

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Abderrahmane Mira de Béjaïa

Faculté des Sciences Exactes

Département de Physique



Mémoire présenté pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option : Physique des matériaux

Par

M<sup>r</sup>. TAHRAT Youva

### THÈME

Modélisation du signal EBIC d'une jonction nanofil pn,  
Effet de la fonction de génération

Soutenue le 12/10/2021 devant le jury composé de :

Mr. F. KESSI	M.C.A	Université A. Mira de Béjaïa	Président
Mr. A. LAHRECHE	M.C.B	Université A. Mira de Béjaïa	Encadrant
Mr. Y. TARIKET	M.C.B	Université A. Mira de Béjaïa	Examineur

Année Universitaire : 2020/2021

# REMERCIEMENT

Je tiens à remercier en premier lieu Dieu tout puissant pour m'avoir donné la volonté et le courage afin de réaliser ce modeste travail.

Je tiens à remercier profondément ma chère mère et mon cher père de m'avoir apporté leurs soutiens en dehors et durant tout mon parcours d'étude et d'avoir été présent à tout moment.

Je tiens à exprimer toutes mes reconnaissances et toute ma gratitude à l'administration, et à l'ensemble de tous les enseignants de physique de l'Université de Bejaia pour leurs efforts et leur entière disponibilité, dans le but de nous transmettre leur savoir et leurs connaissances.

J'exprime particulièrement ma profonde gratitude à mon encadrant Monsieur LAHRACHE Abderrezak de m'avoir proposé ce sujet, accompagné d'une documentation inestimable, son aide très précieuse, ses conseils et sa disponibilité ainsi que son orientation tout au long de la réalisation de ce travail.

Je remercie Monsieur KESSI Ferhat Pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

Mes remerciements vont également à Monsieur TARIKET Yacine Pour avoir accepté de lire ce travail et de le juger.

Je ne peux omettre de remercier infiniment Tinhinane MEZIANI de m'avoir apporté son aide et son savoir et le mettre à ma disposition tout au long de mon parcours d'étude.

## DÉDICACES

**J**e dédie ce modeste travail à mes très chers parents,

A mon cher frère Anis,

A ma chère sœur Ania,

A ma chère tina

Sans oublier mes amis,

A tous mes Enseignants.

# TABLE DES MATIERES

---

<i>LISTE DES FIGURES</i>	<b>i</b>
<i>LISTE DES TABLEAUX</i>	<b>iv</b>
<i>Résumé</i>	<b>v</b>

<i>INTRODUCTION GENERALE.....</i>	<b>1</b>
-----------------------------------	----------

## *Chapitre 1. Interaction électron matière*

<b>1.1 Introduction .....</b>	<b>3</b>
<b>1.2 Mécanismes physiques de l'interaction électron-matière .....</b>	<b>3</b>
1.2.1 Diffusion élastique .....	4
1.2.2 Diffusion inélastique .....	4
<b>1.3 Loi de dissipation de l'énergie .....</b>	<b>5</b>
<b>1.4 Parcours électronique.....</b>	<b>7</b>
<b>1.5 Energie de formation des paires.....</b>	<b>9</b>
<b>1.6 Génération de paires électron-trou .....</b>	<b>10</b>
<b>1.7 Fonction de génération.....</b>	<b>11</b>
<b>Références.....</b>	<b>16</b>

## *Chapitre 2. Technique EBIC et méthode Monte Carlo*

<b>2.1 Introduction .....</b>	<b>18</b>
<b>2.2 Technique EBIC .....</b>	<b>18</b>
2.2.1 Principe .....	18
2.2.2 Les différentes géométries de la technique EBIC .....	19
2.2.2.1 Excitation parallèle .....	20
2.2.2.2 Excitation en biseau.....	21
2.2.2.3 Excitation perpendiculaire .....	21
2.2.3 Applications de la technique EBIC.....	21
2.2.4 Détermination de la longueur de diffusion .....	22
2.2.4.1 Principe de la mesure.....	22
2.2.4.1.1 Cas de la jonction parallèle au faisceau électronique.....	22

2.2.4.1.2 Cas de la jonction perpendiculaire au faisceau électronique .....	23
2.2.5 Contraste EBIC .....	23
<b>2.3 Méthode Monte Carlo .....</b>	<b>24</b>
2.3.1 Principe .....	24
2.3.2 Code CASINO .....	25
2.3.3 Mode d'emploi V3.3.0.4.....	25
<b>Références.....</b>	<b>29</b>

### *Chapitre 3. Modélisation, simulation et résultats*

<b>3.1 Introduction .....</b>	<b>31</b>
<b>3.2 Détermination du parcours électronique et de la fonction de génération de paires électron-trou.....</b>	<b>32</b>
3.2.1 Parcours électronique.....	32
3.2.2 Fonction de génération de paires électrons-trou .....	38
<b>3.3 Modélisation du signal EBIC.....</b>	<b>46</b>
3.3.1 Model .....	46
3.3.2 Effet du parcours électronique sur le signal EBIC.....	51
3.3.3 Effet de la fonction de génération .....	52
3.3.4 Vérification du modèle .....	53
<b>Références.....</b>	<b>55</b>
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>58</b>

### **Annexe**

# LISTE DES FIGURES

<b>Figure 1.1 :</b> Schéma représentatif des interactions élastiques et inélastiques [1].....	4
<b>Figure 1.2 :</b> Différents Mécanismes de dissipation des électrons incidents [1].....	5
<b>Figure 1.3 :</b> Variation de $\Phi(u)$ en fonction du parcours $u$ pour une cible de germanium selon les trois modèles : 1-Kanaya et Okayama[5], 2- Everhart et Hoff[6], 3- Kyser [9].....	7
<b>Figure 1.4 :</b> Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie de bombardement dans le GaAs. $R_K$ parcours proposé par Keyser, $R_{EH}$ parcours proposé par Everhart et Hoff et $R_{KO}$ parcours proposé par Kanaya et Okayama.....	9
<b>Figure 1.5 :</b> Variation de l'énergie de création de paires électrons-trou en fonction du gap pour différents semiconducteurs et différentes sources d'énergies (d'après Klein [12]).....	10
<b>Figure 1.6 :</b> Schémas illustratifs du processus de création de paires électrons-trou [18].....	11
<b>Figure 1.7 :</b> Variation de la fonction de génération $g(z)$ en fonction de la profondeur $z$ à une énergie $E_0=30$ keV dans le germanium selon les trois modèles : 1-Kanaya et Okayama [5], 2- Everhart et Hoff [6], 3- Kyser [9].....	13
<b>Figure 1.8 :</b> Trajectoire des électrons primaires dans le volume du semiconducteur (Si et GaAs) pour $E_0= 10$ keV et $E_0= 30$ keV[18] .....	15
<b>Figure 2.1 :</b> Schéma illustrant la génération et la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semiconducteur [27].....	19
<b>Figure 2.2 :</b> Schéma illustrant les différentes géométries utilisées dans la technique EBIC : jonction p-n parallèle au faisceau incident $I_p(a)$ , jonction p-n perpendiculaire au faisceau incident(b), faisceau parallèle à une diode Schottky(c) et faisceau perpendiculaire à une diode Schottky(d)[6].....	20
<b>Figure 2.3 :</b> Mode EBIC avec coupe en biseau sur une jonction p-n[7]. .....	21
<b>Figure 2.4 :</b> Montage de mesure de $L_{eff}$ dans le cas d'une jonction Schottky parallèle au faisceau électronique [21] .....	22

<b>Figure 2.5 :</b> Montage de mesure de $L_{\text{eff}}$ dans le cas d'une jonction Schottky perpendiculaire au faisceau électronique [21].....	<b>23</b>
<b>Figure 2.6 :</b> Schéma illustratif d'un contraste EBIC d'un défaut défini à partir du profil du courant EBIC. $I_0$ et le courant EBIC en absence de défaut localisé. $I_d$ le courant EBIC mesuré en présence du défaut. $(I_0 - I_d)$ représente la perte de courant EBIC due au défaut. La résolution $W$ est définie comme la demi-largeur à mi-hauteur de la perte de courant EBIC .....	<b>24</b>
<b>Figure 2.7 :</b> Paramétrage géométrique de l'échantillon.....	<b>26</b>
<b>Figure 2.8 :</b> Paramétrage chimique de l'échantillon.....	<b>26</b>
<b>Figure 2.9 :</b> Paramétrage du faisceau primaire.....	<b>27</b>
<b>Figure 2.10 :</b> Paramétrage des résultats.....	<b>27</b>
<b>Figure 2.11 :</b> Exemple de variation de la distribution des électrons primaires d'énergie $E_0=13\text{keV}$ en fonction de leur profondeur de pénétration dans un fil de rayon $r_a=0.1\text{nm}$ .....	<b>28</b>
<b>Figure 3.1 :</b> Trajectoires des électrons primaires accélérés avec une énergie $E_0 = 15\text{keV}$ dans un fil de longueur $h= 2 \mu\text{m}$ et de rayons $r_a = 0.1\mu\text{m}$ et $r_a = 1\mu\text{m}$ . GaAs (a, b), Si (c, d).....	<b>32</b>
<b>Figure 3.2 :</b> Distribution des électrons primaires en fonction de leurs profondeurs de pénétration.....	<b>34</b>
<b>Figure 3.3 :</b> Variation de $R$ en fonction de $E_0$ pour différentes valeurs de $r_a$ pour le cas de Si et de GaAs.....	<b>35</b>
<b>Figure 3.4 :</b> Fit du $\text{Ln}(R)$ en fonction $\text{ln}(E_0)$ pour le cas d'un fil de GaAs (a,b) et de Si (c,d).....	<b>36</b>
<b>Figure 3.5 :</b> La dépendance de $\alpha$ et $\beta$ en fonction du rayon du fil pour le GaAs (a, b) et le Si (c, d). La ligne rouge représente le fit.....	<b>37</b>
<b>Figure 3.6 :</b> Variation de distribution des paires électron-trou en fonction de la profondeur de pénétration pour différentes valeurs de $E_0$ . Pour $r_a=100\text{nm}$ et $r_a=1000\text{nm}$ .....	<b>39</b>

<b>Figure 3.7:</b> La distribution latérale des paires électron-trou pour différentes valeurs d'énergie. Pour $r_a=100\text{nm}$ et $r_a=1000\text{nm}$ .....	<b>40</b>
<b>Figure 3.8 :</b> Fit du $\text{Ln}(g(Z))$ en fonction de $z^2$ et $\text{Ln}(g(r)/r^2)$ en fonction de $r$ pour le cas d'un fil du GaAs (a,b) et Si (c,d).....	<b>41</b>
<b>Figure 3.9 :</b> Variation de $\sigma_r$ et $\sigma_z^2$ en fonction de $E_0$ pour le cas d'un fil de GaAs et de Si pour $r_a=5\mu\text{m}$ .....	<b>42</b>
<b>Figure 3.10 :</b> Variation de $\sigma_r$ et $\sigma_z^2$ en fonction de $E_0$ pour le cas d'un fil de GaAs et de Si pour $r_a=1\mu\text{m}$ .....	<b>42</b>
<b>Figure 3.11 :</b> Fit des paramètres a et b pour le cas d'un fil de GaAs.....	<b>44</b>
<b>Figure 3.12 :</b> Fit des paramètres a et b pour le cas d'un fil de Si.....	<b>45</b>
<b>Figure 3.13:</b> Schéma du modèle proposé.....	<b>47</b>
<b>Figure 3.14 :</b> Variation du signal EBIC en fonction de la distance de scan calculée avec différentes expressions du parcours électronique pour une jonction de GaAs.....	<b>51</b>
<b>Figure 3.15 :</b> Variation du signal EBIC en fonction de la distance de scan calculée avec différentes expressions du parcours électronique et de fonction de génération pour une jonction de GaAs.....	<b>52</b>
<b>Figure 3.16 :</b> Variation du signal EBIC en fonction de la distance du scan calculée avec différentes expressions du parcours électronique et de fonction de génération pour $r_a=0.2\mu\text{m}$ et $r_a=2\mu\text{m}$ .....	<b>53</b>
<b>Figure 3.17 :</b> Fit du signale EBIC pour une diode à base de nano fil de GaAs avec et sans passivation de surface.....	<b>54</b>



# LISTE DES TABLEAUX

<b>Tableau 3.1</b> : Fit des paramètres $\alpha$ et $\beta$ pour différentes valeurs de $r_a$ .....	<b>37</b>
<b>Tableau 3.2</b> : Fit de la variation de $\sigma_z^2$ et $\sigma_r$ dans le cas de GaAs.....	<b>43</b>
<b>Tableau 3.3</b> : Fit de la variation de $\sigma_z^2$ et $\sigma_r$ dans le cas de Si.....	<b>43</b>
<b>Tableau 3.4</b> : Différents paramètres de fit pour une diode avec et sans passivation de sa surface (sans traitement de surface) de diamètre $2r_a=0.2\mu\text{m}$ .....	<b>54</b>

# Résumé

Dans ce travail, à l'aide d'une simulation Monte Carlo nous avons modélisé les interactions électrons matière en utilisant le logiciel CASINO, pour déterminer un parcours électronique et une fonction de génération dans le cas des matériaux nano fils. Nous avons proposé aussi un modèle mathématique pour décrire le signal EBIC d'une jonction p-n filiforme. L'effet du choix du parcours électronique et de la fonction de génération sur la modélisation de ce signal a été illustré.

Pour le cas de la simulation Monte Carlo, les résultats obtenus montrent que les expressions mathématiques du parcours électronique et de la fonction de génération dépendent du rayon du fil. Elles sont indépendantes de ce paramètre dans le cas de grandes valeurs de ce dernier.

Pour le cas de la modélisation du signal EBIC, les calculs montrent que le signal EBIC augmente avec l'augmentation de la longueur de diffusion et il diminue avec l'augmentation de la vitesse de recombinaison.

Par ailleurs, les résultats de la modélisation montrent aussi que le choix du parcours électronique n'influe pas sur le calcul du signal EBIC, contrairement au choix de la fonction de génération. En outre, les résultats montrent que le signal EBIC, calculé avec le parcours électronique et la fonction de génération déduits dans ce travail, est très proche de celui calculé avec le parcours de Kyser et la fonction de génération Gaussienne.

Pour finir, on a pu vérifier le modèle grâce à des profils expérimentaux pour déterminer la longueur de diffusion des porteurs de charge et leur vitesse de recombinaison.

# Abstract

In this work, by using a Monte Carlo simulation we have modelled the interactions of electron-matter using CASINO software, to determine an electron path and an expression for a generation function for the case of nanowire materials. In addition, we have also proposed a mathematical model to describe the EBIC signal of a nanowires axial p-n junction. The effect of the choice of the electronic path and the generation function on this signal has been illustrated.

For the Monte Carlo simulation case, the results show that the mathematical expressions for the electronic path and the generation function depending on the wire radius. They are independent of this parameter for the case of large values of the latter.

For the modelling of the EBIC signal, the calculations show that the EBIC signal increases with the increase of the diffusion length and decreases with the increasing of the recombination velocity. Furthermore, the computation of modelled EBIC signal reveals that the choice of the electron path does not influence the calculated signal, unlike the choice of the generation function. The EBIC signal calculated with the electronic path and the generation function deduced in this work is very close to the one calculated with the Kyser path and the Gaussian generation function.

Finally, the model was verified by fitting experimental EBIC profiles to determine the diffusion length of the charge carriers and their recombination rate.

## **INTRODUCTION GENERALE**

---

L'implication de la nanotechnologie dans la fabrication des composants électroniques à ouvert de nouveaux horizons de recherche qui étaient impossibles il y a quelques années.

Vue leurs propriétés électriques, optiques et mécaniques uniques, les nano fils ont attiré l'attention de plusieurs chercheurs en les utilisant dans plusieurs technologies telles que la fabrication des dispositifs optoélectroniques comme les diodes électroluminescentes et les diodes laser. Récemment, ils sont devenus une alternative pour la fabrication des cellules solaires.

Les progrès réalisés n'ont été possible que grâce au développement des techniques de caractérisation adéquates comme le microscope électronique à balayage (MEB), le microscope électronique à transmission (MET)...etc.

La technique du courant induit par bombardement électronique (EBIC) (technique associée au MEB) est une technique non destructive qui permet la caractérisation électrique d'une grande variété de composants électroniques et optoélectroniques en l'occurrence les cellules solaires. Avec les progrès réalisés sur le MEB (MET) et sur la technique elle-même, il est devenu possible de l'utiliser pour des caractérisations à l'échelle nanométrique.

Son principe est basé sur la collecte d'un courant électrique issu d'un composant électronique, une jonction p-n par exemple, bombardée par un faisceau d'électrons de quelques kilo électron-volt d'énergie. L'analyse du courant collecté permet la détermination des propriétés intrinsèques du semiconducteur et la détection de la présence des défauts électriquement actifs dans son volume.

L'extraction des paramètres physiques du semiconducteur à partir du signal EBIC exige la confrontation des mesures expérimentales avec des modèles théoriques. Dans ces modèles, il faut tenir compte de la géométrie de l'échantillon, la géométrie EBIC utilisée et les propriétés physiques intrinsèques de l'échantillon pour que l'extraction des paramètres soit physique.

En général, la modélisation du signal EBIC repose sur la connaissance de la distribution initiale des paires électron-trou et leur diffusion dans le volume du semiconducteur. La distribution initiale des paires est décrite par une fonction mathématique appelée la fonction de génération. Cette fonction est obtenue à partir de l'étude de la dissipation de l'énergie des électrons primaires dans le semiconducteur. Tandis-que la diffusion est obtenue par la résolution de l'équation de continuité sujette à des conditions aux limites appropriées.

En effet, plusieurs fonctions de générations ont été proposées pour décrire la distribution des paires électron-trou pour le cas des matériaux massifs. Un parcours électronique est associé à chaque fonction (une fonction mathématique qui relie la profondeur de pénétration des électrons de bombardement à leur énergie).

