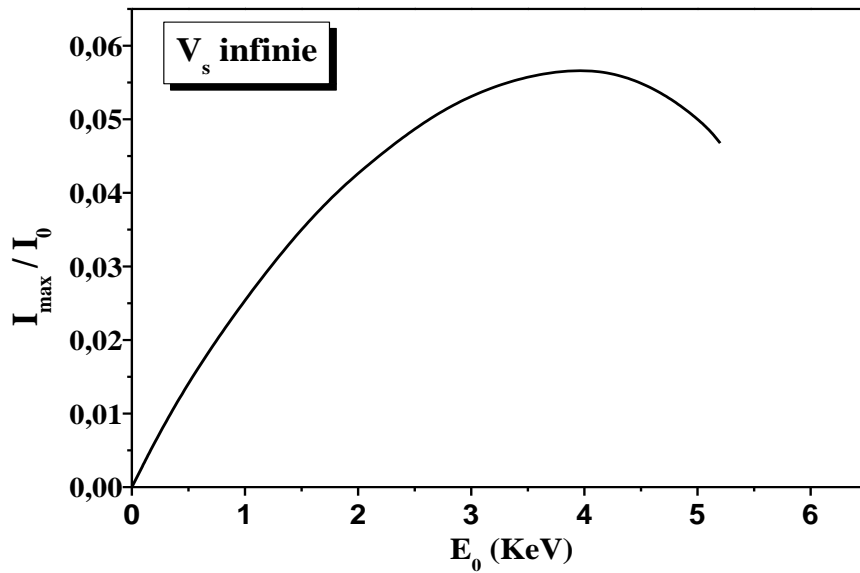
L'allure générale du profil du courant est très ressemblante à celle de l'efficacité de collecte, ce qui était attendue.

Comme notre modèle ne prend en compte que la génération induite des paires, ceci va nous encourager à l'appliquer pour d'autres semiconducteurs que le silicium (semiconducteurs à gap direct là où les recombinaisons radiatives causent des problèmes pour les résultats du profil du courant) dans les travaux qui suivent.

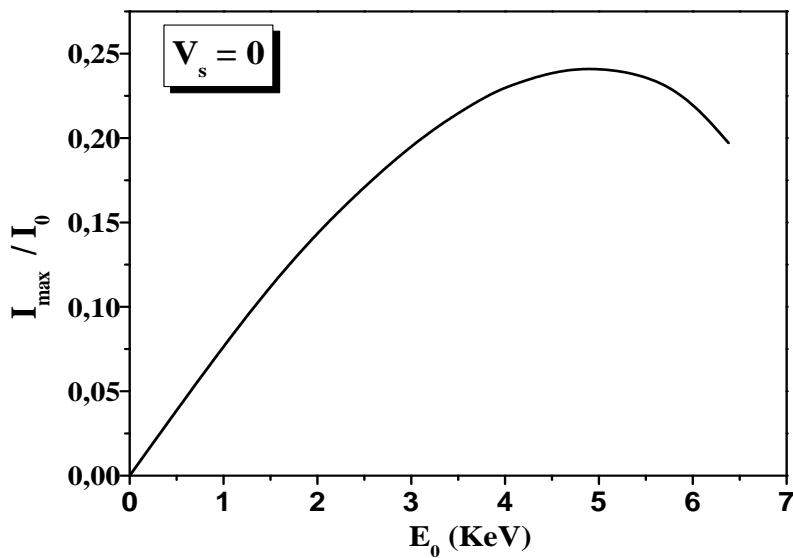
### 3-3-2- Le maximum du courant nano-EBIC :

Les figures (III.40) et (III.41) représentent l'évolution du maximum du courant nano-EBIC en fonction de l'énergie primaire :





**Figure(III.40) :** Le maximum du courant nano-EBIC en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s \rightarrow \infty$  ( $\alpha = 60^\circ$ ,  $d, r = 50$  nm).



**Figure(III.41) :** Le maximum du courant nano-EBIC en fonction de l'énergie primaire pour  $V_s = 0$  ( $\alpha = 60^\circ$ ,  $L = 1\mu\text{m}$ ,  $d, r = 50$  nm).

À partir de ces deux figures, on remarque que le courant collecté est plus petit que le courant primaire. En d'autres mots, dans cette technique l'échantillon est considéré comme un atténuateur.

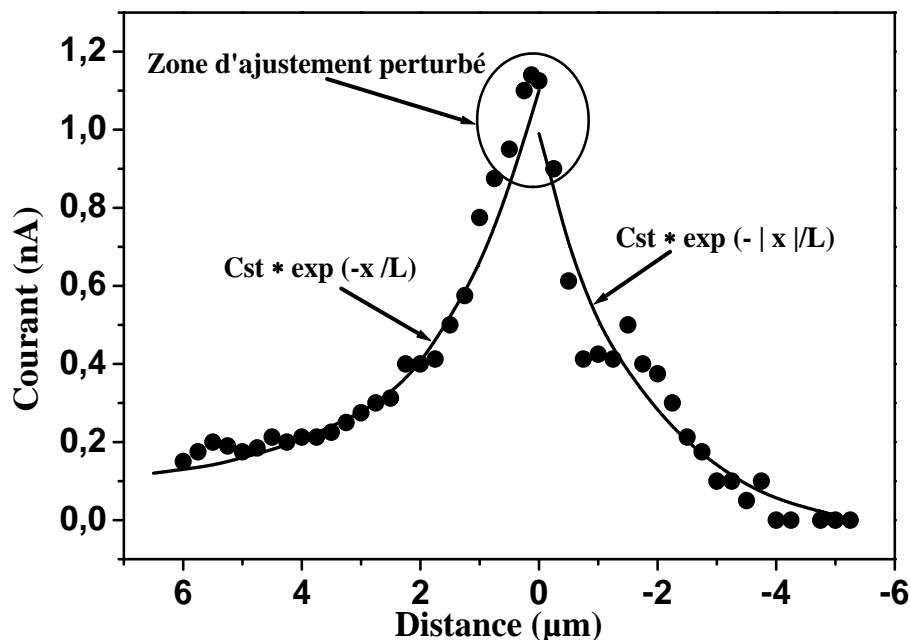
Cette même allure générale, du courant en fonction de l'énergie primaire (augmentation puis diminution après un certain seuil) à été remarquée dans le cas d'un échantillon en silicium semi-infini caractérisé par la technique EBIC classique [10], mais à des énergies primaires beaucoup plus grandes que celle du cas nanométrique.

### 3-4-L'extraction de la longueur de diffusion des minoritaires:

L'extraction de la longueur de diffusion des porteurs de charges minoritaires se fait par l'ajustement des courbes.

Le problème qui a été rencontré par d'autres études dans l'ajustement des courbes, est qu'il n'y a pas dans la littérature une formule théorique qui consiste à calculer le courant nano-EBIC (ou l'efficacité de collecte) dans le cas des nanostructures mais seulement des formules qui traitent ce courant pour des échantillons semi-infinis.