Pour le cas des nano fils, aucune étude n'a été faite pour décrire la distribution des paires électron-trou suite au bombardement par un faisceau d'électrons énergétiques. En plus, très peu de modèles mathématiques pour décrire le signal EBIC sont proposés.

Dans ce travail, nous voulons atteindre deux objectifs :

1- La détermination d'une fonction de génération et un parcours électronique adéquat à cette fonction pour le cas des nano fils en utilisant la technique Monte Carlo. La dépendance de ces deux paramètres avec le rayon du fil sera explicitement montrée.

2- Proposition d'un modèle théorique qui décrit le signal EBIC d'une jonction axiale p-n filiforme. L'effet du choix de la fonction de génération et du parcours électronique sur le signal EBIC sera examiné.

Pour présenter notre travail, nous avons partagé ce mémoire en trois chapitres et une annexe.

Le premier chapitre est consacré aux rappels théoriques des interactions électron-matière. Les processus d'interaction élastiques et inélastiques, les modèles des parcours électroniques, la dissipation de l'énergie des électrons primaires et les fonctions de génération seront exposés.

Le deuxième chapitre est réservé principalement à la description de la technique de caractérisation EBIC. Une description de son principe de fonctionnement, ses différentes configurations expérimentales et les paramètres physiques visés avec cette technique sont exposés. Ensuite, une brève description de la technique Monte Carlo et du logiciel CASINO utilisé dans ce travail sera donnée.

Le troisième chapitre portera en premier lieu sur la détermination d'une fonction de génération et d'un parcours électronique dans le cas des nano fils en utilisant le logiciel CASINO. Leur dépendance avec le rayon du fil sera explicitement examinée. Ensuite, un modèle théorique pour décrire le signal EBIC d'une jonction p-n pour le cas de la configuration parallèle (électrodes de collection du courant parallèle au faisceau de bombardement) sera donné. L'effet du choix de la fonction et du parcours électronique sera exposé. En fin, une démonstration de fit des points expérimentaux et l'extraction des paramètres physiques de la jonction est illustrée. L'annexe sera consacrée aux détails de calculs de la fonction de Green de notre modèle.

---

## Chapitre 1. Interaction électron matière

---

### 1.1 Introduction

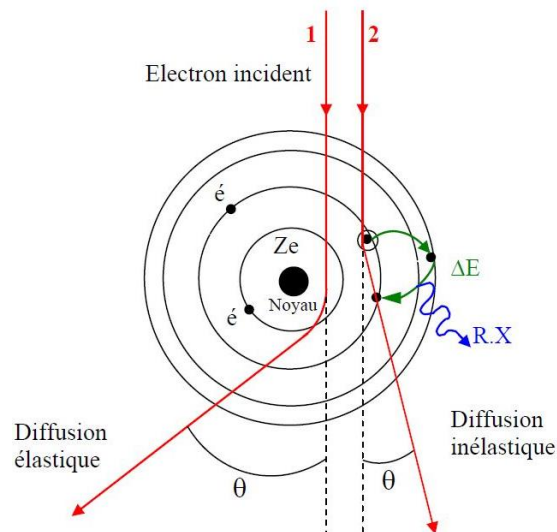
En raison des limites des microscopes optiques, les microscopes électroniques ont été développés. Il s'agit d'un outil important car il permet d'observer et de caractériser des substances allant du micromètre au nanomètre.

Le microscope électronique à balayage (MEB) est l'un des microscopes électroniques les plus utilisés dans la recherche et l'industrie. Son principe de fonctionnement est basé sur la focalisation d'un faisceau d'électrons accéléré d'une énergie de quelques keV (entre 0,5 keV et 50 keV) sur la substance à analyser. Ces derniers interagissent avec les noyaux atomiques et leurs électrons lors de leur entrée dans l'échantillon. Ces interactions modifieront leurs trajectoires et réduiront leurs énergies.

Dans ce chapitre, nous aborderons les différents processus d'interaction électronique-matière et les différents signaux secondaires produits.

### 1.2 Mécanismes physiques de l'interaction électron-matière

Lors de l'impact d'un faisceau d'électrons sur une cible massive, il pénètre dans son volume en produisant plusieurs phénomènes physiques tels que la production d'électrons rétrodiffusés et d'électrons secondaires. Les trajectoires des électrons dans la matière dépendent des propriétés physiques des matériaux et leur énergie. Quand un électron pénètre dans un matériau, ce dernier subit des interactions élastiques là où l'électron primaire interagit avec le noyau atomique pour s'exprimer par une déviation de la trajectoire incidente, et souvent l'électron subit des interactions inélastiques qui s'expriment par une variation de l'énergie cinétique primaire. Dans ces interactions interviennent les noyaux des atomes, leurs électrons du cœur fortement liés et leurs électrons de valence. Un schéma des deux processus de collision est présenté sur la figure (1.1).



**Figure 1.1.** Schéma représentatif des interactions élastiques et inélastiques [1].

### 1.2.1 Diffusion élastique

Les diffusions élastiques des électrons par les atomes créent des électrons rétrodiffusés. Elles provoquent des déviations successives des trajectoires électroniques. Pratiquement tous les électrons incidents ressortent du matériau. Les collisions élastiques sont essentiellement des interactions coulombiennes entre les électrons de bombardement et les noyaux des atomes de la cible. Au cours de ces collisions, l'énergie cinétique des particules et leur quantité de mouvement sont conservées. La proportion et les énergies de tels électrons dépendent de leurs énergies primaires ainsi que des propriétés physiques du matériau considéré. Le phénomène de rétrodiffusion est à l'origine de l'expansion latérale du faisceau d'électrons initialement focalisé sur une sonde d'un diamètre de plusieurs dizaines d'angströms. Cette expansion peut atteindre plusieurs microns et elle est une fonction croissante de l'énergie du faisceau incident et du numéro atomique du matériau. Elle constitue une limitation inévitable de la résolution spatiale des technologies basées sur l'excitation par faisceau d'électrons (EBIC, CL, ...).

### 1.2.2 Diffusion inélastique

Des interactions inélastiques se produisent entre les électrons incidents et les électrons atomiques. Au cours de cette interaction, l'électron incident perd de l'énergie, ce qui entraîne une variété de signaux secondaires. Cependant, il est nécessaire de distinguer les électrons du cœur et des couches externes. La désexcitation se produit immédiatement après et lorsqu'elle est excitée, elle renvoie rapidement l'énergie qu'elle y a gagnée sous forme de rayonnement ou en transférant un électron externe à un électron interne de niveau supérieur. Cela revient au niveau du cœur non

dilaté. La figure 1.2 montre les différents signaux produits par bombardement électronique d'une cible semi-conductrice.

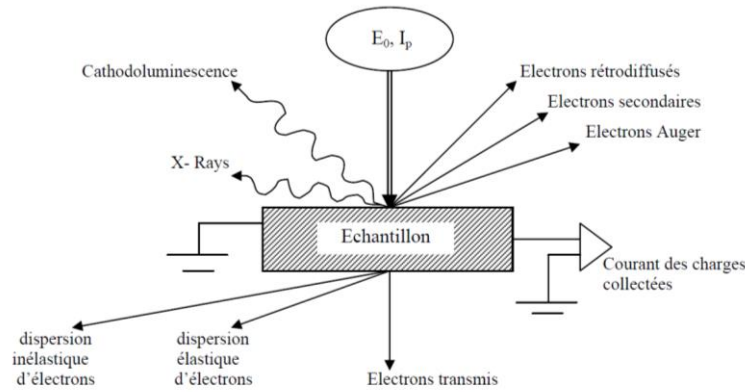


Figure 1.2. Différents Mécanismes de dissipation des électrons incidents [1].

### 1.3 Loi de dissipation de l'énergie

Le processus d'interaction inélastique réduit continuellement l'énergie d'un électron jusqu'à ce qu'il soit capturé. Afin de pouvoir quantifier le signal enregistré, il est important de comprendre comment ces électrons perdent de l'énergie en fonction de la distance parcourue et des propriétés physiques du matériau. Sur la base de la valeur approximative de la perte d'énergie continue, Bethe a donné l'expression de la dissipation d'énergie par unité de distance  $dE / dz$  en 1933 comme [2,3]:

$$\frac{dE}{dz} = -2\pi N_A e^4 \frac{Z \cdot \rho}{A} \cdot \frac{1}{E} \cdot \ln\left(\frac{a_1 E}{J}\right) \quad (1.1)$$

Avec :

A : la masse atomique du matériau (g).

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

$N_A$  : le nombre d'Avogadro.

$a_1 = 1.1658$ .

J : le potentiel moyen d'excitation, il caractérise l'ensemble des interactions inélastiques.

Son expression est donnée par :

$$J(\text{keV}) = 11.5 \cdot Z \cdot 10^{-3} \quad (1.2)$$

Une autre expression a été proposée par Berger et Seltger [4]

$$J(\text{keV}) = (9.76 Z + 58.5 Z^{-1.19}) 10^{-3} \quad (1.3)$$

La loi de la dissipation d'énergie peut être encore exprimée par :

$$\frac{dE}{d(\rho z)} = -2\pi N_A e^4 \left(\frac{Z}{A}\right) \cdot \frac{1}{E} \text{Ln}\left(\frac{aE}{J}\right) \quad (1.4)$$

Plusieurs modèles ont été élaborés pour la détermination de la fonction de dissipation d'énergie.

Kanaya et okayama(1972)[5] ont proposé d'exprimer la fonction de dissipation  $\phi\left(\frac{z}{R}\right)$  sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \phi(u) = & (1-u)^{-2/5} \cdot \left(\frac{\gamma}{1-u} + \frac{3}{5}\right) \exp\left(-\frac{\gamma u}{1-u}\right) + 2.28 \frac{E_B}{E_0} \\ & \times \frac{\gamma}{(1-u)^2} \left[2^{-5/6} - (1-u)^{5/6}\right] \exp\left(\frac{-1.9 \cdot \gamma u}{1-u}\right) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Ou  $u=z/R$   $\gamma = 0.187 \cdot Z^{2/3}$

Everhart et Hoff (1971) ont proposé une expression analytique polynomiale de fonction  $\Phi(u)$  à partir du résultat de la mesure du courant EBIC d'un échantillon à base de silicium. En raison de sa simplicité, c'est probablement l'équation la plus couramment utilisée donné par :

$$\lambda(u) = 0.6 + 6.21u - 12.4u + 5.69u^3 \quad (1.6)$$

Pour  $0 \leq u \leq 1,1$ , avec  $u=z/R_G$ ,

Il faut signaler que  $\lambda(u)$  n'est valable que dans des domaines d'énergie bien limités ( $5\text{keV} \leq E_0 \leq 25\text{keV}$ ) et de numéro atomique ( $10 \leq Z \leq 15$ ) ; de plus,  $\lambda(u)$  s'annule pour  $u=1.1$ .

$\lambda(u)$  peut être reliée à la fonction dissipation  $\phi(u)$  par :

$$\phi(u) = (1-f)\lambda(u) \quad (1.7)$$

$$f = \frac{\eta_B E_B}{E_0}$$

f : La fraction moyenne d'énergie perdue par rétrodiffusion.

$\eta_B$  est le coefficient de rétrodiffusion des électrons rétrodiffusés, d'énergie  $E_B$ .

D'autre part, afin de caractériser la perte d'énergie  $W_u$  et Wittry (1978) [7], proposent une forme gaussienne modifiée ; elle est donnée par :

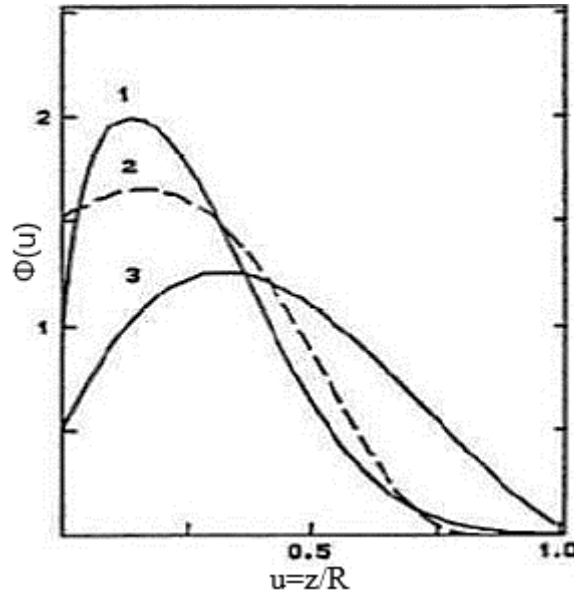
$$\phi(u) = A \exp\left(-\left(\frac{u-u_0}{\Delta u}\right)^2\right) - B \exp\left(-\frac{bu}{u_0}\right) \quad (1.8)$$

Notons que c'est à partir d'une étude de la dépendance du signal de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie  $E_0$  du faisceau incident dans le GaAs que tous les paramètres qui

interviennent dans l'expression  $Q = \frac{E_A}{E_{eh}}$ , ont été déterminées par Kyser et Wittry (1967) [8].



La figure I.3 montre la comparaison de la variation de  $\Phi(u)$  en fonction du parcours  $u$  des trois modèles :



**Figure 1.3.** Variation de  $\Phi(u)$  en fonction du parcours  $u$  pour une cible de germanium selon les trois modèles : 1-Kanaya et Okayama[5], 2- Everhart et Hoff[6], 3- Kyser [9].

Les constantes A et B sont obtenues par la condition de normalisation de  $\Phi(u)$  et de la relation  $B/A=0.4$ . D'autre part, les constantes,  $b$ ,  $\Delta n$  et  $n_0$  sont données par :

$b=4.0$  ;  $\Delta u=0.35$  et  $u_0=0.125$ . La confirmation des valeurs obtenues a fait l'objet d'une étude d'émission de rayon X provenant d'une cible de cuivre, cité par Kyser (1972) [9]

#### 1.4 Parcours électronique

En raison des interactions élastiques et inélastiques que subissent les électrons incidents à travers le matériau, la trajectoire que suit l'électron incident lorsqu'il pénètre dans le matériau est aléatoire. La distance entre le point d'impact d'un électron incident et son point de capture dans la substance est appelée parcours électronique noté  $R$ . Bethe définit ce parcours par la relation [2,3]:

$$R_B = \int_{E_0}^0 \frac{1}{dE/ds} dE \quad (1.9)$$

Avec,  $ds$  le déplacement (la pénétration) élémentaire et  $E_0$  énergie primaire.

La pénétration effective pour laquelle s'étale la dissipation de l'énergie est plus petite par rapport à  $R_B$ , elle est connue sous le nom "le parcours de Gruen" [10] ou simplement parcours électronique, sa forme générale est donnée par [11] :

$$\rho R \left( \frac{g}{cm^3} \right) = C E_0^n \quad (1.10)$$

Où  $\rho$  est la densité du matériau ( $\text{g/cm}^3$ ) et  $C$  est une constante tandis-que  $n$  varie entre 1.2 et 1.8 et dépend principalement de  $E_0$ , du numéro atomique  $Z$  et de la définition de  $R$ .

Plusieurs expressions dans la littérature ont été proposées, nous donnons ici les expressions les plus utilisées :

- Parcours électronique de Kyser  $R_K$  [9]

$$\rho R \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right) = 2.56 \left( \frac{E_0}{30} \right)^{1.68} \quad (1.11)$$

Où  $E_0$  l'énergie des électrons primaires exprimée en keV,  $\rho$  la masse volumique ( $\text{g/cm}^3$ ).

- Parcours électronique Kanaya et Okayama  $R_{KO}$  [5] :

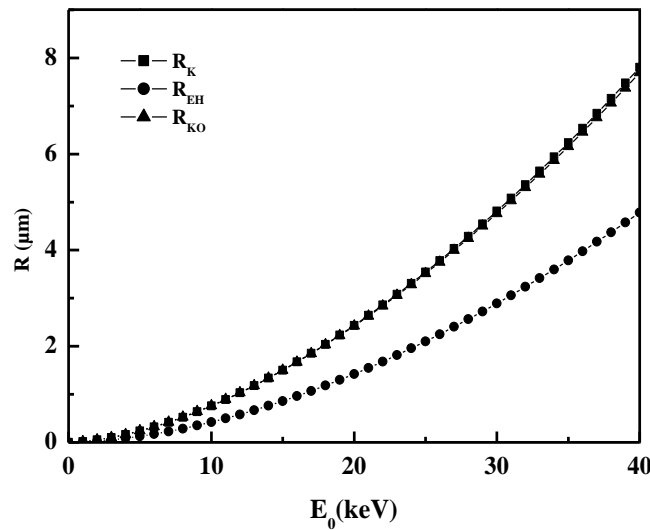
$$\rho R_{KO} (\text{g/cm}^2) = 2.76 \times 10^{-6} \cdot \frac{A}{Z^{8/9}} E_0^{5/3} (\text{keV}) \quad (1.12)$$

Où  $E_0$  l'énergie des électrons primaires exprimée en keV.

- Parcours électronique d'Everht et Hauff  $R_K$  [6]

$$\rho R_{EH} (\text{g/cm}^2) = 4.0 \times 10^{-6} E_0^{1.75} \quad (1.13)$$

L'estimation de la profondeur de pénétration d'un électron dépend de l'expression mathématique utilisée. La figure 1.4 montre la profondeur de pénétration de l'électron primaire dans un échantillon de GaAs avec l'énergie d'excitation. La différence entre la profondeur de pénétration calculée par  $R_{EH}$  et la profondeur de pénétration calculée par  $R_K$  et  $R_{KO}$  augmente avec l'augmentation d'énergie. Néanmoins les valeurs de profondeur de pénétration calculées par  $R_K$  et  $R_{KO}$  sont cohérentes dans n'importe quelle gamme d'énergie.



**Figure 1.4.** Variation du parcours électronique en fonction de l'énergie de bombardement dans le GaAs.  $R_K$  parcours proposé par Keyser,  $R_{EH}$  parcours proposé par Everhart et Hoff et  $R_{KO}$  parcours proposé par Kanaya et Okayama.

### 1.5 Energie de formation de paires

La création des paires électrons-trous est l'un des processus inélastiques accompagnants la pénétration des électrons dans un semi-conducteur. L'énergie de formation d'une paire électron-trou est donnée par la relation :

$$Q = \frac{E_A}{E_{eh}} \quad (1.14)$$

$Q$  étant le nombre de paires créés par les électrons incident et  $E_A$  est l'énergie absorbée dans le semi-conducteur.

Selon Klein [12]  $E_{eh}$  peut être exprimée par :

$$E_{eh} = E_g + \langle E_R \rangle + \langle E_K \rangle \quad (1.15)$$

$\langle E_R \rangle$  est l'énergie moyenne associée à la génération d'un phonon dans la branche optique,  $\langle E_K \rangle$  est l'énergie cinétique résiduelle dissipée au cours du processus de thermalisation des porteurs générés. L'énergie  $\langle E_R \rangle$  s'écrit sous la forme :

$$\langle E_R \rangle = r \hbar \omega \quad (1.16)$$

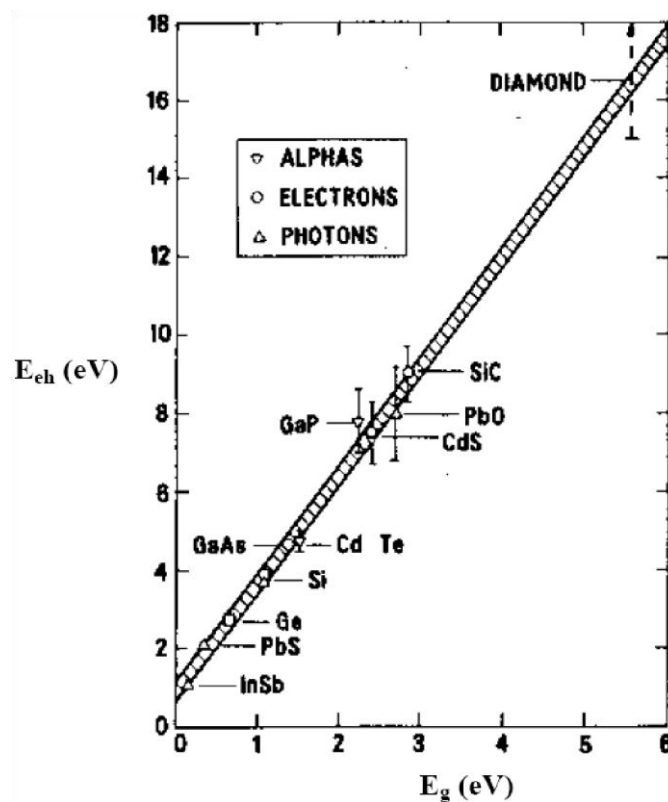
Pour  $\langle E_k \rangle$ , Klein [12] propose la relation :

$$\langle E_k \rangle = \frac{9}{5} E_g \quad (1.17)$$

Donc :

$$E_{ch} = \frac{14}{5} E_g + r\hbar\omega \quad (1.18)$$

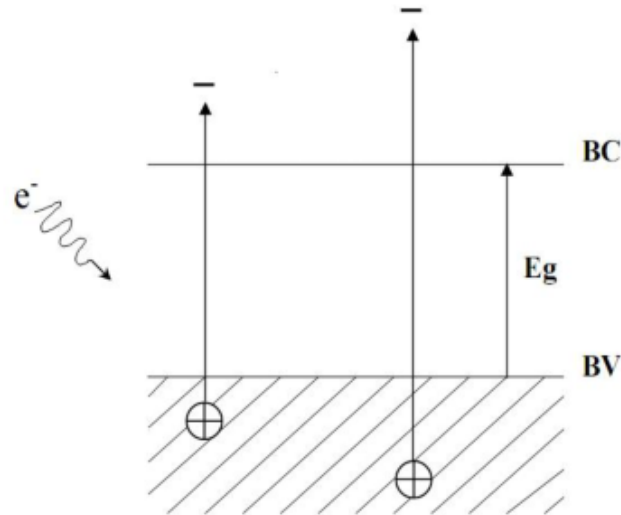
La figure 1.5 montre la dépendance de  $E_{ch}$  en fonction de l'énergie du gap. Les valeurs expérimentales sont bien ajustées à l'aide de l'expression 1.15 ( $r\hbar\omega$  est utilisé comme paramètre d'ajustement et il est quasi constant  $0,5 \text{ eV} \leq r\hbar\omega \leq 1 \text{ eV}$ ).



**Figure 1.5.** Variation de l'énergie de création de paires électron-trou en fonction du gap pour différents semiconducteurs et différentes sources d'énergies (d'après Klein [12]).

## 1.6 Génération de paires électron-trou

Focaliser un faisceau d'électrons avec quelques kilo électron-volt d'énergie sur une surface semi-conductrice excite les électrons de la bande de valence vers la bande de conduction ce qui laisse un vide sur une des liaisons covalentes du cristal qui correspond à un trou. Puis il se produit la génération des paires électron-trou, comme le montre la figure 1.6.



**Figure 1.6.** Schémas illustratifs du processus de création de paires électron-trou [20].

### 1.7 Fonction de génération

L'énergie perdue lorsque les électrons incidents traversent des matériaux semi-conducteurs est principalement utilisée pour former des paires d'électron trou ( $e^- - h^+$ ) et correspond au nombre de paires créés par unité de temps et unité de volume ( $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ ) en un point  $r(x, y, z)$ . C'est ainsi que nous spécifions la valeur moyenne de la fonction de générations  $g(z)$  à la densité ( $e^- - h^+$ ) En fonction de  $z$ .

Comprendre la fonction  $g(r, z)$  est fondamentale pour la mesure du signal EBIC et apprécier quantitativement les propriétés du matériau, néanmoins c'est souvent la source d'erreurs et de problèmes mathématiques, c'est pourquoi de nombreux auteurs travaillent ensemble pour se mettre dans des conditions  $g(r)$  simplifiées. Par exemple, lorsque le faisceau d'électrons est perpendiculaire à la surface de l'échantillon,  $g(r)$  a une symétrie de rotation autour de la direction du faisceau d'électrons et s'écrit :

$$g(r, z) \text{ ou } r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (1.19)$$

Cette approche est souvent utilisée pour la compréhension des résultats du contraste EBIC en présence de défauts.

Ainsi, pour étudier le contraste des dislocations, plusieurs expressions de  $g(r, z, R)$  ont été proposées pour son analyse, parmi lesquelles celle de Donolato (1981) [13] qui a utilisé une expression semi empirique de Poisson, cette dernière s'écrivant comme :

$$g(r, Z, R) = \frac{A(z, R)}{2\pi\sigma^2(z, R)} \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma^2(z, R)}\right) \quad (1.20)$$

Avec :

$$\sigma^2 = 0.36d_e^2 + \frac{0.11z^3}{R} \quad (1.21)$$

$d_e$  diamètres du faisceau électronique,  $R$  la profondeur de pénétration.  $A(z, R)$  est donné par :

$$\int_0^\infty g(r, z, R) 2\pi r dr = A(z, R) = g(z) \quad (1.22)$$

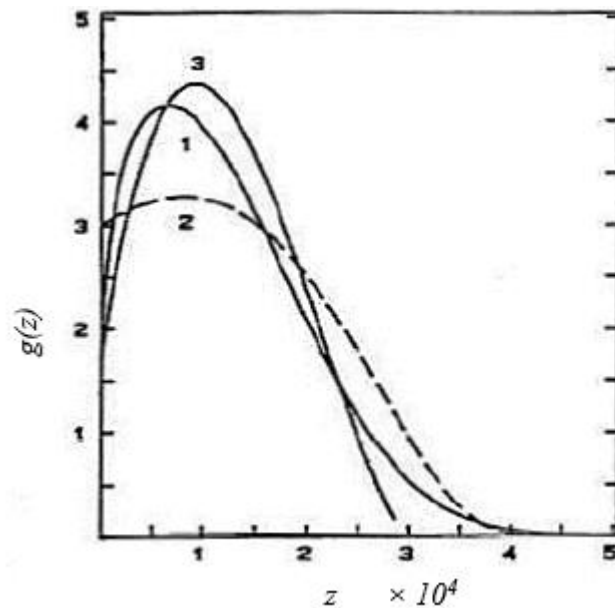
On peut montrer [14] que  $A(z, R)$  s'écrit :

$$A(z, R) = \frac{I_p E_0}{q R} \phi\left(\frac{z}{R}\right) \quad (1.23)$$

Où  $\phi(z, R)$  est une fonction universelle, indépendante de l'énergie du faisceau, mais elle a les caractéristiques d'une fonction de dissipation d'énergie.

L'établissement des expressions mathématiques pour la fonction de génération n'est avantageux que dans la mesure où cela permet l'établissement de modèles analytiques pour le signal EBIC. Pour le cas du modèle EBIC décrivant les défauts dans un semi-conducteur tels que les dislocations et les joints de grains, la fonction de génération est souvent prise comme simple telle que la fonction de génération constante avec un volume sphérique tangent à la surface [15, 16]. Kanaya et Okayama [5] ont montré que le volume de génération peut être simulé à une sphère tangente à la surface uniquement lorsque le numéro atomique est compris entre 10 et 15. La méthode Monté Carlo présente une autre approche utilisée par plusieurs auteurs pour dériver des expressions mathématiques pour la fonction de génération [17,18].

La figure I.7 montre la variation de la fonction de génération  $g(z)$  en fonction de la profondeur  $z$  pour le germanium à une énergie incidente  $E_0=30$  keV. Notons que les pics des courbes se situent au voisinage d'une profondeur égale approximativement à  $z = 1\mu\text{m}$ .



**Figure1.7.** Variation de la fonction de génération  $g(z)$  en fonction de la profondeur  $z$  à une énergie  $E_0=30$  keV dans le germanium selon les trois modèles : 1-Kanaya et Okayama [5], 2- Everhart et Hoff [6], 3- Kyser [9].

Les fonctions de génération les plus utilisées dans la modélisation du signal EBIC avec ou sans défauts sont :

- Fonction de génération ponctuelle,  $g_p$ :

$$g_p(z) = G_0 \delta(z - z_1) \quad (1.24)$$

avec:  $z_1=0.3R$  ( $R$  étant le parcours électronique) et  $G_0$  le taux de génération.

- Fonction de génération constante,  $g_{con}$  :

$$g_{con}(z) = \begin{cases} G_0 & \text{si } z \leq R \\ 0 & \text{si } z \geq R \end{cases} \quad (1.25)$$

$R$  étant le parcours électronique et  $G_0$  le taux de génération.

- Fonction de génération polynomiale,  $g_{py}$ :

$$g_{py}(z) = \frac{G_0}{R_{EH}} \left( 0.6 + 6.21 \left( \frac{z}{R_{EH}} \right) - 12.41 \left( \frac{z}{R_{EH}} \right)^2 + 5.69 \left( \frac{z}{R_{EH}} \right)^3 \right) \quad (1.26)$$

$R_{EH}$  parcours électronique d'Everhart et Hoff et  $G_0$  le taux de génération.

- Fonction de génération gaussienne,  $g_G$ :

$$g_G(z) = A' \exp \left[ - \left( \frac{z / R_K - u_0}{\Delta u} \right)^2 \right] - B \exp \left( \frac{-bz / R_K}{u_0} \right) \quad (1.27)$$

$\frac{A'}{B} = 0.4, b = 4.0, \Delta u = 0.35, u_0 = 0.125$  et  $R_K$  parcours électronique de Kyzer.

- Fonction de génération constante dans un volume sphérique,  $g_S$ :

$$g_S = g(r) = \begin{cases} \frac{G_0}{\frac{4}{3}\pi R_{Sph}^3}, & \text{si } r \text{ est dans le volume de génération,} \\ 0, & \text{si } r \text{ à l'extérieur.} \end{cases} \quad (1.28)$$

Avec :  $R_{Sph} = 0.5R$  ( $R_{Sph}$  le rayon de la sphère) et  $R$  étant le parcours électronique.

- Fonction de génération constante dans un volume cubique  $g_C$ :

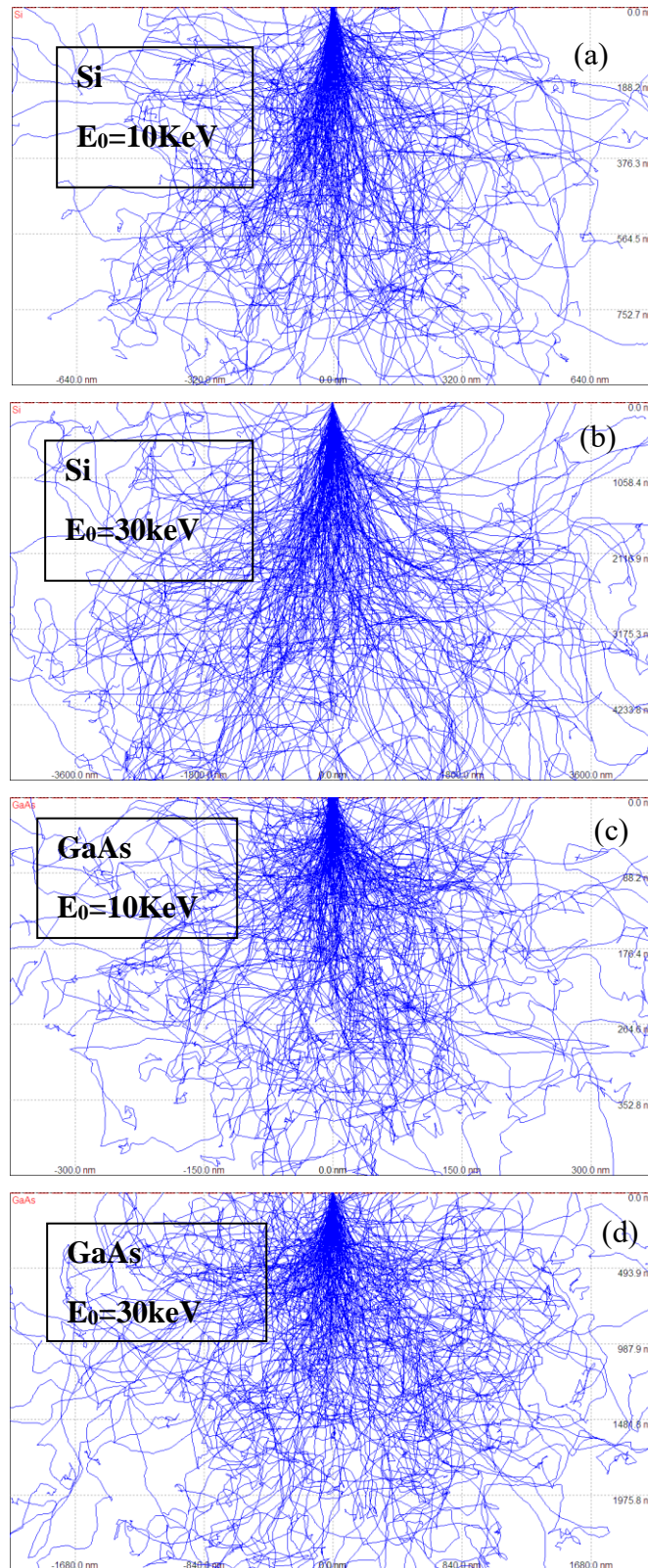
$$g_C = g(r) = \begin{cases} \frac{G_0}{l^3}, & \text{si } r \text{ est dans le volume de génération,} \\ 0, & \text{si } r \text{ à l'extérieur.} \end{cases} \quad (1.29)$$

avec :  $l=R$  ( $l$  le coté du cube) et  $R$  le parcours électronique.

Pour montrer la dépendance du volume de génération suivant le numéro atomique et l'énergie de l'électron primaire, nous avons utilisé le logiciel Casino [19] pour tracer les trajectoires de 500 électrons dans une cible de Si et de GaAs avec différentes énergies d'accélération. La connaissance de ces trajectoires permet d'estimer la forme et la taille du volume de génération.

L'expansion spatiale du volume de génération dépend de l'énergie de bombardement, comme le montre la figure 1.8a-d. Cependant, la forme du corps résultant dépend du numéro atomique. Pour le cas du silicium, il est sphérique (figure 1.8 a, b) et hémisphérique pour le cas du GaAs (figures 1.8 c, d).





**Figure 1.8.** Trajectoire des électrons primaires dans le volume du semi-conducteur (Si et GaAs) pour  $E_0 = 10 \text{ keV}$  et  $E_0 = 30 \text{ keV}$  [20].

**Références**

- [1] L. Reimer, Scanning Electron Microscopy, Vol. 45 of Springer Series in Optical Sciences, in, Springer-Verlag, New York, 1985.
- [2] W. Williamson, Jr. and G. C. Duncan, "Monte Carlo simulation of nonrelativistic electron scattering" Am. J. Phys, 54(3), March 1986.
- [3] N. Tabet, "Contribution à l'étude des propriétés électriques de volume et des joints de grains dans le germanium application de la méthode du courant induit par faisceau d'électrons EBIC", Thèse de doctorat, Université Paris Sud, Centre d'Orsay, 1988.
- [4] E.T . Berger and S.M. Seltzer, Nat. Acad. Sci. Nat. Rest. Council Pub.1133, 205 (1964).
- [5] K. Kanaya and S. Okayama, J. Phys. D : Appl. Phys, 5, 43(1972)
- [6] T. E. Everhart and P. H. Hoff, J. Appl. Phys. 42, 5837 (1971).
- [7] C.J .Wu and D.B. Wittry, J Appl. Phys. 49, 2827(1978)
- [8] D.F. Kyser and D.B. Wittry, J. Appl. Phys. 38, 375(1967).
- [9] D.F. Kyser, Proc of the inst .conf X Ray Optics (1972) and Microanalysis Osaka, University of Tokyo, Press Tokyo P.147 (1971).
- [10] A.E. Gruen , Z. Natuforsch, 12 A, 89 (1957)
- [11] J. I .Hanoka and R. O. Bell, Ann. Rev. Mater Sci, 353 (1981).
- [12] C. A. Klein, J. Appl. Phys. 39, 2029 (1968).
- [13] C. Donolato, Phys. Status Solidi (A) 65, 649–658 (1981)
- [14] T. Matsukawa, K. Murata and R. Shimizu, Phys. Status Solidi (B) 55, 371-83 (1973).
- [15] L. Pasmann, Phys. Status Solidi A 84,
- [16] C. Donolato, Optiki 52, 19 (1979).
- [17] C. Parish and P. Russell, App. Phys. Lett. 89, 192108 (2006).
- [18] B. Akamatsu, and J. P. Henoc, J. Appl. Phys. 52, 7245 (1981).
- [19] D. Drouin, A. R. Coutre, R. Gauvin, P. Hovington, P. Horny and H. Demers, CASINO V 2.42 software et \_V3.3.0.4 software; [www.gel.usherbrooke.ca/casino/](http://www.gel.usherbrooke.ca/casino/). (2017)

[20] A. Lahreche, Thèse de Doctorat, Université de Jijel (2014).