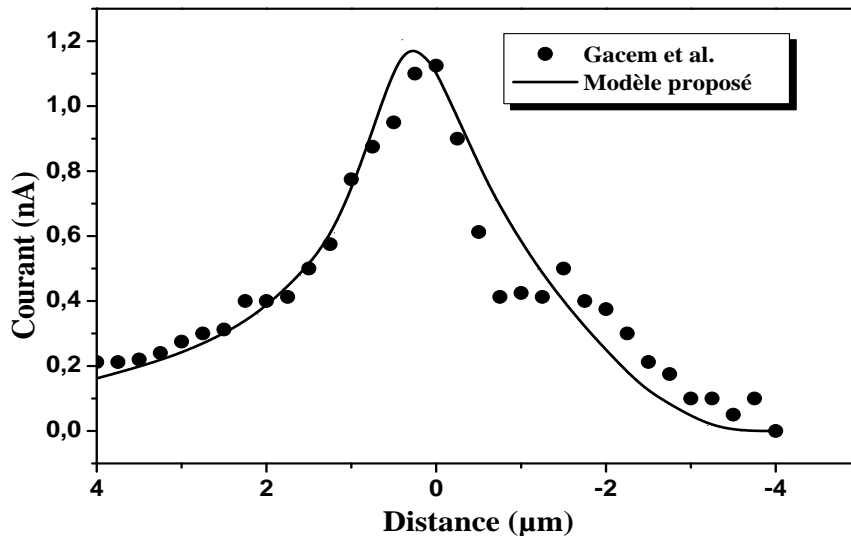
La figure (III.42) représente l'ajustement réalisé entre le résultat expérimental de Gacem et al. pour un échantillon de silicium nanostructuré et une formule décrivant le courant issu d'un échantillon semi-infini [69]:



**Figure (III.42) : Ajustement du courant nano-EBIC avec la fonction  $\exp(-x/L)$  [69] .**

Ils ont réalisé l'ajustement en deux étapes séparément, en approche et en éloignement du faisceau d'électrons de la pointe.

Par contre, et en utilisant notre modèle numérique l'ajustement se fait d'une façon très simple. La figure (III.43) représente l'ajustement entre les données expérimentales de Gacem et al. [69] et le résultat obtenu par notre modèle numérique:

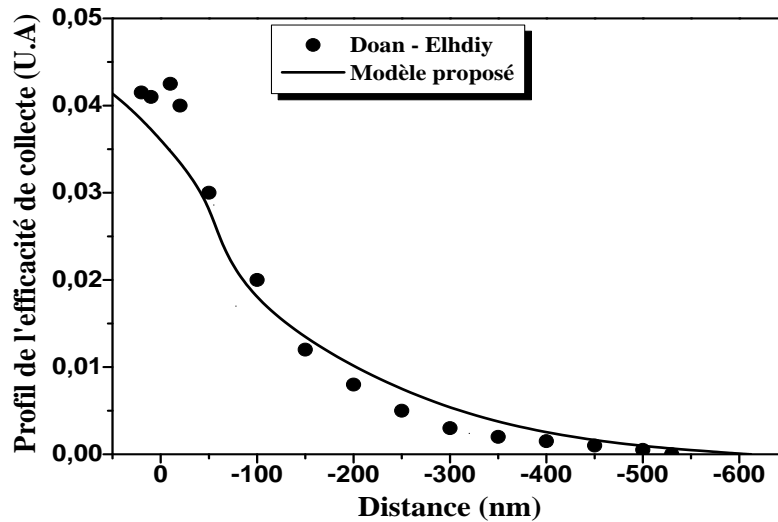


**Figure (III.43) : Ajustement du courant nano-EBIC**

$\alpha = 45^\circ$ ,  $I_0 = 1 \text{ nA}$ ,  $d = 0.5 \mu\text{m}$ ,  $r = 150 \text{ nm}$ ,  $E_0 = 5 \text{ KeV}$

Cet ajustement a été fait en faisant varier la valeur de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires. Un bon ajustement s'est réalisé pour la valeur  $L=2.16\mu\text{m}$ , alors que Gacem et al.[69] de leur part, ont trouvé la valeur  $L=2\mu\text{m}$ .

La figure (III.44) représente l'ajustement entre notre résultat de l'efficacité de collecte et celui de Doan-Elhdiy [66]:



**Figure(III.44) :** Le profil de l'efficacité de collecte ( $V_s = 0$ )  
 ( $\alpha = 60^\circ$ ,  $E_0 = 3 \text{ KeV}$ ,  $r = 10 \text{ nm}$ ,  $d = 100 \text{ nm}$ ).

Pour ce résultat, le bon ajustement s'est réalisé pour la valeur  $L=1\mu\text{m}$ , qui est la même valeur trouvée par ces auteurs.

Ces ajustements renforcent la fiabilité de notre modèle pour qu'il sera un moyen utile pour déterminer la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans les nanostructures dans le futur.

## **4-Conclusion:**

La mise en œuvre de notre modèle numérique nous a permis d'avoir un ensemble de résultats concernant les points suivants :

➤ L'étude des caractéristiques des parcours des électrons primaires au sein d'un échantillon en silicium nanostructuré a été achevée en montrant que:

- Les trajectoires sont représentées en forme 3D en déterminant les paramètres qui influencent la forme du volume de génération.
- Les émissions électroniques (transmises, rétrodiffusées, secondaires et totale) sont déterminées en montrant la fiabilité de notre modèle à cette étude pour une large gamme d'énergie en dépassant les obstacles rencontrés par d'autres études analytiques et expérimentales.
- La perte d'énergie a présenté une forme d'une gaussienne lors de son étude .

➤ Le signal nano-EBIC a gagné la plus grande part de nos résultats concernant:

- La forme du profil de distribution des paires électron-trou est une gaussienne dans le domaine des basses énergies, en montrant que les angles d'incidence importants sont privilégiés par la technique nano-EBIC.
- L'efficacité de collecte en présence d'une vitesse de recombinaison en surface nulle est plus grande que celle dans le cas d'une vitesse infinie.
- Cette efficacité s'augmente avec l'augmentation de la taille du nano-contact, de la longueur de diffusion des minoritaires et de l'angle d'incidence du faisceau électronique.
- Par contre, elle augmente avec l'augmentation de l'énergie primaire jusqu'à un certain seuil, puis elle diminue à cause de la présence des recombinaisons des paires de plus en plus en parallèle à l'augmentation de la profondeur de pénétration.
- Le courant nano-EBIC a été déterminé en se basant sur les calculs de l'efficacité de collecte en gardant la même allure qu'elle.
- L'extraction de la longueur de diffusion des minoritaires s'est réalisée par des ajustements entre nos résultats d'efficacité de collecte et du courant avec ceux d'autres chercheurs, en montrant la simplicité des nôtres par rapport à ceux utilisant des formules fiables seulement dans le cas des échantillons semi-infinis.

*Conclusion générale*

## *Conclusion générale :*

Quand on désire déterminer les caractéristiques d'un échantillon, il est nécessaire de lui appliquer une excitation extérieure. Notre travail a montré que la technique EBIC dans sa version nanométrique est la meilleure technique par excellence pour caractériser des échantillons en silicium nanostructuré.

La particularité de la nano-EBIC est qu'elle est basée sur la collecte du courant induit des porteurs de charge minoritaires en excès par une pointe conductrice d'un AFM au lieu d'une électrode standard. L'application de cette technique s'appuie sur une connaissance approfondie de l'interaction électron-matière avec ses différentes émissions électroniques ainsi qu'à la perte d'énergie.

Mettre en équation la trajectoire de l'électron primaire est impossible tant que les collisions sont très nombreuses. Il est seulement possible de donner une solution statistique de ces trajectoires en utilisant une méthode stochastique comme la méthode Monté Carlo. Cette méthode est basée sur l'utilisation de la génération des nombres aléatoires. Et comme on a choisi le langage FORTRAN pour réaliser notre simulation, on a utilisé la fonction "Ran" qui est le générateur de ces nombres dans ce langage, et qui a prouvé son efficacité.

En se basant sur ces points essentiels, on a élaboré un modèle numérique dans toutes ses étapes pour caractériser le silicium nanostructuré par la technique nano-EBIC en utilisant la méthode Monté Carlo.

Toutes les bases physiques qu'on s'est basé sur elles pour élaborer ce modèle ainsi que les étapes de calcul sont présentées avec clarté. Les organigrammes qui englobent les informations qui relient l'aspect physique de l'étude avec l'exécution du programme sont représentés pour chaque étape de calcul.

On a abouti à des résultats très acceptables qui sont :

- 1- Les trajectoires des électrons primaires sont représentées en forme 3D en étudiant tous les paramètres qu'ils les influencent.
- 2- Le parcours entier des électrons primaires est étudié (en profondeur et en largeur) en déterminant une formule qui le calcul dans le cas du silicium nanostructuré.
- 3- Les différentes émissions électroniques (transmise, rétrodiffusée, secondaire et totale) sont déterminées en détaillant leur domaine de validité et les paramètres qui les influencent.
- 4- La perte d'énergie a été traitée particulièrement pour sa grande importance d'être la cause principale de la création des paires électron-trou.
- 5- Le profil de distribution de ces paires qui vont contribuer à la création du courant nano-EBIC a été étudié. Ce profil représente une Gaussienne dans la gamme des très basses énergies.
- 6- L'efficacité de collecte (profil et maximum) a été calculée suivant plusieurs paramètres (forme de la zone de déplétion, taille du nano-contact, la longueur de diffusion des minoritaires, l'angle d'incidence du faisceau électronique et l'énergie primaire).
- 7- En se basant sur cette efficacité on a pu trouver le courant nano-EBIC.
- 8- Des confrontations entre nos résultats et ceux d'autres chercheurs ont été faites en montrant une bonne concordance.
- 9- Des ajustements ont été réalisés pour l'extraction de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires avec réussite, en renforçant l'utilité de notre modèle à la caractérisation des nanostructures.



# *Références*

## Références :

- [1] S. *Najar*, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique, France (1992).
- [2] D. *Braga*, Thèse de doctorat, Université Paris XI (2003).
- [3] D.C. *Joy*, Scanning.17,p.270 (1995).
- [4] H.E. *Bishop*, Br.J.Appl. phys.18, p.703 (1967).
- [5] K.F. *Heinrich*, "Quantitative Electron Probe Microanalysis" (1968).
- [6] F. *Arnal* , C. R.Acad.Sci.268, p.1526 (1969).
- [7] J. *Goldstein*, D.E. Newbury, "Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis", plenum press, New York, pp . 61-98 (2003).
- [8] T.E. *Everhart*, J.Appl.Phys.31, p.183 (1960).
- [9] C.D. *Archard* , J. Appl. Phys.53, p.4 (1982).
- [10] Z. *Elateche*, Thèse de magistère, Université de Batna (2005).
- [11] M. *Hadef*, Thèse de magistère, Université de Constantine (1999).
- [12] Y. *Beggah*, Thèse de Magister, Université de Constantine (1992).
- [13] K. *Kanaya*, S. Okayama, J.Appl.Phys.5, p.43 (1972).
- [14] E.J. *Sternglass*, Phys. Rev.95, p.345 (1954).
- [15] H.J. *Fitting*, H. Glafek and W. Wild, Phys. Stat. Sol.43 (1977).
- [16] T. E. *Everhart*, P.H. Hoff, J.Appl. Phys.42, p.37 (1971).
- [17] E. *Napchan*, J.Appl.Phys.6, (1989).
- [18] D.F. *Kyser*, Proc. the 6<sup>th</sup> Int. Conf. X Rays optics and microanalysis, Osaka-Univ. Tokyo, p.147 (1972).
- [19] C.J. *Wu* , D.B. Wittry, J.Appl. Phys.49, p.227 (1978).
- [20] N. *Tabet*, C. Monty and Y. Marfaing, J.Appl. Phys.24, p.187 (1989).
- [21] D.J. *Mekki*, R.J. Tarento and N. Tabet, Phys. Stat. Sol.130, p.383 (1992).
- [22] H.*Bethe*, "Eur Theorie Des Durchganges schneller Kurpuskulerstrahlen durch Material", Annalen Phys (Leipzig). 5, p.325 (1930).
- [23] K. *Feldman*,J.Appl. Phys.117, p.455 (1960).
- [24] F. *Battistella*, Thèse de doctorat, Université de Toulouse (1985).
- [25] B.G. *Yacobi* , D.B. Holt, J.Appl. Phys. 59, P.4 (1986).
- [26] P.M. *Petroff*, " Microscopie électronique en science des matériaux ",CNRS. Paris (1983).
- [27] H.J. *Leamy* , L.C Kimerling, J.Appl. Phys.795, P.48 (1977).