---

## Chapitre 2. Technique EBIC et méthode Monte Carlo

---

### 2.1 Introduction

La technique du courant induit par bombardement électronique (EBIC) est l'une des techniques de caractérisation électrique des semiconducteurs. Basée sur la collecte de charges libres minoritaires en excès, elle permet d'analyser et de déterminer les propriétés électriques intrinsèques des semiconducteurs, telles que la longueur de diffusion, le taux de recombinaison d'interface, la durée de vie...etc. Elle est également utilisée pour des observations plus qualitatives des défauts cristallins, tels que les dislocations et les joints de grains.

Les techniques de simulation par la méthode de Monte Carlo se sont révélées d'une grande utilité dans l'étude des phénomènes possédants plusieurs variables. Le principe de la méthode Monte Carlo est de générer des nombres aléatoires pour simuler des phénomènes comportant une ou plusieurs variables aléatoires. Elle est utilisée dans plusieurs domaines, par exemple dans la simulation des interactions entre le faisceau d'électrons et le milieu de diffusion.

Dans ce chapitre, nous allons donner une description de la technique EBIC suivie par la description de la méthode Monte Carlo.

### 2.2 Technique EBIC

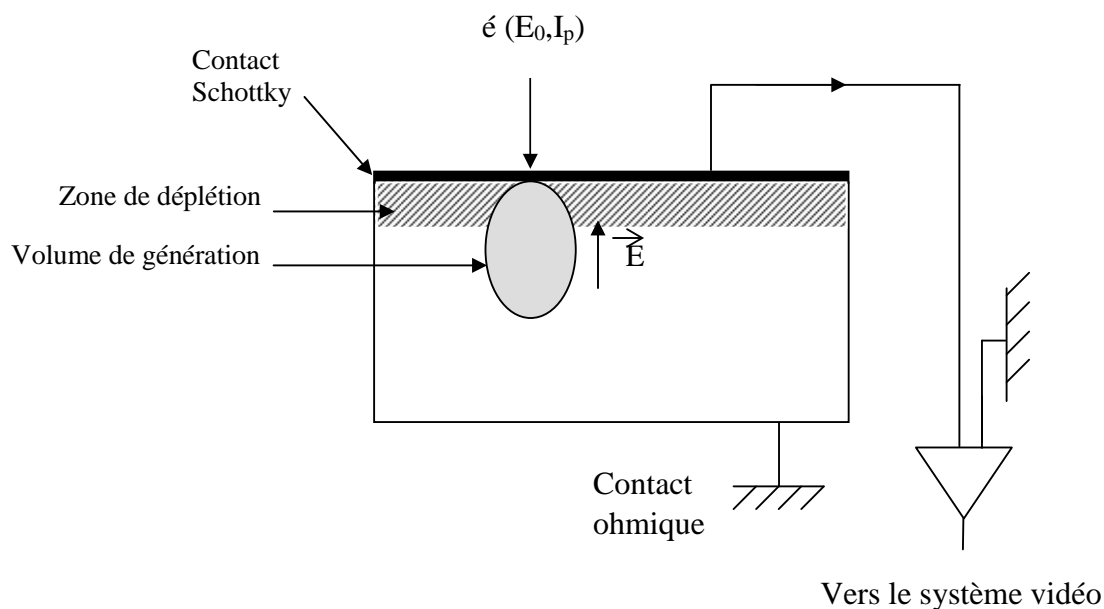
#### 2.2.1 Principe

La microscopie EBIC est un mode de fonctionnement développé sur la base du microscope électronique à balayage (MEB). Elle consiste à bombarder un dispositif électronique, par exemple, une jonction p-n, par un faisceau d'électrons de quelques keV d'énergie.

Ce mode ouvre un large éventail d'applications du MEB pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs. En effet, dans le mode d'absorption, le courant d'échantillon est destiné à fournir une micrographie qui reflète l'état de surface de l'échantillon et peut contenir des informations sur les caractéristiques électroniques du semiconducteur dans des conditions de travail spécifiques. Celui-ci donne accès à plusieurs types d'informations, qu'elles soient qualitatives (défauts locaux, dislocations, etc...) ou quantitatives (longueur de diffusion des porteurs minoritaires, vitesse de recombinaison) [1-2]. La méthode est basée sur la mesure du courant de porteurs minoritaires dans un dispositif semiconducteur généré par injection d'électrons. Ces porteurs en excès (paires électron-trou) doivent être nécessairement séparés après leur génération soit par une jonction p-n soit par un champ localisé dû à un défaut local. Dans le cas des jonctions électriques, celle-ci peut être alors disposée parallèlement ou

perpendiculairement au faisceau d'électrons en fonction de la structure géométrique de l'échantillon.

La technique EBIC permet aussi l'étude de l'activité électrique des défauts présents dans les semiconducteur. Cette étude est limitée par la résolution spatiale, qui est principalement due à l'extension spatiale du volume de génération. Ce dernier s'étale de quelques dizaines de nm jusqu'à quelques micromètres en fonction de l'énergie de bombardement [3]. Cette technique est suffisamment résolue pour effectuer des analyses au niveau des circuits intégrés et des dispositifs électroniques [4]. Cette technologie permet d'étudier le processus de recombinaison de porteurs minoritaires. Le signal EBIC correspond au flux de porteurs minoritaires atteignant le détecteur. Il s'agit d'une jonction p-n ou d'un contact métal-semi-conducteur redresseur (contact Schottky) conçu à la surface de l'échantillon [5].



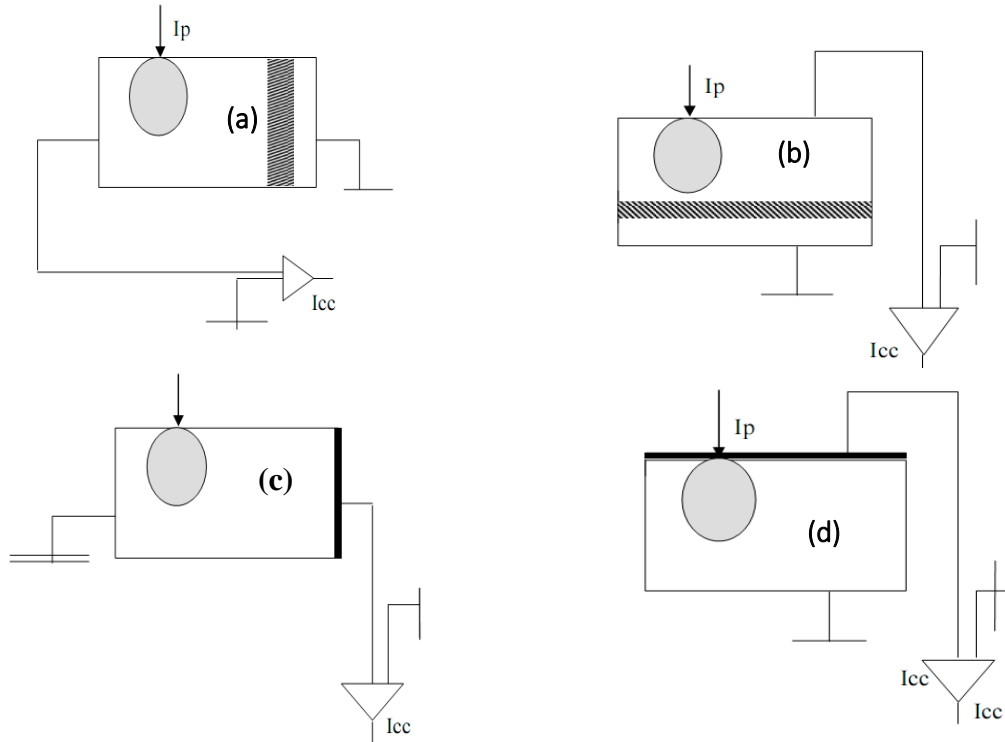
**Figure 2.1.** Schéma illustrant la génération et la collecte du courant EBIC par une diode Schottky réalisée sur un semiconducteur [27].

### 2.2.2 Les différentes géométries de la technique EBIC

Deux principaux types d'excitations par faisceau électronique sont utilisées pour effectuer des mesures EBIC :

- Une excitation parallèle où les électrons arrivent parallèlement à la jonction
- Une excitation perpendiculaire où les électrons traversent perpendiculairement la jonction.

Il existe une troisième géométrie d'utilisation du mode EBIC qui consiste à faire une coupe en biseau sur l'échantillon suivant un angle donné de façon à varier la distance entre le point d'impact et la zone de désertion [6]. Les dispositifs rencontrés en technique EBIC sont illustrés par la figure 2.2



**Figure 2.2.** Schéma illustrant les différentes géométries utilisées dans la technique EBIC : jonction p-n parallèle au faisceau incident  $I_p$ (a), jonction p-n perpendiculaire au faisceau incident(b), faisceau parallèle à une diode Schottky(c) et faisceau perpendiculaire à une diode Schottky(d)[6].

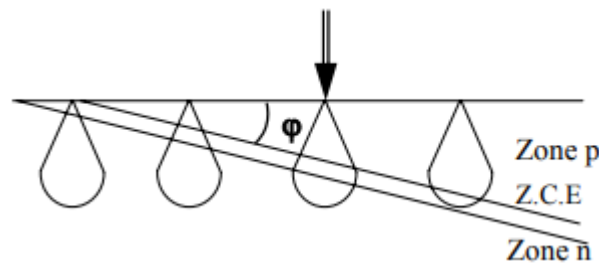
### 2.2.2.1 Excitation parallèle

Les figures (2.2-a) et (2.2-c) illustrent le cas de jonction p-n et Schottky respectivement, qui sont perpendiculaires à la surface bombardée et le balayage s'effectue sur la tranche [7]. Le courant EBIC instantané dépend de l'environnement immédiat du point d'impact. Il contient une information sur la façon dont les porteurs générés en ce point sont transportés à travers le dispositif. En effet, une partie des porteurs générés dans les zones neutres peut par diffusion arriver jusqu'à la zone de désertion, où ils se séparent sous l'effet du champ électrique qui y règne. Ils participent ainsi au courant induit. Quant aux porteurs créés dans la zone de charge d'espace, ils sont automatiquement séparés et collectés sans perte [7]. Dans cette configuration, il est donc possible de faire une mesure directe de la largeur de la zone de désertion et de sa position ainsi que d'estimer les courbures de bandes dans des jonctions ou des hétérojonctions [8]. De même, elle a été

également utilisée pour faire des mesures de la longueur de diffusion des porteurs. Malheureusement dans le cas des dispositifs amorphes, les couches sont très minces et ce mode d'utilisation de l'EBIC s'avère difficile [7].

### 2.2.2.2 Excitation en biseau

En adoptant une coupe en biseau de l'échantillon, des informations peuvent être recueillies. La largeur de la zone de charge d'espace et sa position en profondeur peuvent encore être mesurées après une correction tenant compte de l'angle d'inclinaison [8]. Dans le cas de forte recombinaison en surface cette technique peut déterminer la longueur de diffusion. Cette configuration peut aussi déterminer le profil de génération.



**Figure 2.3.** Mode EBIC avec coupe en biseau sur une jonction p-n[7].

### 2.2.2.3 Excitation perpendiculaire

Les figures (2.2-b) et (2.2-d) illustrent le cas de jonctions p-n et Schottky respectivement, qui sont parallèles à la surface de l'échantillon bombardée. Dans cette configuration, le faisceau arrive perpendiculairement à la surface du dispositif et aux plans des différentes jonction. Pour des matériaux latéralement homogènes, le courant EBIC instantané ne révèle aucun contraste avec le balayage. Cependant, en faisant varier l'énergie du faisceau incident, le parcours des électrons augmente et le volume de génération dans le dispositif s'élargit. L'évolution du courant en fonction de l'énergie renseigne ainsi sur la génération et l'évacuation des charges à travers le dispositif [7].

## 2.2.3 Application de la technique EBIC

La technique EBIC est utilisée pour la caractérisation qualitative pour s'informer sur l'activité électrique des défauts à identifier (agrégats, dislocations et joints de grains). La présence de défauts dans le volume de génération fera diminuer l'intensité du courant EBIC. L'image de ces défauts d'activité électrique apparaît en noir sur fond clair. Cependant, l'image EBIC fournit d'importantes informations quantitatives sur le processus de recombinaison au niveau de ces défauts, tels que le taux de recombinaison de surface, le taux de recombinaison des joints de grains, la longueur de diffusion, etc. Cette mesure quantitative nécessite un dispositif expérimental avec

une géométrie d'échantillon spécifique (Figure 2.2). Kitller et Seiffert [9] en parler des avantages et des inconvénients de chaque dispositif.

## 2.2.4 Détermination de la longueur de diffusion

### 2.2.4.1 Principe de la mesure

La longueur de diffusion du matériau détermine la distance parcourue par les porteurs minoritaires avant d'être recombinés.

Donc, l'étude de l'intensité du courant en fonction de la distance de scan (la distance qui sépare la jonction du point d'impact du faisceau sur le semiconducteur) permet la détermination de la longueur de diffusion. Ainsi, plusieurs modèles théoriques, ont été proposés pour estimer ce paramètre à partir de la courbe  $I_{EBIC}(x)$  [10 - 17].

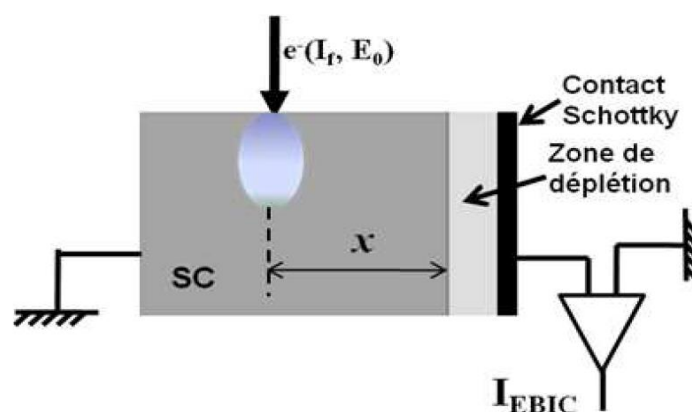
#### 2.2.4.1.1 Cas de la jonction parallèle au faisceau électronique

La variation du courant EBIC en fonction de la distance de scanne dans le cas d'une jonction parallèle au faisceau d'électrons (figure 2.4) est donnée par l'expression [10, 18,19] :

$$I_{EBIC} = G_0 \left( \frac{L_{eff}}{x} \right)^\alpha \exp\left(-\frac{x}{L_{eff}}\right) \quad (2.1)$$

$G_0=I_fQ$  représente le facteur de génération des paires électron-trou et  $L_{eff}$  la longueur effective des porteurs minoritaires.

$\alpha$  un paramètre qui varie entre -1/2 et 0,  $\alpha = -1/2$ , pour le cas d'une vitesse de recombinaison des porteurs minoritaire en surface  $v_r = \infty$  et  $\alpha = 0$  pour  $v_r = 0$



**Figure 2.4.** Montage de mesure de  $L_{eff}$  dans le cas d'une jonction Schottky parallèle au faisceau électronique [21].

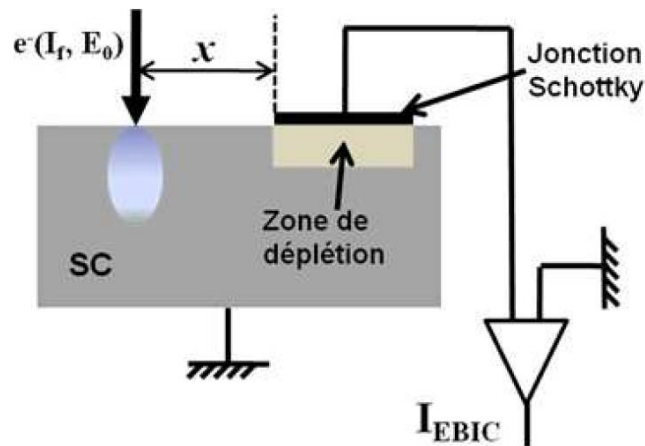


### 2.2.4.1.2 Cas de la jonction perpendiculaire au faisceau électronique

Le principe de la mesure de  $L_{eff}$  est le même que la position de la jonction par rapport au faisceau primaire qui va être changée. La figure 2.5 présente une illustration de la méthode de mesure de  $L_{eff}$  dans le cas d'une jonction Schottky perpendiculaire au faisceau incident. Le courant induit est donné dans ce cas par l'expression [17, 20]

$$I_{EBIC} = G_0 x^\alpha \exp\left(-\frac{x}{L_{eff}}\right) \quad (2.2)$$

La constante  $\alpha$  est fonction de la vitesse de recombinaison des porteurs en surface, elle est comprise entre 0.5 et 1.5 [13, 14]. La valeur  $\alpha = 0.5$  correspond à  $v_r = 0$  tandis que  $\alpha = 1.5$  correspond à  $v_r = \infty$ .



**Figure 2.5.** Montage de mesure de  $L_{eff}$  dans le cas d'une jonction Schottky perpendiculaire au faisceau électronique [21].

### 2.2.5 Contraste EBIC

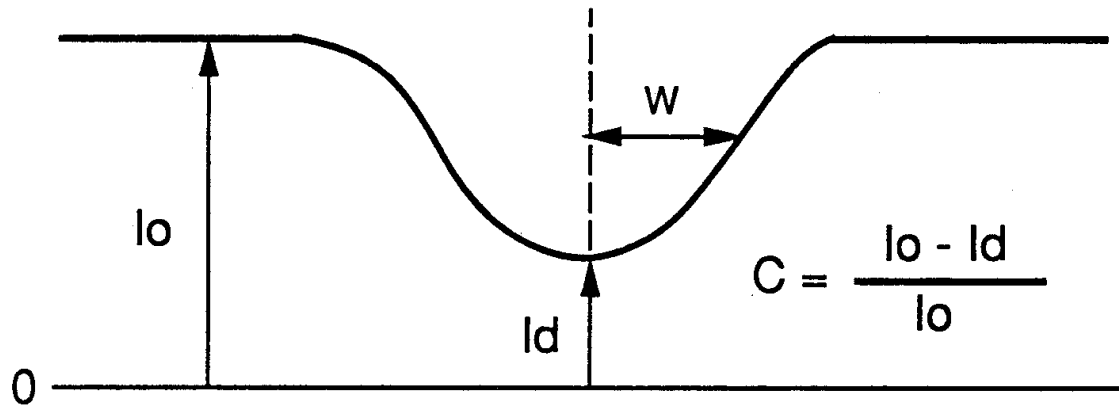
Le contraste EBIC maximum se définit comme :

$$C = (I_0 - I_d)/I_0 \quad (2.3)$$

$I_0$  est le courant EBIC en absence de défaut localisé.

$I_d$  est le courant EBIC mesuré en présence de défaut.

Ainsi  $(I_0 - I_d)$  représente la perte de courant EBIC due au défaut. La résolution  $W$  est définie comme la demi-largeur à mi-hauteur. Elle dépend principalement de la dimension du volume de génération, c'est-à-dire de la tension d'accélération  $E_0$  des électrons de bombardement. Elle est également influencée par la longueur de diffusion.



**Figure 2.6.** Schéma illustratif d'un contraste EBIC d'un défaut défini à partir du profil du courant EBIC.  $I_0$  est le courant EBIC en absence de défaut localisé.  $I_d$  le courant EBIC mesuré en présence du défaut.  $(I_0 - I_d)$  représente la perte de courant EBIC due au défaut. La résolution  $W$  est définie comme la demi-largeur à mi-hauteur de la perte de courant EBIC.

## 2.3 Méthode Monte Carlo

### 2.3.1 Principe

Le caractère aléatoire du phénomène physique de diffusion des porteurs de charge rend nécessaire l'utilisation d'une simulation numérique lors de l'étude de tels problèmes. La méthode Monte Carlo est une méthode de simulation statistique. Du fait que la vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème posé. En revanche, elle n'apporte pas de solution numérique au problème, mais une probabilité donnée. La mise en œuvre de simulations Monte Carlo pour les interactions électron-matière nécessite un traitement précis en utilisant la diffusion élastique et inélastique.

Lors de la formulation des simulations Monte Carlo, des tests minutieux doivent être effectués pour s'assurer que les calculs donnent des résultats utiles. L'adaptation des simulations Monte Carlo à des problèmes spécifiques impliquant la géométrie spécifique de l'échantillon nécessite la prise en compte de l'interaction des électrons avec la cible.

Lorsque la trajectoire de l'électron franchit la frontière, le segment de trajectoire de chaque étape doit être calculé de manière logique et progressive, ce qui permet de considérer l'interaction entre l'électron et la cible. Dans le modèle de diffusion multiple de Curgenvén et Duncumb (1971) [22], plusieurs procédures Monte Carlo décrites dans la littérature utilisent un paramètre ajustable qui fait correspondre le calcul avec des données expérimentales sélectionnées (telles que le coefficient de rétrodiffusion). Le coefficient de rétrodiffusion dépend du numéro atomique. [23]

### 2.3.2 Code CASINO

Grâce au développement des méthodes de simulation de type Monte Carlo et la progression de la théorie de l'interaction électron matière qui a permis de résoudre les problèmes relatifs au volume d'interaction qui sont difficile à obtenir expérimentalement [24]. Il existe plusieurs logiciels de simulation de cette interaction mais le plus rapide et le plus accessible sur le net est CASINO sous plusieurs versions. Le logiciel casino V2.42 et V3.3.0.4 dont l'acronyme est monte Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid parait le mieux approprié à l'étude de l'interaction électron matière [25,26].

La version V2.42 traite des simulations en 2D avec les cas couches minces et joints de grains [25]. Tandis que la version V3.3 est développée pour faire des simulations en 3D [26]. Dans ce cas, la simulation du transport d'électrons implique deux aspects computationnels.

Avec la nouvelle version CASINO qui nous permet d'utiliser une gamme d'énergie des électrons supérieur à 30 keV, qui est convenablement adaptée pour simuler les interactions électron matière solide. Elle est applicable aux cibles massives pures ou multicouches [25]. Le logiciel Casino, version 3.3.0.4, peut calculer plusieurs trajectoires lors d'une simulation [26].

La simulation d'une trajectoire d'un électron primaire peut se séparer en trois phases : la pénétration initiale de l'électron dans la cible sans subir de déviation angulaire, puis le régime permanent de diffusion et enfin, la fin de la trajectoire. Cette dernière a lieu lorsque l'énergie de l'électron incident du faisceau primaire passe en dessous d'un seuil. Les paramètres d'entrée de la simulation considérés sont les suivants :

- Le nombre d'électrons simulés : effectivement, pour avoir un résultat précis, plusieurs de trajectoires doivent être simulées. Dans notre cas, nous allons simuler 20000 électrons.
- L'énergie de l'électron : La trajectoire d'un électron ou la profondeur de pénétration maximale d'un électron dépend de son énergie. Elle varie entre 1 et 25 keV dans notre simulation.

### 2.3.3 Mode d'emploi V3.3.0.4

En premier lieu, on commence par la création d'une nouvelle simulation. Dans cette étape, on va définir les propriétés géométriques et chimiques, de la substance qu'on veut bombarder. La version V3.3.0.4 du code casino permet la définition de plusieurs formes à savoir, la sphère, le cube, la pyramide...etc. La figure 2.7 et 2.8 présentent un exemple d'un cas étudiant dans notre travail. Ensuite, On fixe les paramètres du faisceau électronique de bombardement tel que, le nombre d'électrons à simuler, le rayon du faisceau et son énergie initiale. A ce stade, nous allons spécifier ce qu'on fait un balayage du faisceau primaire ou non tel qu'il est montré sur la figure

2.9.L'étape suivante est dédiée au paramétrage des résultats tel que les distributions. On fixe aussi la méthode par laquelle le parcours électronique est calculé et aussi le système de coordonnées dans lequel la distribution de l'énergie sera exprimée (figure 2.10). En fin, la simulation est prête pour être lancée. La figure 2.11 présente un exemple de distribution qu'on peut calculer avec ce code.

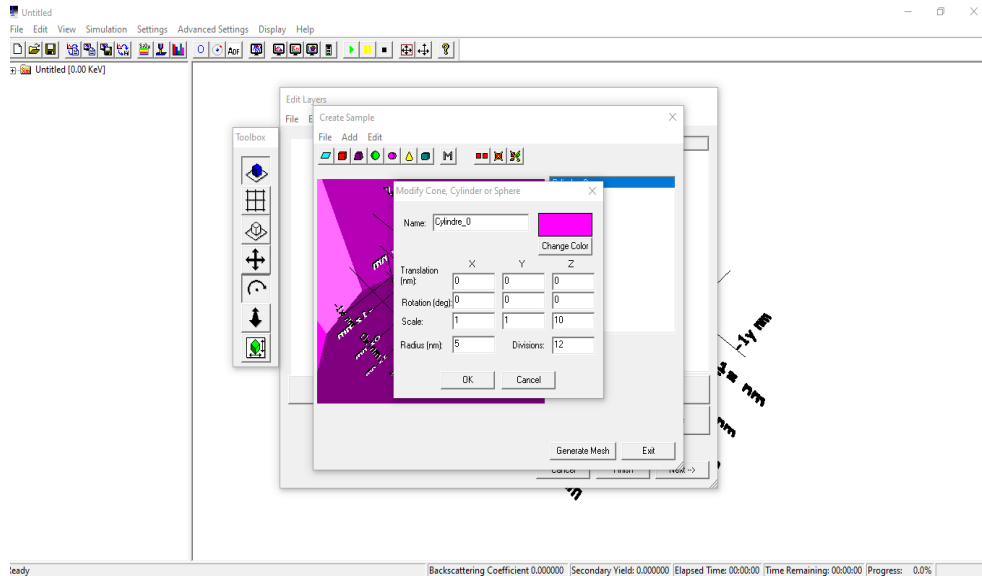


Figure 2.7. Paramétrage géométrique de l'échantillon.

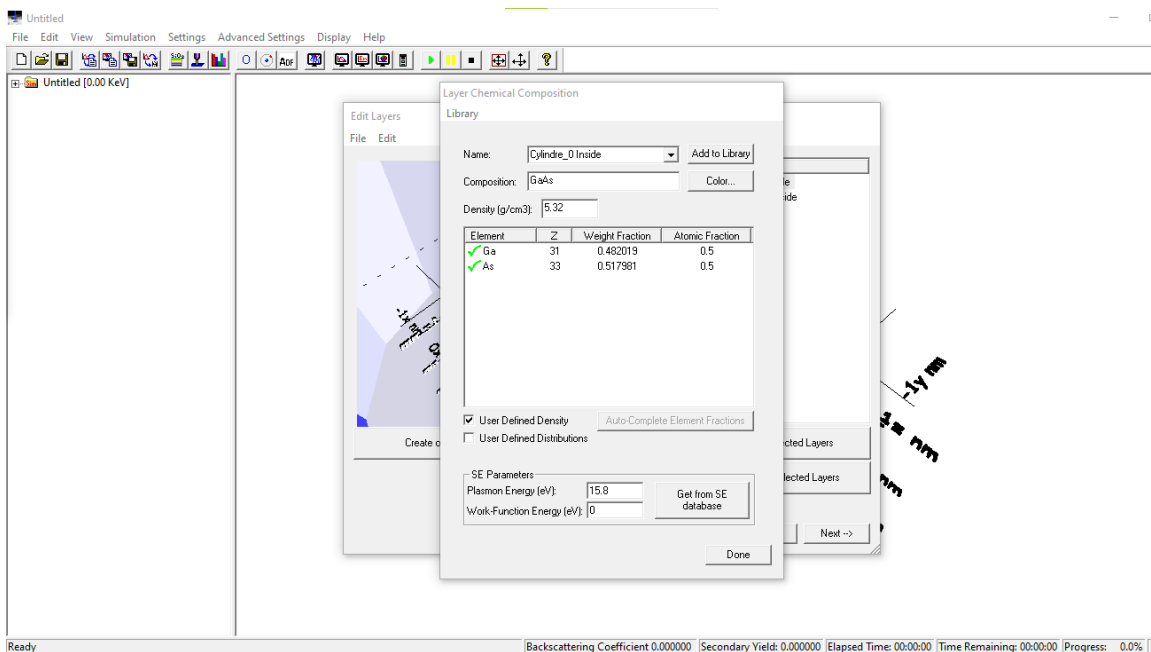


Figure 2.8. Paramétrage chimique de l'échantillon.

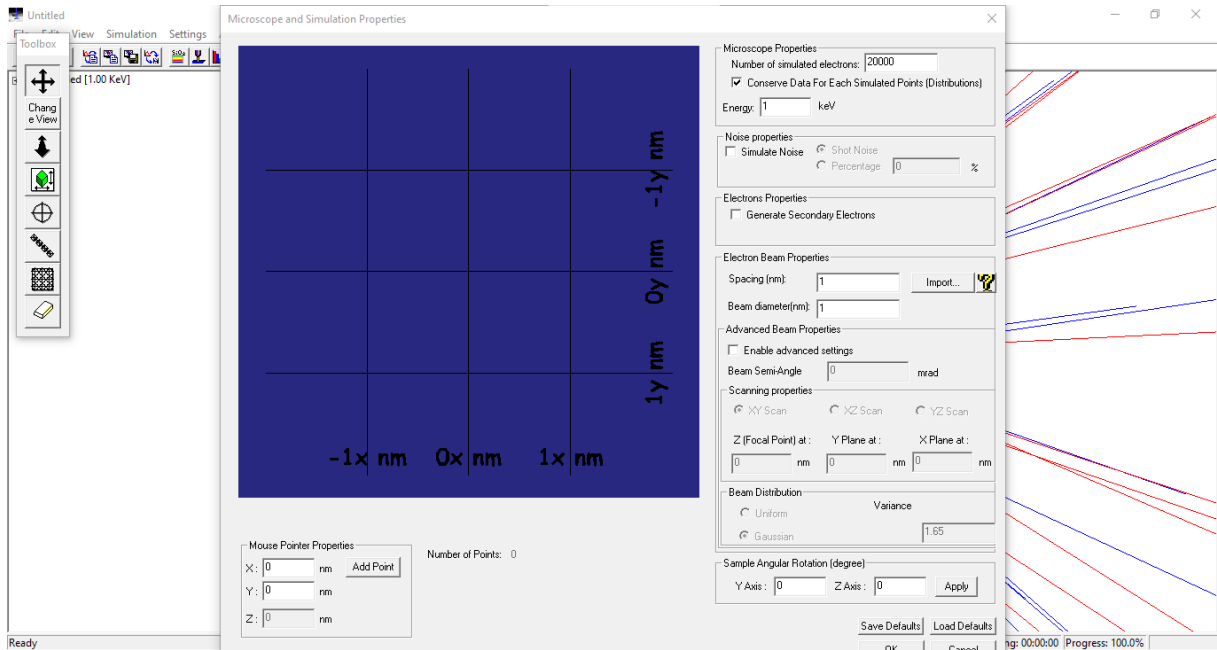


Figure 2.9. Paramétrage du faisceau primaire.

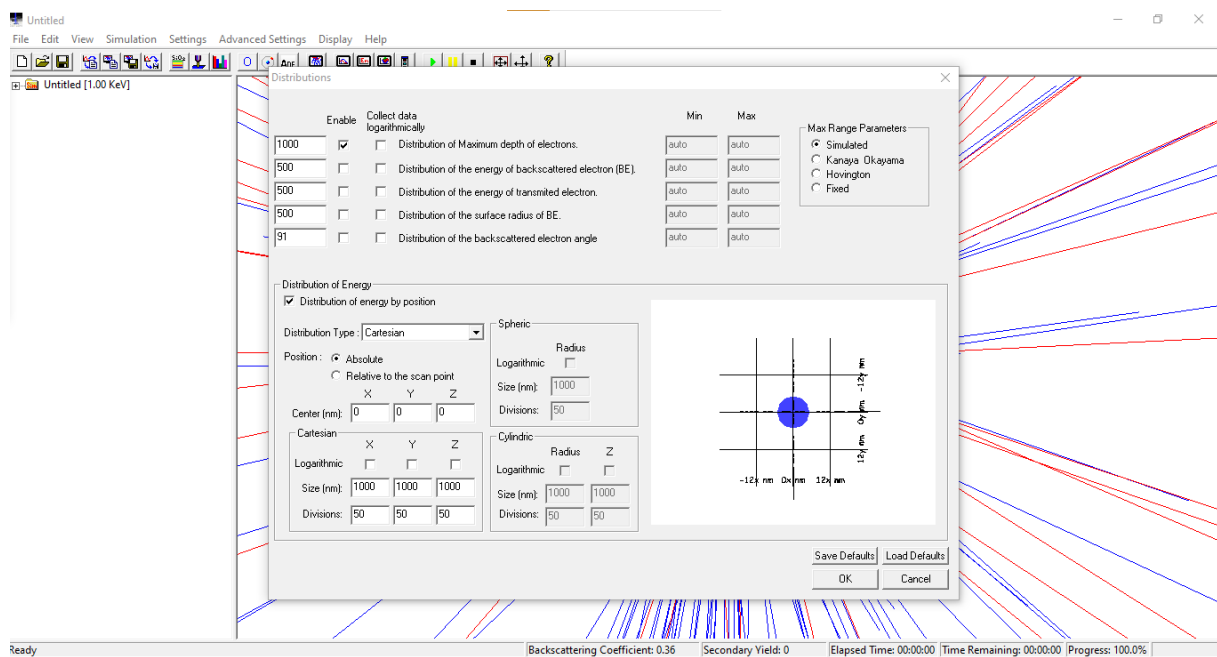
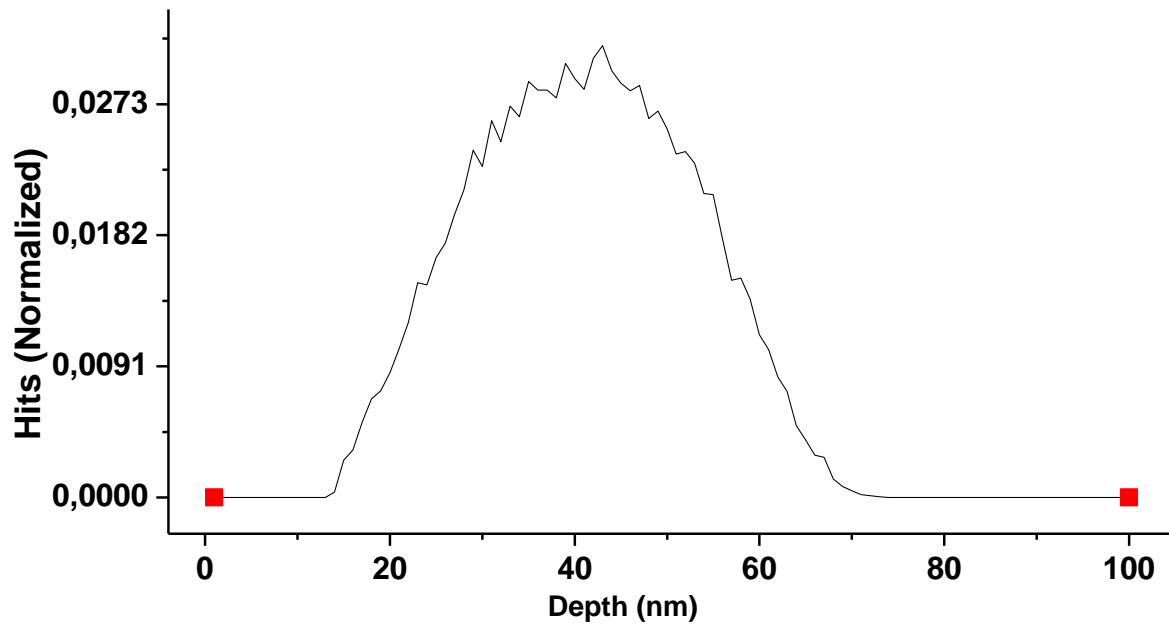


Figure 2.10. Paramétrage des résultats.