- [28] C. *Donolato*, Appl. Phys.Lett.34, P.80 (1979).
- [29] A. *Boudjani*, Semiconductor science and technology. 20, P.175 (2005).
- [30] K. *Smaali*, M. Troyon, Nanotechnology. 09, P.19 (2008).
- [31] M. *Troyon*, K. Smaali, J.Appl. Phys.110, P.90 (2007).
- [32] H. *Paqueton* , J.Ruste, "Microscopie électronique à balayage principe et équipement", Technique de l'ingenieur (2006).
- [33] V.K.S. *Ong* , D.Wu, Elect.Stat.Sol. 44, P.585 (2000).
- [34] M.J.*Romero* , D. Araujo, Materials Science and Engineering .44,P.57 (1997).
- [35] W.*Dethau*, K.Vincent and S.Ong, IEEE Transactions On Electron Devices.49,P.455 (2002).
- [36] A.*Boudjani*, G. Bassou and T. Benbakhti, Elect.Stat.Sol.38, P.41 (1995).
- [37] A. *Boudjani*, B. Sieber, Materials Science and Engineering .42,P.192 (1996).
- [38] M. *Gaeveski*, M. Elfving, J. Appl. Phys. 91, P.173 (2002).
- [39] M.*Troyon*, D. Pastre and J.P. Jouart, Ultramicroscopy.75, P.15 (1998).
- [40] D. *Pastre*, M. Troyon, J. Appl. Phys.4326, P. 86 (1999).
- [41] D. *Pastre*, J.L. Bubendorff, J.Vac.Sci.Technol.1138,P.18 (2000).
- [42] O. *Demichel*, Thèse de doctorat, Université de Grenoble (2010).
- [43] F.*Lévy*, "Physique et technologie des semiconducteurs", presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1995).
- [44] M. *Gerl*, J.P.Issi, "Physique des matériaux ", presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1997).
- [45] S.M. *Sze*, "semiconductor Device Development", IEEE Tech.Int. Electron Device Meet, Washington (1980).
- [46] G. *Burino*, B.Tuffin, "Simulations et méthodes de Monte Carlo", Technique de l'ingénieur (2007).
- [47] K. *Meynard*, Thèse de doctorat, Université Toulouse III (2009).
- [48] S. *Meleard*, "Probabilités- Présentation", Technique de l'ingénieur (2001).
- [49] B. *Lapeyre*, E. Pardoux and R. Sentis. " Méthodes de Monté Carlo pour les équations de transport et de diffusion ", Springer, Berlin (1998).
- [50] J. *Bordes*, Thèse de doctorat, Université de Toulouse (2017).
- [51] J. *Pierron*, C, Inguibert, Radeces. hal-01442097, Germany (2016).
- [52] F. *Salvat* , "PENELOPE-2014.A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport", Workshop, Spain (2015).
- [53] " Microsoft Fortran Power Station 4.0, Fortran 90 for Scientists and Engineers", (2003).

- [54] D. E. *Newbury*, D. C. Joy and P. Echlin, "Advanced Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis" Plenum Press, New York (1986).
- [55] E. *Bauer*, J. Vac. Sci. Tech. 7, P.3(1970).
- [56] S. *Tanuma*, C.J. Powell and D.R. Penn, Surf. Interf. Anal. 20, P.77 (1993).
- [57] I. *Adesida*, R. Shimizu and T.E. Everhart, J. Appl. Phys. 51, P.596 (1980).
- [58] K-Y. *Lee*, Guang-Sup Cho and Duck-In Choi, J. Appl. Phys. 67, P.56 (1990).
- [59] R. *Shimizu*, K. Murata, J. Appl. Phys. 42, P.387 (1971).
- [60] M. J. *Berger*, S. M. Selzer, National Research Council publication, Washington. 1133, P.205(1964).
- [61] C. *Zeller*, J. C. R. Coulon, Sean. Acad. Sci. 295, P.431 (1972).
- [62] D. C. *Joy*, S. Lou, Scanning. 11, P.176 (1989).
- [63] D. *Dapor*, Thèse de doctorat, Université de Trento (2013).
- [64] D. C. *Joy*, Scanning. Microsc. 5, P.329 (1991).
- [65] M. *Ledra*, Thèse de Doctorat, Université de Constantine (2006).
- [66] Q.T. *Doan*, Thèse de doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne (2011).
- [67] C. *Donolato*, Elec. Stat. Sol. 28, PP.1143-1151 (1985).
- [68] E.B. *Yakimov*, S.S. Borisov and S.I. Zaitsev, Semicond. 41, P.411(2007).
- [69] K. *Gacem*, Thèse de doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne (2008).
- [70] F. *Charlot*, P. Jonnard, "Microscopie électronique à balayage et microanalyses", Ecole d'été de Saint Martin d'hères (2006).
- [71] A. *Potts*, J. Appl. Phys. 5, pp.36-39 (1987).
- [72] H.J. *Fitting*, Phys. Stat. Sol. 26, P.525 (1974).
- [73] C.M. *Chang*, E.S. Cook and H. Primakoff, Phys. Rev. 90, P.544 (1953).
- [74] H.P. *Hanson*, L. Lyman, and W.T. Scott, Phys. Rev. 84, P.84 (1951).
- [75] V.E. *Cosslett*, R.N. Thomas, J. Appl. Phys. 15, P.283 (1964).
- [76] C. *Zeller*, J. Ruste, Phys. Rev. 4, P.441 (1975).
- [77] K. F. J. *Heinrich*, Proc. 4<sup>th</sup> Int. Conf. X-ray, Optics and microanalysis X, R. Castaing, J. Philbert eds, Hermann, Paris, P.159 (1966).
- [78] H. *Drescher*, L. Reimer and H. Seidel, J. Appl. Phys. 331, P.6 (1970).
- [79] L. *Reimer*, C. Tolcamp. Scanning, P.35 (1980).
- [80] E.S.M. *Ali*, D.W.O. Rogers, phys. med. Biol. 53, PP.1527-1543 (2008).
- [81] D. *Joy*, Journal of Microscopy. 147, pp.51-64 (1987).
- [82] H. *Gumus*, Radiation physics and chemistry. 72, PP.7-12 (2005).
- [83] H. *Bruining*, Physica. 3, P. 46 (1936).

- [84] H. *Seiler*, J. Appl. Phys.54, R1, (1983).
- [85] T. *Azli*, Thèse de Magister, Université de Setif (2010).
- [86] R. Hull, "Properties of crystalline silicon". Edit. INSPEC, The Institution of Electrical Engineers.20, London (1999).
- [87] Q.T. Doan, A. El Hdiy and M. Troyon, J. Appl. Phys.10, P.515 (2011).
- [88] Q.T. Doan, A. El Hdiy, J. Appl. Phys.04, P.111 (2015).
- [89] M. *Ledra*, Courrier du savoir. N°7, pp.55-57 (2006).

*Perspectives*

## Perspectives :

Le travail présenté dans cette thèse apporte quelques réponses explicatives aux questions liées à l'application de la technique EBIC au silicium nanostructuré pour déterminer quelques paramètres très importants qui sont difficiles ou même impossibles d'être déterminés autrement .

①- L'élément majeur que nous ciblons dans le futur est l'élaboration d'un code, qui va être un outil très utile pour le traçage des trajectoires des électrons, le calcul de la profondeur de pénétration, l'énergie déposée....etc., ainsi que la détermination de quelques paramètres qui caractérisent des échantillons nanostructurés. Ce code sera applicable pour plusieurs éléments et plusieurs structures.