**Figure 2.11.** Exemple de variation de la distribution des électrons primaire d'énergie  $E_0=13\text{keV}$  en fonction de leur profondeur de pénétration dans un fil de rayon  $r_a=0.1\text{nm}$ .

**Références**

- [1] D. Holt, B. Yacobi, D. Joy, SEM Microcharacterization of semiconductors, Academic Press, London 373 (1989).
- [2] R. Platt, Science 129, 372 (1959)
- [3] H. Shirakawa, E.J. Louis, A.G. Macdiarmid, C.K. Chiang, A.J. Heeger, J. Chem. Soc. Chem. Commum.16, 578 (1977).
- [4] K. Miyajima, L. Balk, Journal of physics D: Applied Physics 28, 914 (1995).
- [5] M. Romero, D. Araujo, R. Garcia, Materials Science and Engineering: B 42, 172 (1996).
- [6] H.J. Lemy, J. Appl. Phys. 53, R51 (1981).
- [7] A. Nouiri, Thèse de doctorat d'état, université de Constantine (2000).
- [8] N. C. Macdonald, T.E. Everhart, Appl. Phys. Lett. 7, 267 (1965).
- [9] M. Kittler and W. Seiffert, Rev. Phys. Appl. Coloque C6, Suppl. 6, 24, 31(1989).
- [10] C. Donolato, Solid State Electronics 28,1143 (1982).
- [11] C. Donolato, IEEE Trans. Electron Devices 31, 121 (1984).
- [12] F. Berzet, H.K. Kuiken, Solid State Electronics 19, 437 (1976).
- [13] J. Boersma, J.J.E. Indenkleef and H.K. Kuiken, Journal Engineering Math.18, 315 (1984).
- [14] D.E. Ioannou and C.A. Dimitriadis, IEEE Trans. Electron Devices 29, 445 (1982).
- [15] H.K. Kuiken and C.V. Odorp, J. Appl. Phys. 57, 2077 (1985).
- [16] D. Cavalcoli, A. Cavallini and A. Casaldini, J. Appl. Phys. 70, 2163 (1991).
- [17] C. Donolato, Solid State Electronics 28, 1143 (1985).
- [18] D.K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization, 760 (1998).
- [19] S.Q. Zhu, E.I. Rau and F.H. Yang, Semiconductor Science and Technology 18, 361 (2003).
- [20] A. Boudjani, Semiconductor Science and Technology 20, 175 (2005).
- [21] Y. Beggah, thèse de magister, université de Constantine, (1994).
- [22] L. Curgenvén and P. Duncumb, Tube Investments Res. Rep. No. 303 (1971).

- [23] Electron Beam Interactions With Solids for Microscopy, Microanalysis and Microlithography, SEM, Inc., AMF O'Hare (Chicago), IL 60666, U.S.A, 153 (1982).
- [24] P. Sigmund, Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets, Phys. Rev. 184 (1969)
- [25] D. Drouin, A.R. Couture, D. Joly, X. Tastet, V. Aimez and R. Gauvin, Scanning 29, 92 (2007).
- [26] H. Demers, N.P. Demers, A.R. Couture, D. Joly, M. Guilmain, N. de Jonge and D. Drouin, Scanning 33, 135 (2011).
- [27] A. Lahreche Thèse de Doctorat, Université de Jijel (2014).



---

## Chapitre 3. Modélisation, simulation et résultats

---

### 3.1 Introduction

La modélisation du signal EBIC dépend principalement de la distribution et de la diffusion des porteurs de charges générés suite au bombardement d'un semiconducteur par un faisceau électronique de quelques kilos électron volt d'énergie. Initialement, la génération de ces porteurs se produit dans une région appelée le volume de génération. La taille de ce volume est estimée à partir d'une relation mathématique appelée le parcours électronique (une formule donne la pénétration maximale des électrons primaires dans le volume du semiconducteur en fonction de l'énergie de bombardement). Dans la littérature, plusieurs expressions ont été proposées pour définir ce paramètre. Ces dernières ont été déduites à partir des études faites sur des matériaux massifs. Leur domaine de validité varie entre 5 et 50 kV [1]. Tandis-que la distribution initiale des porteurs générés est modélisée par une fonction mathématique appelée la fonction de génération. Cette fonction est obtenue soit par une étude expérimentale (qui est souvent une étude difficile à réaliser) ou par la simulation Monte Carlo. L'effet de ces deux paramètres sur la modélisation du signal EBIC pour le cas des semiconducteurs massifs a été largement étudié [2-7].

Avec le développement du MEB, il est devenu possible d'appliquer la technique EBIC pour caractériser des composants électroniques de taille sub-microscopique [8-10], en particulier, les cellules solaires à base de nano fils semiconducteurs [11-23].

Pour avoir une bonne extraction des paramètres électriques visée par cette technique, il est important de modéliser le signal EBIC par un modèle mathématique qui tient compte de la géométrie du composant en particulier la présence des bornes.

Pour le cas des nano fil, des énergies de bombardement inférieures à 5kV sont souvent utilisées. Par conséquent, l'estimation de la taille de la poire de génération à partir des expressions existantes du parcours électronique est suspectée.

Dans ce qui suit, nous allons utiliser la méthode Monte Carlo pour déterminer les trajectoires des électrons primaires et leur dissipation énergétique dans un fil semiconducteur. En connaissant ces deux paramètres, nous allons construire un parcours électronique et une fonction de génération pour le cas de ces semiconducteurs. Cette étude sera principalement portée sur deux matériaux, le GaAs et le Si. En Outre, pour combler le manque des modèles théoriques qui décrivent le signal EBIC issu des jonctions nano fil, nous allons proposer un modèle mathématique pour décrire le signal EBIC d'une jonction p-n filiforme. L'effet du choix de la relation du parcours

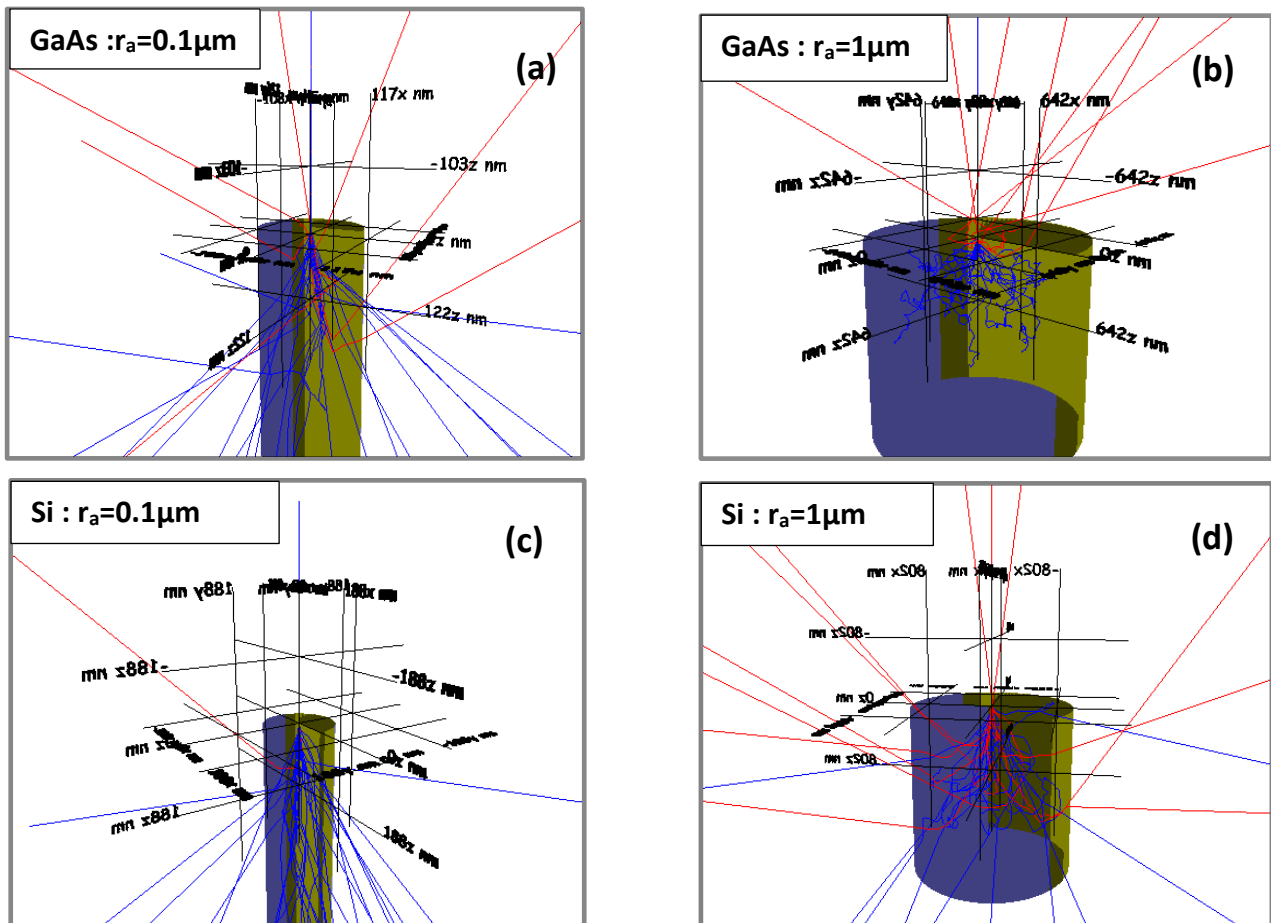
électronique et de la fonction de génération sur la formation du signal EBIC sera mis en évidence. En fin, un fit des profils EBIC expérimentaux pour déterminer la longueur de diffusion sera donné.

### 3.2 Détermination du parcours électronique et de la fonction de génération de paires électron trou

#### 3.2.1 Parcours électronique

La profondeur de pénétration des électrons primaires (le parcours électronique) est un paramètre pertinent lors de l'étude des interactions électron-matière, car il nous renseigne sur la taille du volume d'interaction.

Dans la littérature, toutes les expressions mathématiques proposées pour estimer ce paramètre ont été déduite à partir des études faites sur les matériaux massifs [24-26]. Dans ce genre de matériaux, l'effet de bornes (discontinuité de la matière) ne pose pas de problème, ce qui n'est pas le cas pour les matériaux de forme fil par exemple.



**Figure 3.1.** Trajectoires des électrons primaires accélérés avec une énergie  $E_0 = 15\text{keV}$  dans un fil de longueur  $h = 2 \mu\text{m}$  et de rayon  $r_a = 0.1 \mu\text{m}$  et  $r_a = 1 \mu\text{m}$ . GaAs (a, b), Si (c, d).

Les trajectoires des électrons de bombardement dans la matière ont un caractère aléatoire (des lignes brisées) à cause des interactions élastiques et inélastiques de ces derniers avec les atomes de la substance. Donc, pour le cas d'un matériau filiforme, on s'attend à avoir des électrons primaires qui vont quitter sa paroi latérale avec des grandes énergies au lieu de continuer leur pénétration dans le volume du matériau.

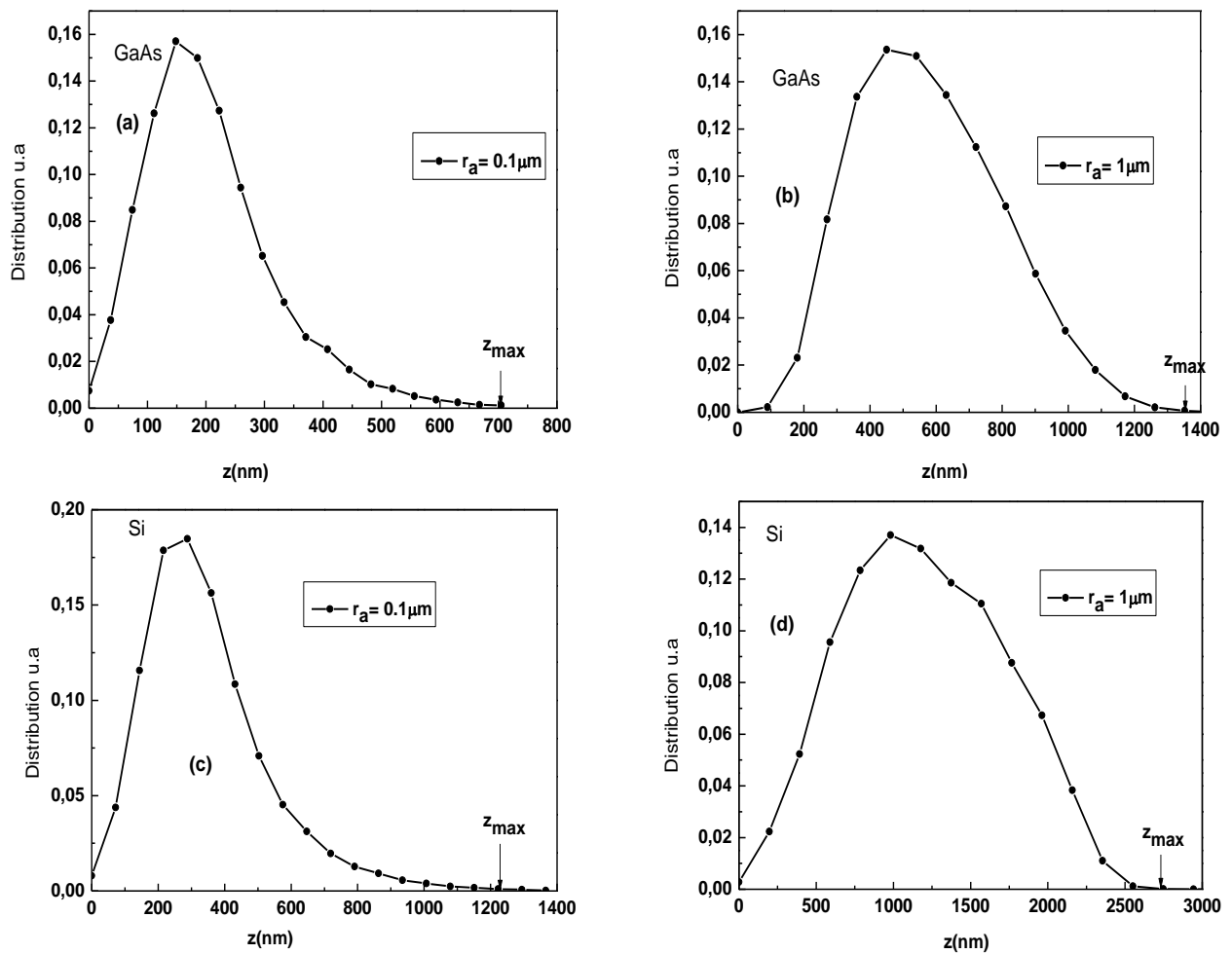
La figure 3.1 représente un exemple des trajectoires des électrons primaires accélérés (30 électrons) à une énergie de 15 keV dans le volume d'un fil de GaAs (a, b) et de Si (c, d) pour deux différentes valeurs de rayon du fil ( $r_a=0.1 \mu\text{m}$  et  $r_a=1 \mu\text{m}$ ).

Les lignes rouges représentent les trajectoires des électrons rétrodiffusés, les lignes bleues représentent les trajectoires des électrons absorbés et des électrons transmis. Pour le cas de faibles valeurs de  $r_a$ , en plus des électrons rétrodiffusés, un nombre important d'électrons quittent le fil à travers sa paroi latérale avec des énergies importantes. Plus  $r_a$  augmente le nombre de ces électrons diminue. La profondeur de pénétration des électrons primaires dépend de  $r_a$ , ce qui rend son estimation à l'aide des relations classiques (1.12) inapplicable.

Pour déterminer le parcours électronique, il faut d'abord déterminer la profondeur de pénétration des électrons primaires dans le volume du semiconducteur pour chaque valeur d'énergie de bombardement.

Ensuite, nous allons suivre la même approche suivie par Kanaya et Okayma [24], c-à-dire on considère que le parcours électronique est égal à la profondeur de pénétration maximale des électrons de bombardement.

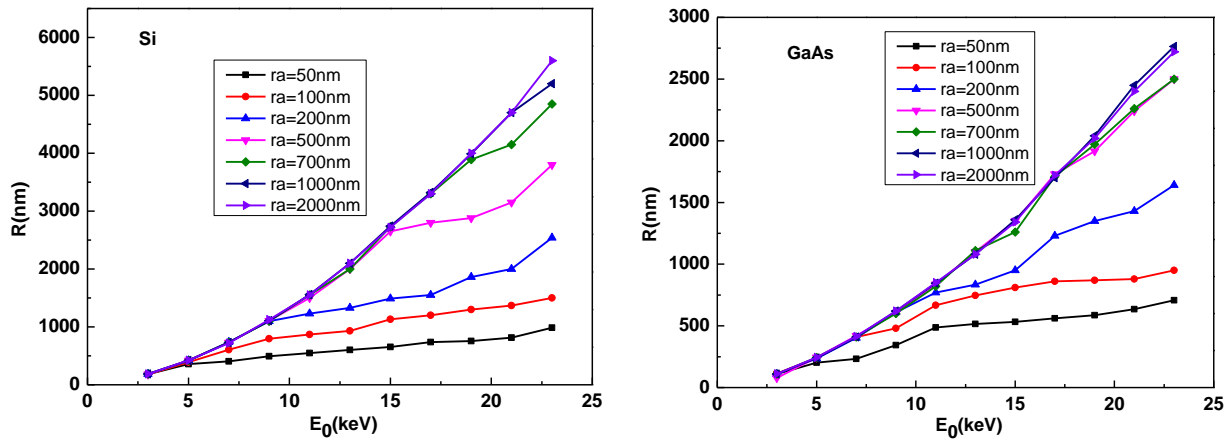
La pénétration maximale est déterminée à partir du tracé de la distribution des électrons primaires en fonction de leur profondeur de pénétration. Cette distribution est obtenue par la simulation Monté Carlo en utilisant le logiciel casino [27]. D'après la figure 3.1, la profondeur de pénétration varie avec le paramètre  $r_a$ . La figure 3.2 présente la distribution des électrons primaires accélérés à 15 keV en fonction de leurs profondeurs de pénétration pour  $r_a=0.1 \mu\text{m}$  et  $r_a=1 \mu\text{m}$ .



**Figure 3.2.** Distribution des électrons primaires en fonction de leurs profondeurs de pénétration.

La pénétration maximale  $z_{\text{max}}$  dépende de  $r_a$  pour les deux cas étudiés. Elle est pratiquement le double si  $r_a$  passe de 0.1 à  $1 \mu\text{m}$ . Cette différence est due au caractère diffusif de l'interaction des électrons primaires avec les atomes de la cible. Lorsque  $r_a$  est petit la plupart des électrons atteint la surface latérale du fil et le quitte avec des énergies importantes.

Pour avoir une idée sur la dépendance de la profondeur de pénétration  $R$  avec  $E_0$  et  $r_a$  on a varié l'énergie de bombardement de 1 keV jusqu'à 25 keV pour différentes valeurs de  $r_a$ . Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 3.3.



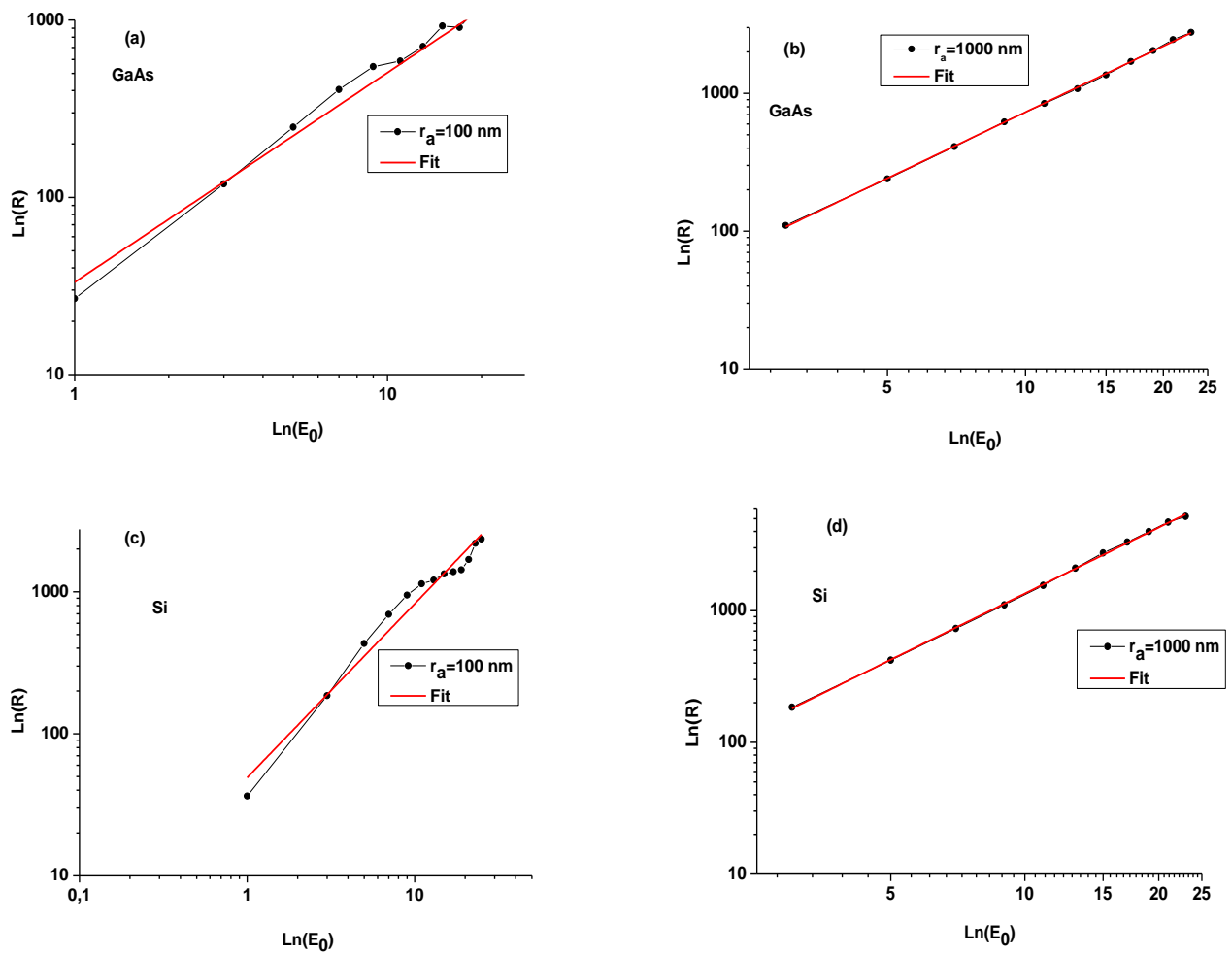
**Figure 3.3.** Variation de  $R$  en fonction de  $E_0$  pour différentes valeurs de  $r_a$  pour le cas de Si et de GaAs.

La profondeur de pénétration augmente avec l’augmentation de l’énergie de bombardement et avec l’augmentation de  $r_a$ .

Pour chercher la relation qui relie  $R$  avec  $E_0$ , nous considérons que  $R$  est relié à  $E_0$  par une relation de forme  $R = \beta(r_a)E_0^{\alpha(r_a)}$ .

En traçant  $\ln(R) = \ln(E_0)$  on peut déterminer les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  par une régression linéaire (figure 3.4).

Les résultats montrent que les valeurs de  $\beta$  et de  $\alpha$  dépendent du rayon du fil. Le paramètre  $\alpha$  augmentent avec l’augmentation de ce dernier jusqu’à une valeur où il devient indépendant de ce paramètre. Tandis-que,  $\beta$  diminue avec l’augmentation de  $r_a$ . Pour le cas des petites valeurs de  $r_a$ , les valeurs obtenues de  $\alpha$  et de  $\beta$  sont différentes de ceux obtenues pour les matériaux massifs [24-26]. Avec l’augmentation de  $r_a$ , les valeurs de  $\alpha$  et de  $\beta$  se rapprochent de ceux obtenues pour les matériaux massifs.



**Figure 3.4.** Fit du  $\text{Ln}(R)$  en fonction de  $\text{ln}(E_0)$  pour le cas d'un fil de GaAs (a,b) et de Si (c,d).

La dépendance des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  avec  $r_a$  est due au caractère dispersif des électrons primaires dans le volume (trajectoire brisées) où certains électrons (voire tous, si  $r_a$  très petit) atteignent la surface latérale du fil est le quitte avec une tension d'accélération suffisamment grande qui, en principe lui permette de continuer sa pénétration dans le matériau. Les valeurs obtenues de  $\alpha$  et de  $\beta$  en fonction  $r_a$  sont récapitulées dans le tableau 3.1.

Tableau 3.1. Fit des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  pour différentes valeurs de  $r_a$ .

$r_a(\text{nm})$	GaAs		Si	
	$\alpha$	$\beta$	$\alpha$	$\beta$
50	0,9	0,26117	0,72	0,36059
100	1,01	0,26688	0,97	0,32956
200	1,3	0,2181	1,19	0,30422
500	1,45	0,18924	1,49	0,24399
700	1,55	0,18272	1,63	0,22113
1000	1,6	0,17777	1,67	0,21491
2000	1,6	0,18118	1,68	0,2128

Pour trouver une relation mathématique qui relie  $\alpha$  et  $\beta$  avec  $r_a$ , nous traçons  $\alpha$  en fonction de  $r_a$  et  $\beta$  en fonction de  $r_a$ , en suit nous procédons à un fit pour déterminer une loi de variation (figure 3.5).

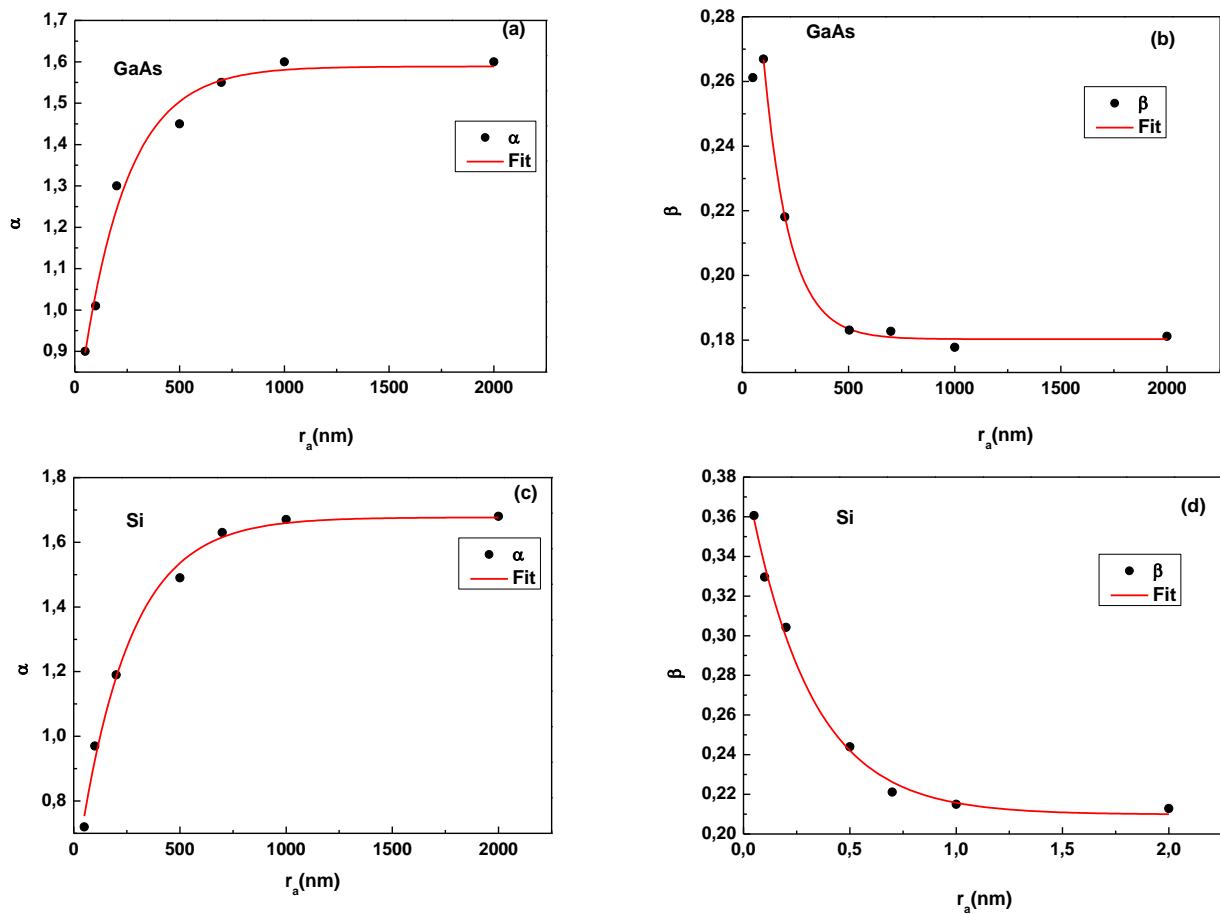


Figure 3.5. La dépendance de  $\alpha$  et  $\beta$  en fonction du rayon du fil pour le GaAs (a, b) et le Si (c, d). La ligne rouge représente le fit.

En fin, la relation entre la profondeur de pénétration des électrons primaires et l'énergie de bombardement pour le cas d'un fil semiconducteur peut se mettre sous la formule :

$$R = \beta(r_a)E_0^{\alpha(r_a)} \quad (3.1)$$

$$\alpha(r_a) = a - b \times c^{r_a} \quad (3.1.a)$$

$$\beta(r_a) = a' - b' \times c'^{r_a} \quad (3.1.b)$$

Avec

$a = 0.016$ ,  $b = -0.13$ ,  $c = 0.005$ ,  $a' = 1.67$ ,  $b' = 1.33$  et  $c' = 0.026$  pour le cas de GaAs

$a = 0.015$ ,  $b = -0.11$ ,  $c = 0.025$ ,  $a' = 1.78$ ,  $b' = 1.2$  et  $c' = 0.17$  pour le cas de Si

### 3.2.2 Fonction de génération des paires électron-trou

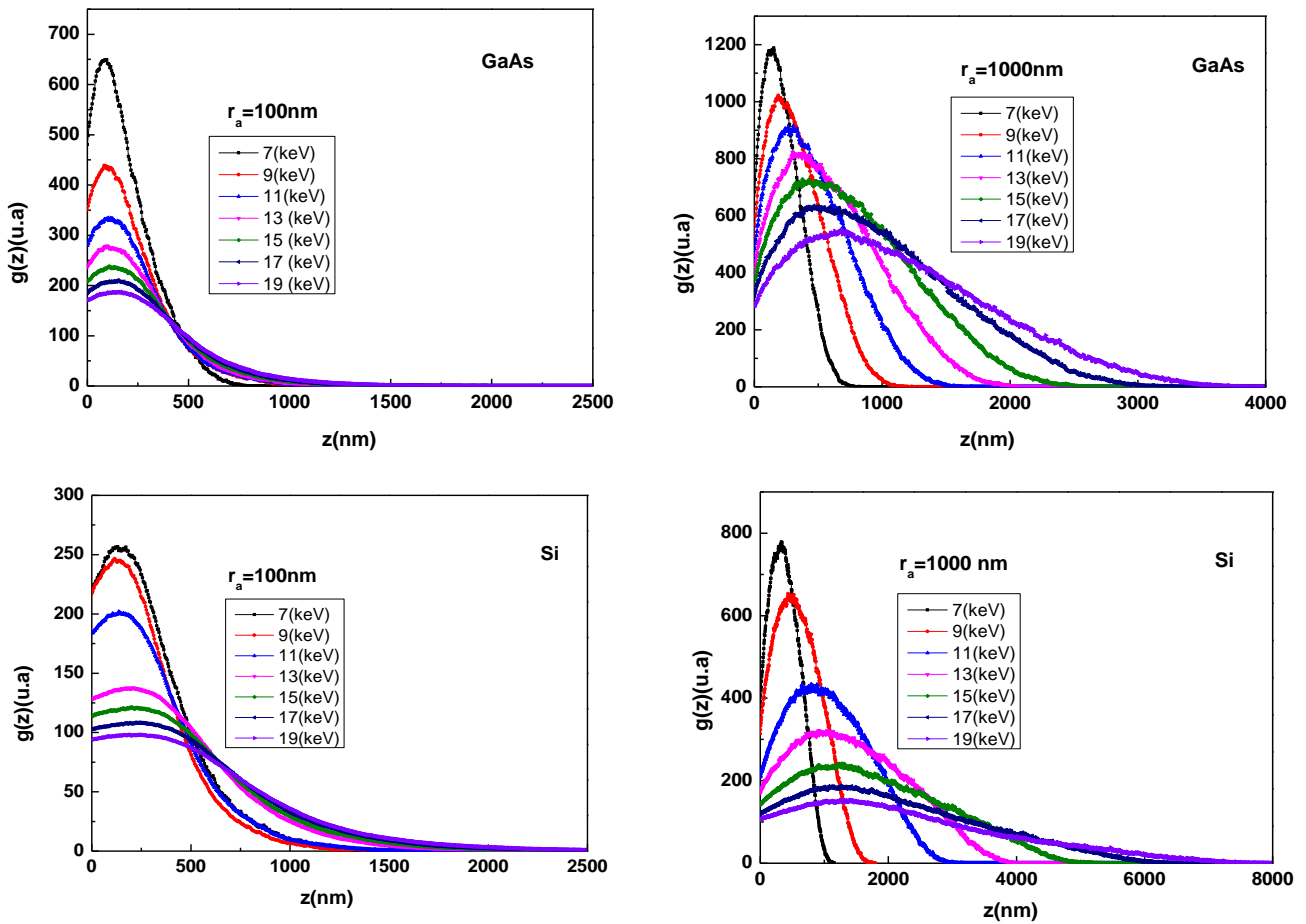
D'après la relation (1-23), la fonction de génération est reliée directement à la fonction de dissipation de l'énergie des électrons primaires. Donc, la variation de la fonction de génération et la variation de la dissipation de l'énergie sont identiques.

Pour pouvoir déterminer l'expression mathématique de la fonction de génération des paires électron-trou (EHP) dans le fil, on doit d'abord trouver la distribution de l'énergie dissipée des électrons primaires en tous points dans le fil. Cette tâche est accomplie en utilisant le code CASINO. En assumant que la génération des EHP est directement proportionnel à la perte d'énergie [28-30]. La distribution normalisée de la perte d'énergie est prise égal à la distribution normalisée des EHP générées. Avec cette supposition nous avons trouvé la distribution des EHP générées en tout point M (r,  $\theta$ , z) dans le fil.