②- Sachant que notre simulation est faite sur quelques hypothèses simplificatrices. Donc, le travail qu'on a effectué nous a également mené à nous interroger sur un certain nombre de points qu'il ne nous a pas été possible de traiter à cette thèse, et qu'ils nous semblent intéressants à explorer de façon à approfondir nos connaissances :

a- Le cas où il y aura une recombinaison en volume (présence de défauts), car dans ce cas seulement une partie des charges créées seront collectées, ce qui va influencer l'intensité du courant. Malgré que ce cas était étudié par d'autres chercheurs, mais seulement par la technique EBIC classique, sa sera vraiment intéressant de le faire par la nano-EBIC appliqué par notre modèle revisité dans le futur.

b- Le transfert de chaleur qui accompagnera le bombardement électronique a été négligé par notre étude, une amélioration du modèle en prenant ce point en compte sera très utile.

c- Elargir le domaine d'application de notre modèle pour d'autres sources d'excitations extérieures comme les neutrons, les ions ( $H^+$ ...) et les photons (dans ce dernier cas la technique sera LBIC qui est l'acronyme du Light beam Induced current au lieu de EBIC).

e- Application de la partie de l'interaction électron-matière de notre modèle a des isolants (étudier le phénomène de piégeage de charge).

f- Travailler sur la même problématique en utilisant la méthode ab-initio et comparer les résultats obtenus par les deux méthodes.

*Annexes*



# Annexes:

## Annexe I :

### 1- Expérience de Buffon:

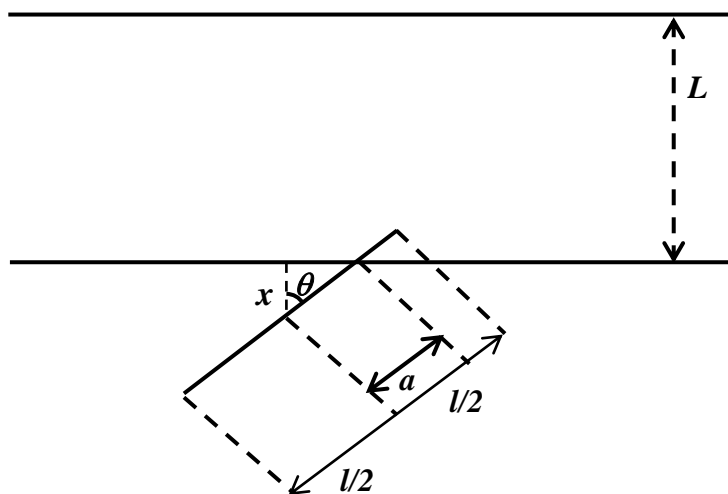
" $\pi$ " est une constante universelle qui intervient dans tous les domaines. En 1777, Buffon élabore une méthode pour trouver la valeur de  $\pi$  en se basant sur la probabilité qu'une aiguille peut couper les lignes d'une grille quadrillée lorsqu'elle est lancée sur cette dernière.

Buffon considère un plan (OXY) hachuré de droites parallèles à l'axe (OX) distante d'une longueur " $L$ ". Il a jeté une aiguille sur le plan puis, il a comptabilisé le nombre de fois où l'aiguille est tombée sur l'une des droites.

Le nombre " $\pi$ " se trouve dans la probabilité que l'aiguille coupe l'une des parallèles. Le fait que la longueur de l'aiguille est inférieure par rapport à la distance entre deux droites, donc elle ne peut couper les droites qu'une seule fois.

- Soit " $l$ " la longueur de l'aiguille.

Si " $x$ " est la plus courte des distances entre le centre de l'aiguille et l'une des droites alors:



*Figure 1: Représentation de l'expérience de Buffon*

Dans le cas où l'aiguille tombe sur une ligne on aura :

$$\cos\theta = \frac{x}{a} \Rightarrow x = a \cdot \cos\theta \dots\dots\dots(1)$$

Le fait que :  $a \leq l \Rightarrow a \cdot \cos\theta \leq l \cdot \cos\theta$  ( puisque  $x$  est une valeur positive ) .

Donc (d'après (1)) :  $a \leq l \Rightarrow x \leq l \cdot \cos\theta$

L'événement  $E =$  " l'aiguille coupe l'une des parallèles " est vérifié lorsque:  $x \leq l \cdot \cos\theta$

Si on considère que  $n(E)$  est le nombre de fois où l'aiguille coupe l'une des parallèles, donc la probabilité  $P(E)$  peut être exprimée par :

$$P(E) = n(E) / n$$

$n$ : le nombre total des lancers.

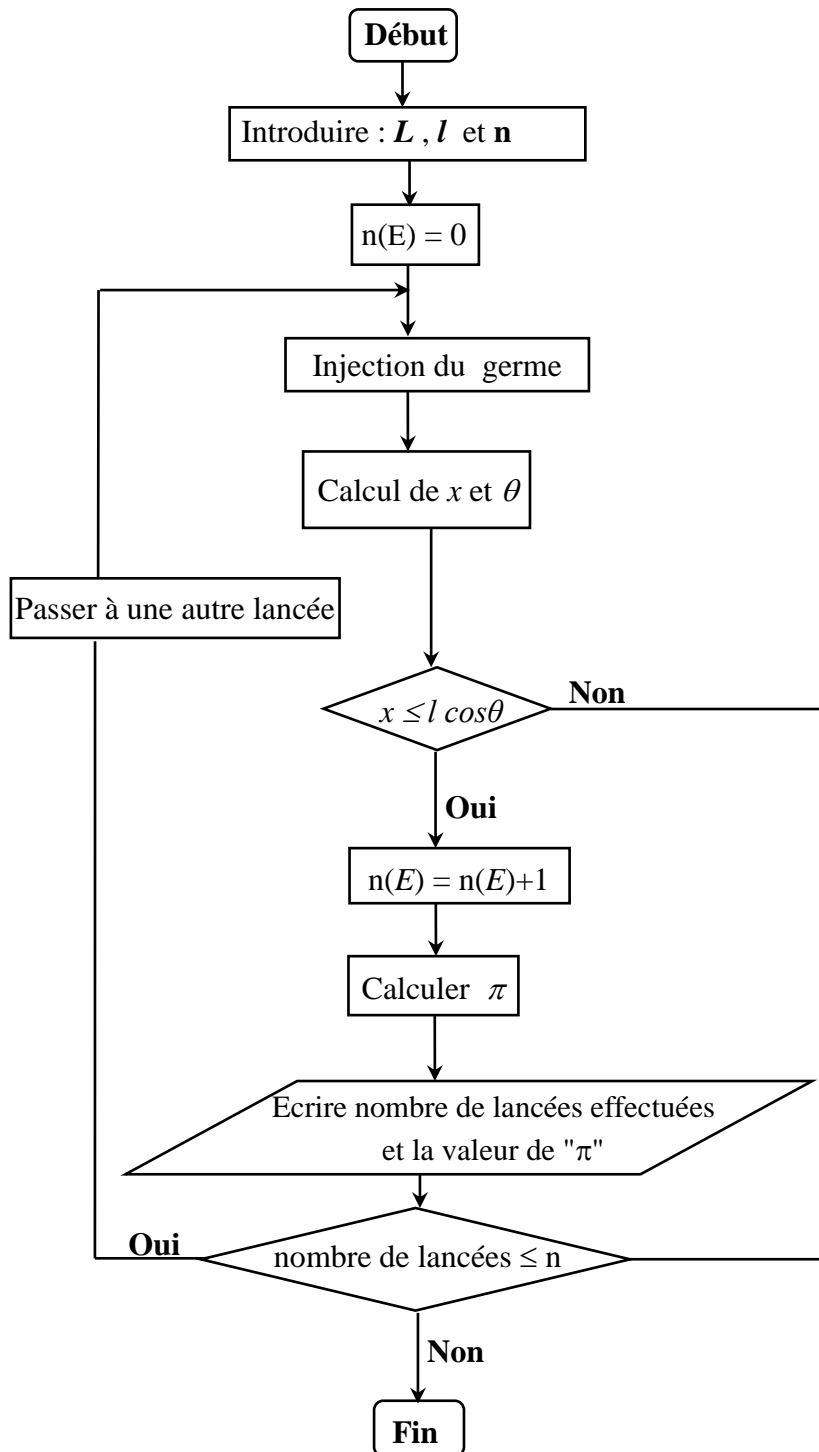
La valeur de  $\pi$  peut être déduite de la formule approximative:

$$\pi = \frac{2l}{L} \frac{n}{n(E)}$$

## 2- Notre Organigramme:

De notre part, et d'une façon purement numérique on a écrit un programme en se basant sur l'idée de Buffon pour calculer  $\pi$ .

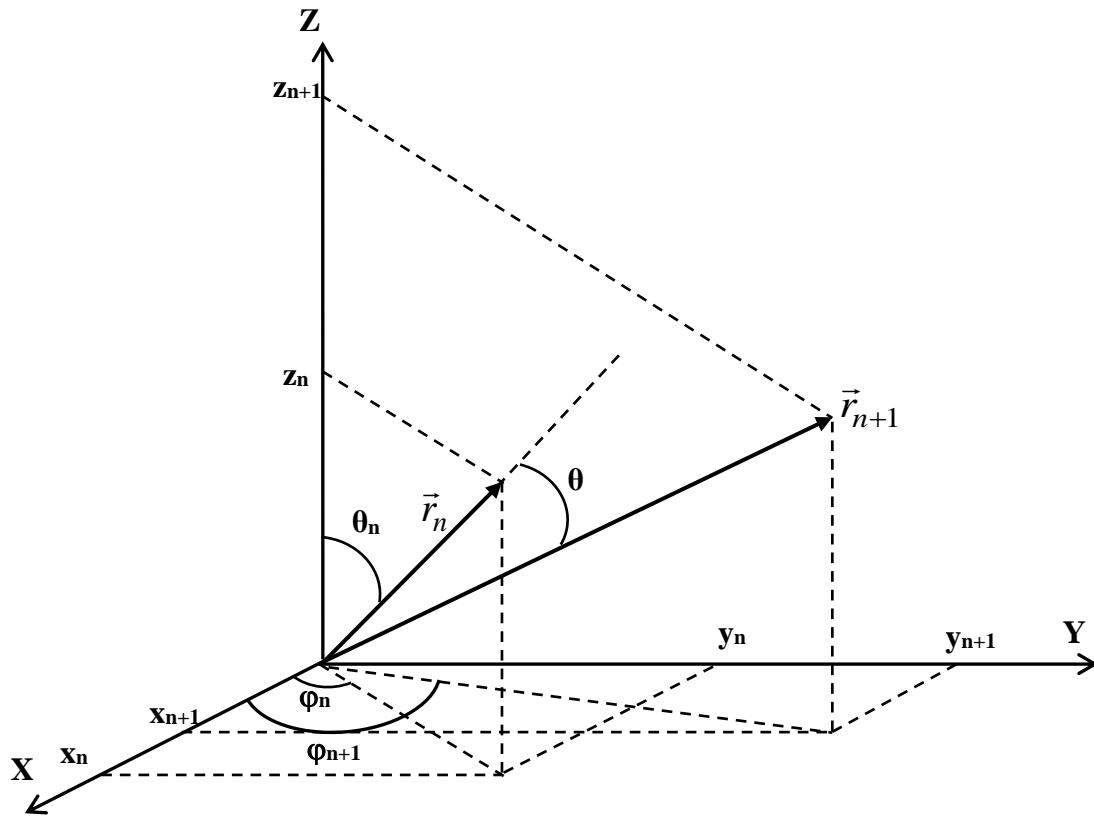
Dans la figure suivante on représente l'organigramme de ce programme :



*Figure 2: Notre organigramme du programme de l'expérience de Buffon*

## Annexe II :

### 1- La relation entre $\varphi_{n+1}$ et $\theta_{n+1}, \theta_n, \theta$ :



*Figure 3: Représentation des angles déterminants  $\theta, \varphi, \theta_n, \varphi_n, \theta_{n+1}$  et  $\varphi_{n+1}$*

À partir de la (Figure.3) :

$$\begin{cases} x_n = r_n \cdot \sin\theta_n \cdot \cos\varphi_n \\ y_n = r_n \cdot \sin\theta_n \cdot \sin\varphi_n \\ z_n = r_n \cdot \cos\theta_n \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} x_{n+1} = r_{n+1} \cdot \sin\theta_{n+1} \cdot \cos\varphi_{n+1} \\ y_{n+1} = r_{n+1} \cdot \sin\theta_{n+1} \cdot \sin\varphi_{n+1} \\ z_{n+1} = r_{n+1} \cdot \cos\theta_{n+1} \end{cases}$$

Donc on aura :  $\vec{r}_n = r_n (\sin \theta_n \cos \varphi_n \vec{i} + \sin \theta_n \sin \varphi_n \vec{j} + \cos \theta_n \vec{k})$

$$\vec{r}_{n+1} = r_{n+1} (\sin \theta_{n+1} \cos \varphi_{n+1} \vec{i} + \sin \theta_{n+1} \sin \varphi_{n+1} \vec{j} + \cos \theta_{n+1} \vec{k})$$

par produit scalaire :

$$\vec{r}_n \cdot \vec{r}_{n+1} = r_n \cdot r_{n+1} [\cos \theta_n \cdot \cos \theta_{n+1} + \sin \theta_n \cdot \sin \theta_{n+1} (\cos \varphi_n \cdot \cos \varphi_{n+1} + \sin \varphi_n \cdot \sin \varphi_{n+1})]$$

$$\vec{r}_n \cdot \vec{r}_{n+1} = r_n \cdot r_{n+1} [\cos \theta_n \cdot \cos \theta_{n+1} + \sin \theta_n \cdot \sin \theta_{n+1} \cos (\varphi_{n+1} - \varphi_n)]$$

D'autres part et en utilisant les propriétés du produit scalaire aussi :

$$\vec{r}_n \cdot \vec{r}_{n+1} = r_n \cdot r_{n+1} \cos \theta$$

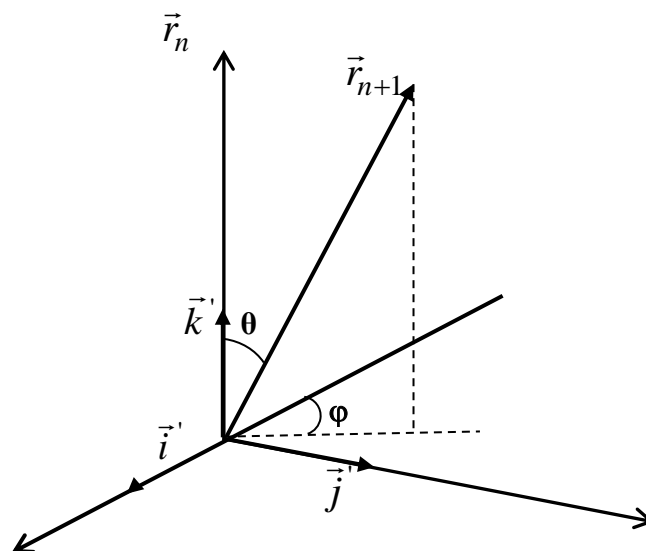
Donc :  $\cos \theta = \cos \theta_n \cdot \cos \theta_{n+1} + \sin \theta_n \cdot \sin \theta_{n+1} \cos (\varphi_{n+1} - \varphi_n)$

$$\cos (\varphi_{n+1} - \varphi_n) = (\cos \theta - \cos \theta_n \cdot \cos \theta_{n+1}) / \sin \theta_n \cdot \sin \theta_{n+1}$$

## 2- La relation entre $\theta_{n+1}$ et $\theta_n$ , $\theta$ , $\varphi$ :

- Pour trouver la relations qui donne  $\theta_{n+1}$  d'un coté et  $\theta$ ,  $\theta_n$  et  $\varphi$  d'un autre coté, on va

choisir un autre repère  $(\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}')$  (Figure.4) de tel sort que:



**Figure 4: Représentation de  $\vec{r}_{n+1}$  au nouveau repère  $(\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}')$**

$$1- \vec{k}' = (\vec{r}_n / r_n) = (\sin \theta_n \cos \varphi_n \vec{i} + \sin \theta_n \sin \varphi_n \vec{j} + \cos \theta_n \vec{k})$$

$$2- \vec{j}' = (\vec{r}_n \wedge \vec{k}') / \|\vec{r}_n \wedge \vec{k}'\| = \sin \varphi_n \vec{i} - \cos \varphi_n \vec{j}$$

$$3- \vec{i}' = (\vec{j}' \wedge \vec{k}') = -\cos \varphi_n \cos \theta_n \vec{i} - \cos \theta_n \sin \varphi_n \vec{j} + \sin \theta_n \vec{k}$$

A partir de la (Figure.4) on trouve que :

$$\vec{r}_{n+1} = r_{n+1} (-\sin \theta \cos \varphi \vec{i}' + \sin \theta \sin \varphi \vec{j}' + \cos \theta \vec{k}')$$

$$\begin{aligned} \text{Donc : } \vec{r}_{n+1} = r_{n+1} [ & (\sin \theta \cos \varphi \cos \varphi_n \cos \theta_n + \sin \theta \sin \varphi \sin \varphi_n + \cos \theta \sin \theta_n \cos \varphi_n) \vec{i} + \\ & (\sin \theta \cos \varphi \cos \theta_n \sin \varphi_n - \sin \theta \sin \varphi \cos \varphi_n + \cos \theta \sin \theta_n \sin \varphi_n) \vec{j} + \\ & (\cos \theta \cos \theta_n - \sin \theta \cos \varphi \sin \theta_n) \vec{k} ] \dots \dots \dots (3) \end{aligned}$$

Et comme on déjà vu :

$$\vec{r}_{n+1} = r_{n+1} (\sin \theta_{n+1} \cos \varphi_{n+1} \vec{i}' + \sin \theta_{n+1} \sin \varphi_{n+1} \vec{j}' + \cos \theta_{n+1} \vec{k}') \dots \dots \dots (4)$$

A partir des deux équations (3) et (4) on trouve que:

$$\cos \theta_{n+1} = \cos \theta \cos \theta_n - \sin \theta \cos \varphi \sin \theta_n$$

## Annexe III:

### 1- Le changement de repère :

Le changement de repère à partir de celui du point d'impact du faisceau primaire vers celui du centre du nano-contact se fait en prenant en compte la distance "d".

$$\text{On aura : } \begin{cases} x_c = x_p + x \\ y_c = y_p + d \\ z_c = z_p \end{cases}$$

sachant que :

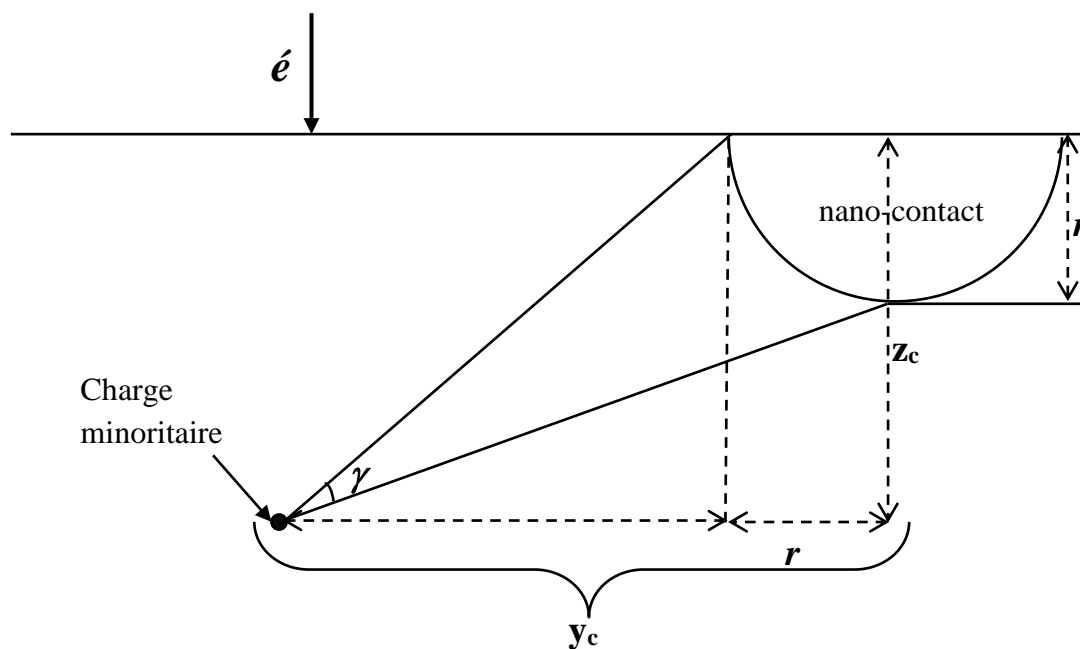
- $x_c$  ,  $y_c$  et  $z_c$  sont les coordonnées de la charge minoritaire en excès par rapport au repère du centre du nano-contact.
- $x_p$  ,  $y_p$  et  $z_p$  sont les coordonnées de la charge minoritaire en excès par rapport au repère du point d'impact du faisceau électronique données par les équations ((II.27),(II.28) et (II.29)).
- $x$  la distance du déplacement du faisceau électronique par rapport au centre du nano-contact sur la ligne balayée.

### 2- Destination des charges minoritaires:

La destination de la charge minoritaire en excès est gouvernée par les deux angles  $\gamma$  et  $\beta$ .

Pour déterminer les intervalles limitant les valeurs de ces deux angles pour que la charge se dirige vers le nano-contact, et par simplification, on va considérer le cas où  $x_c = 0$  .

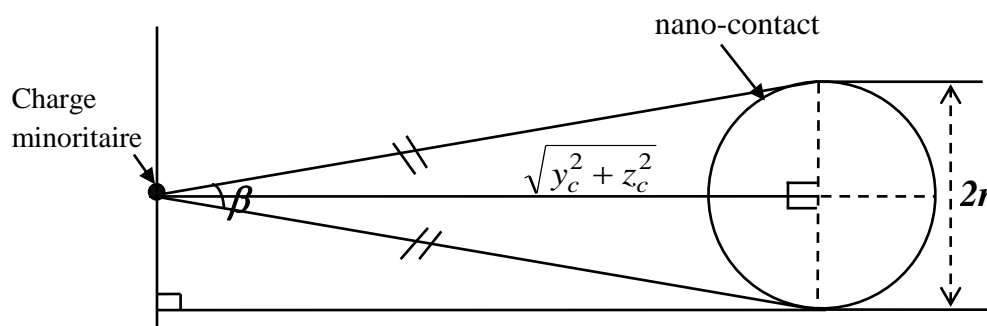
En effet, ce cas représente le cas où ces intervalles atteindront leurs plus grandes valeurs (la plus grande probabilité de collecte) (figure.5, figure.6) et tous les autres probabilités appartiendront à ces intervalles.



**Figure 5: Illustration verticale de la probabilité de collecte d'une charge minoritaire par un nano-contact dans le cas de  $x_c = 0$**

A partir de la (figure.5) on trouve, pour que la charge minoritaire se dirige vers le nano-contact :

$$\left( \frac{z_c - r}{y_c} \right) \leq \tan \gamma \leq \left( \frac{z_c}{y_c - r} \right) \Rightarrow \text{Arctan} \left( \frac{z_c - r}{y_c} \right) \leq \gamma \leq \text{Arctan} \left( \frac{z_c}{y_c - r} \right)$$



**Figure 6: Illustration horizontale de la probabilité de collecte d'une charge minoritaire par un nano-contact dans le cas de  $x_c = 0$**



A partir de la (figure.6) on trouve, pour que la charge se dirige vers le nano-contact :

$$\text{Arctan}\left(\frac{\sqrt{y_c^2 + z_c^2}}{r}\right) \leq \beta \leq \pi - \text{Arctan}\left(\frac{\sqrt{y_c^2 + z_c^2}}{r}\right)$$

## Résumé

Dans ce travail, on a étudié l'application de la technique EBIC aux nanostructures du silicium en élaborant un modèle numérique pour l'interaction électron-matière et le courant collecté en utilisant la méthode Monte Carlo.

La procédure de calcul utilisée dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons, les différentes émissions électroniques (transmises, rétrodiffusées et secondaires), l'efficacité de collecte, le courant collecté par la pointe conductrice et l'influence de plusieurs paramètres .

Nos résultats, sont comparés aux ceux disponibles dans la littérature et ils sont en bon accord. Cette comparaison a permis de déduire la valeur de certains paramètres physiques caractérisant l'échantillon considéré. Ce point nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique élaboré, il est fiable pour la description des nanostructures de silicium par la technique EBIC.

**Mots clés** : EBIC, simulation Monte Carlo, nanostructures, silicium, courant collecté.

---

---

### ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة تقنية التيار المحرض من طرف الحزمة الالكترونية المصطدمة بتطبيقها على عينات نونية للسليكون بإنجاز نموذج حسابي لأجل محاكاة الاصطدام إلكترون - مادة و التيار المحصل باستعمال طريقة مونتني كارلو . طريقة الحساب المستعملة في هذه النمذجة تأخذ بعين الاعتبار السير العشوائي للالكترونات، مختلف الارسلالات الالكترونية (الخارجة، العائدة و الثانوية)، مردودية التحصيل و التيار المحصل بالنقطة الناقلة و كذلك تأثير بعض المعاملات. مقارنة النتائج المتحصل عليها مع النتائج المتواجدة في المراجع أظهرت توافقا جيدا. هذه المقارنة سمحت لنا باستنتاج قيم بعض المعاملات الفيزيائية المميزة لعينة السليكون المعتبرة. هذه النقطة سمحت لنا باستخلاص أنه رغم بساطة النموذج الحسابي المستعمل إلا أنه صالح لوصف عينات ذات أبعاد نونية للسليكون باستعمال تقنية التيار المحرض من طرف الحزمة الالكترونية المصطدمة

**كلمات مفتاحية:** التيار المحرض من طرف الحزمة الالكترونية المصطدمة ، محاكاة مونتني كارلو ، أبعاد نونية، سليكون ، التيار المحصل.

---

---

### Abstract

In this work, we studied the EBIC technique applied on silicon nanostructures by elaboration of a numerical model to simulate the interaction electron-matter using the Monte Carlo method.

The procedure of calculation used in this modelling takes into count the random walk of the electrons, different electronics emissions (transmitted, backscattered and secondary), collection efficiency and the current collected by a conductor point and the influence of different parameters.

Our results, are compared with those available in the literature, and they are in concord. This comparison made it possible to deduce some physical parameters value characterizing the sample considered. This point enabled us to note that in spite of the simplicity of the elaborate numerical model, it is reliable for the description of the silicon's nanostructures by EBIC technique.

**Keywords:** EBIC, Monte Carlo simulation, nanostructures, silicon, collected current.