La sommation de cette distribution suivant  $\theta$  donne la distribution des EHP dans le plan (r, z), noté g (r, z). Ensuite, la sommation de g(r,z) suivant r donne la distribution des EHP générées suivant la direction z noté g(z) et la sommation de g(r,z) suivant z donne la distribution des EHP générées suivant r noté g(r).

Les distributions des EHP g(z) et g(r) sont déterminées pour différentes valeurs  $E_0$  et de  $r_a$ .

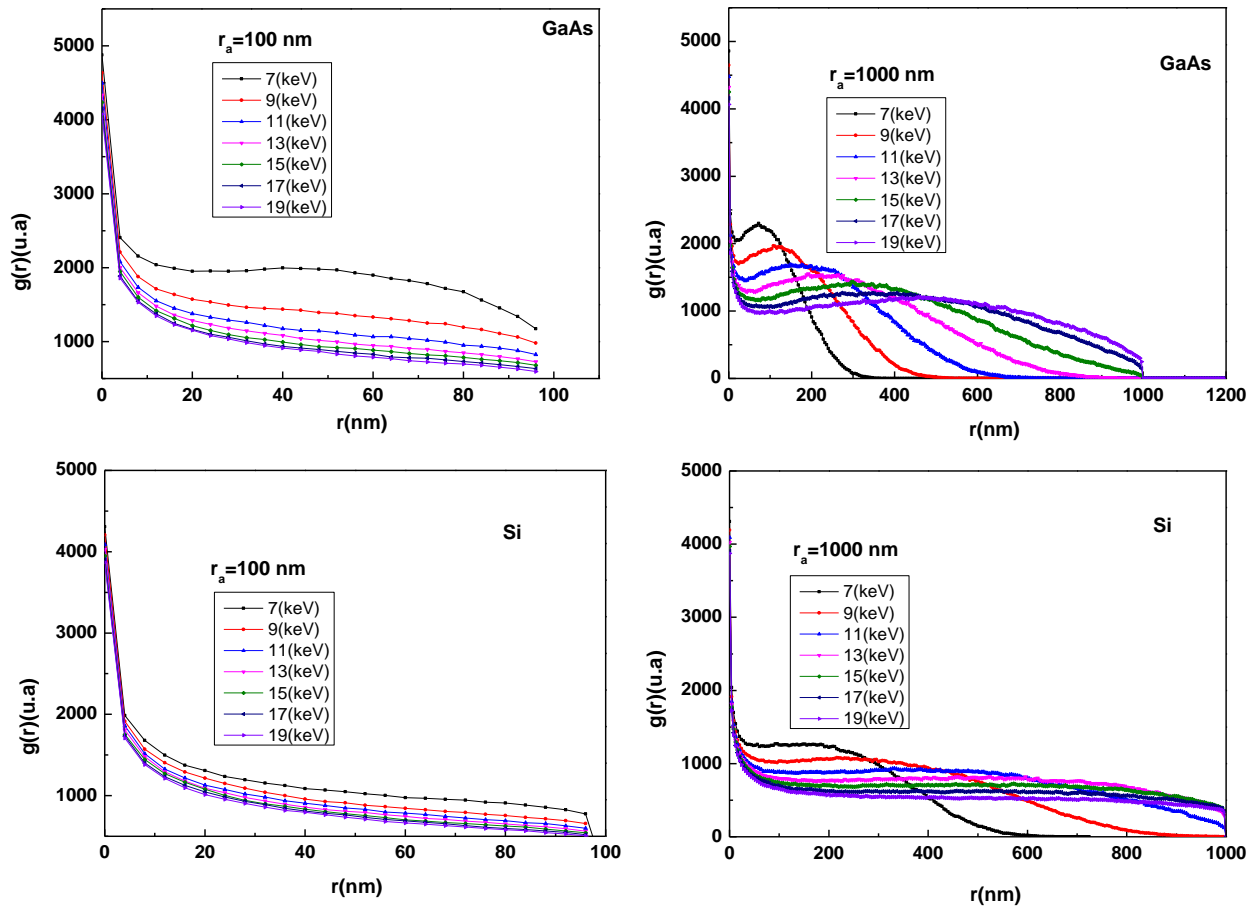




**Figure 3.6.** Variation de distribution des paires électron-trou en fonction de la profondeur de pénétration pour différentes valeurs de  $E_0$ . Pour  $r_a=100\text{nm}$  et  $r_a=1000\text{nm}$ .

La figure 3.6, représente un exemple de la variation de  $g(z)$  suivant  $z$  pour le cas de GaAs et de Si avec  $r_a=100\text{nm}$  et  $r_a=1000\text{nm}$ . La figure 3.7 la variation de  $g(r)$  en fonction de  $r$  pour le cas d'un fil de GaAs et de Si avec les mêmes conditions.

Les fonctions  $g(r)$  et  $g(z)$  dépendent de  $E_0$  et de  $r_a$  pour les cas étudiés. Le taux de génération des EHP pour le fil de rayon  $r_a=100\text{nm}$  est plus faible en le comparant au cas du fil de rayon  $r_a=1000\text{nm}$ , puisque pour le cas des petites de  $r_a$ , les électrons primaires quittent le fil avec des énergies suffisamment grandes pour générer d'autre EHPs. En plus, l'extension spatiale de  $g(z)$  et  $g(r)$  varie avec la variation de  $r_a$  ceci qui est en accord avec le résultat obtenu pour le cas du parcours électronique.



**Figure 3.7.** La distribution latérale des paires électron-trou pour différentes valeurs d'énergie. Pour  $r_a=100\text{nm}$  et  $r_a=1000\text{nm}$ .

Pour déterminer la fonction de génération dans le fil, nous considérons que cette fonction peut se mettre sous la forme d'un produit de deux fonctions  $g(r, z) = g(r) \cdot g(z)$ .

Avec,  $g(r) = A \cdot r^2 \exp\left(-\frac{r}{\sigma_r}\right)$  et  $g(z) = B \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)$ .

Donc,  $g(r, z)$  s'écrira :

$$g(r, z) = C \cdot r^2 \exp\left(-\frac{r}{\sigma_r}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) \quad (3.2)$$

$C$  le facteur de normalisation est donné par la relation

$$C = \frac{2}{\sqrt{\pi} \left( 6\sigma_r^4 - e^{-\frac{r_a}{\sigma_r}} \sigma_r (r_a^3 + 3r_a^2\sigma_r + 6r_a\sigma_r^2 + 6\sigma_r^3) \right) \sigma_z \text{Erf}\left[\frac{h}{\sigma_z}\right]} \quad (3.3)$$

Les paramètres  $\sigma_r$  et  $\sigma_z$  sont déterminés à partir d'une régression linéaire du tracé  $\text{Ln}\left(\frac{g(r)}{r^2}\right)$  en fonction de  $r$  et du tracé de  $\text{Ln}(g(z))$  en fonction de  $z^2$  respectivement. Cette régression est appliquée pour chaque valeur d'énergie entre 3 et 20 keV et pour chaque valeur de  $r_a$  entre 0.05 et  $5\mu\text{m}$ . Un exemple de fit pour déterminer ces deux paramètres est présenté sur la figure 3.8 pour le cas d'un fil de rayon  $r_a=5\mu\text{m}$  et une énergie de bombardement  $E_0=9\text{keV}$ . Les valeurs  $\sigma_r$  et  $\sigma_z$  obtenues pour chaque énergie sont présentées sur la figure 3.9 et 3.10 pour le cas d'un fil de rayon  $r_a=5\mu\text{m}$  et  $r_a=1\mu\text{m}$  respectivement.

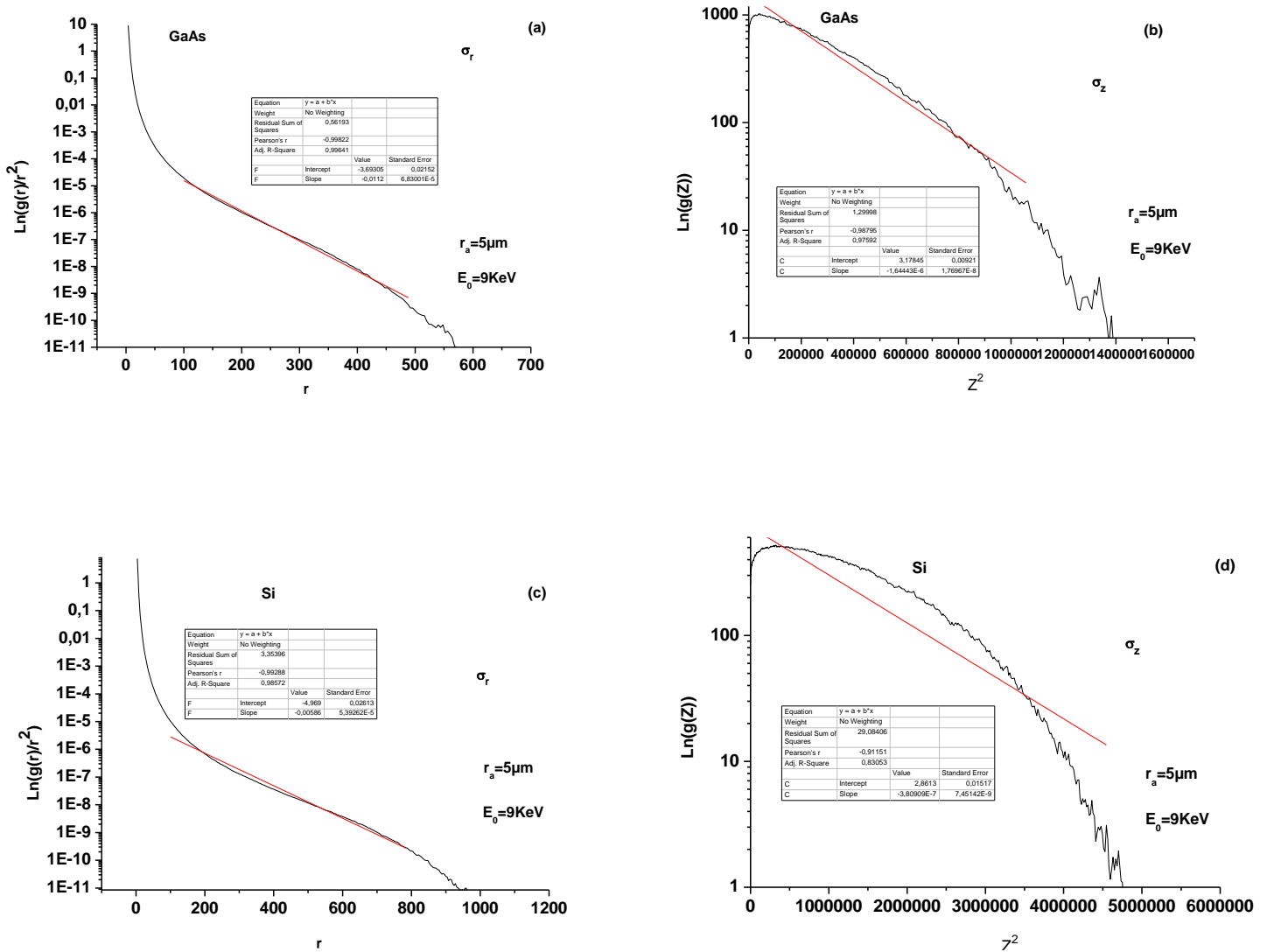


Figure 3.8. Fit du  $\text{Ln}(g(Z))$  en fonction de  $z^2$  et  $\text{Ln}(g(r)/r^2)$  en fonction de  $r$  pour le cas d'un fil du GaAs (a,b) et Si (c,d).

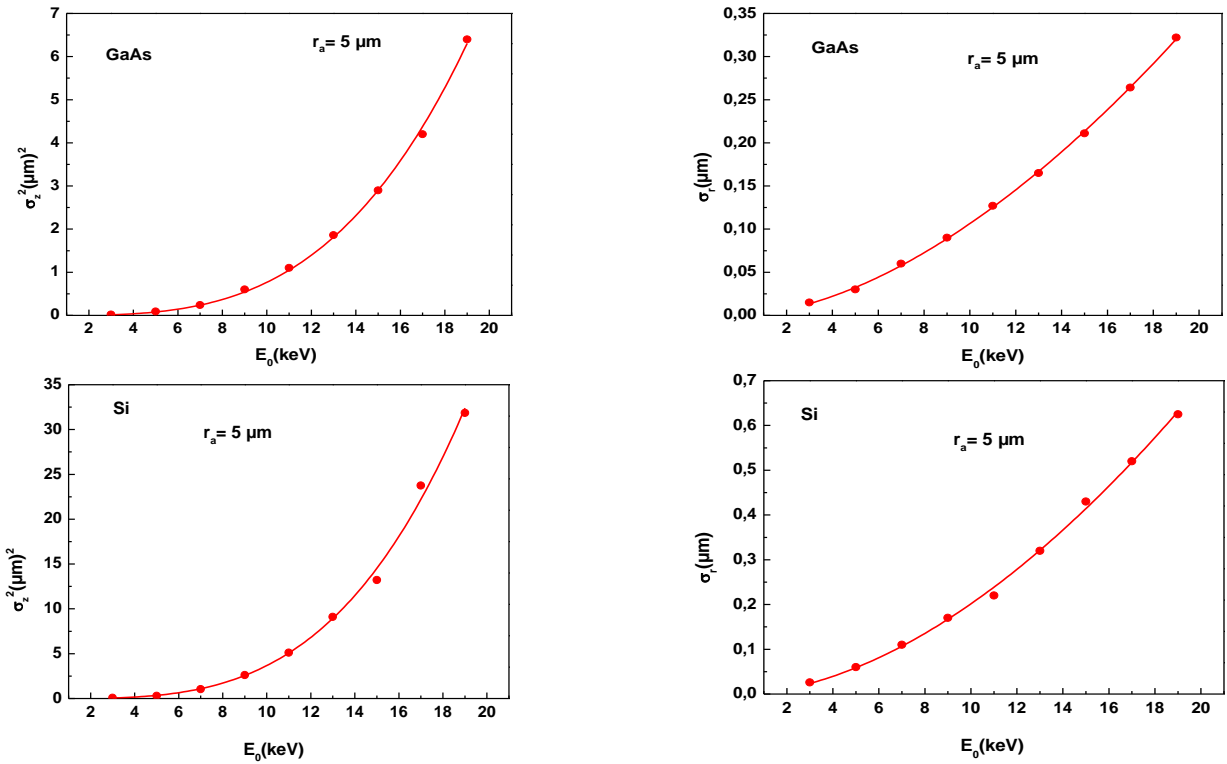


Figure 3.9. Variation de  $\sigma_r$  et  $\sigma_z^2$  en fonction de  $E_0$  pour le cas d'un fil de GaAs et de Si pour  $r_a=5\mu\text{m}$ .

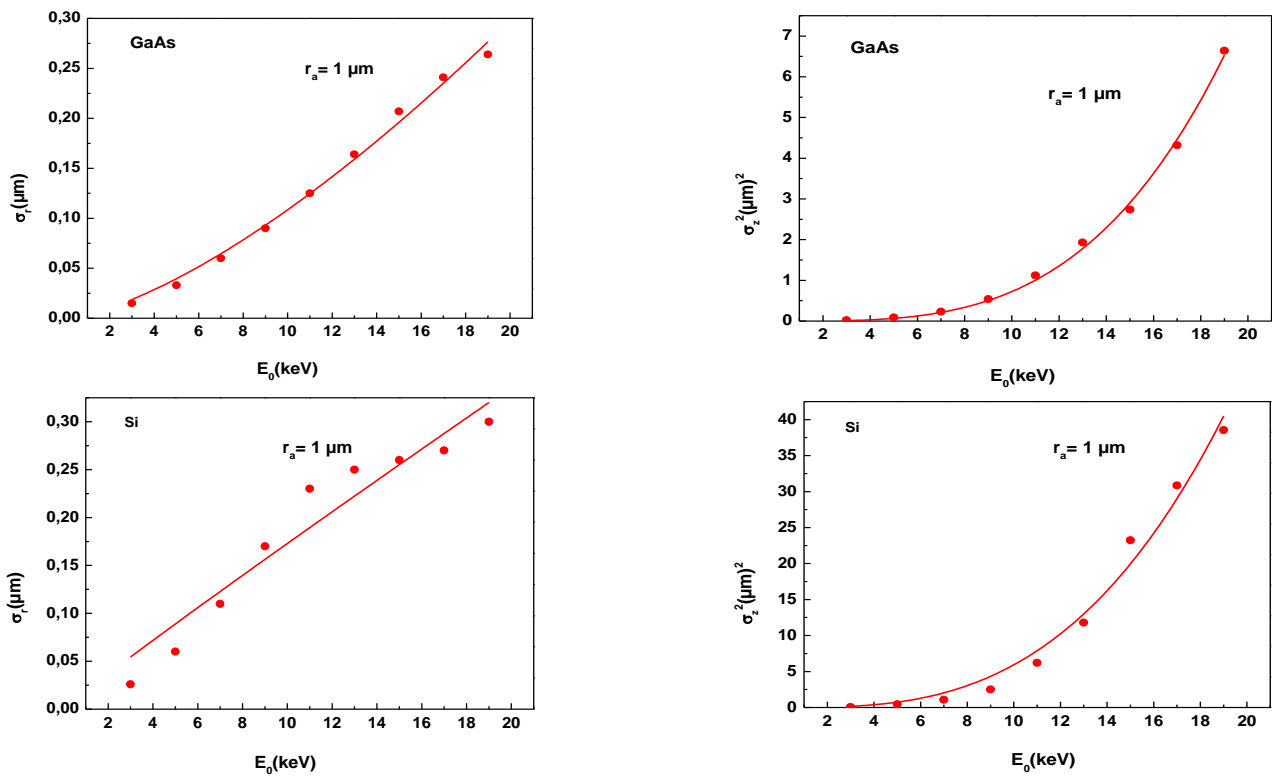


Figure 3.10. Variation de  $\sigma_r$  et  $\sigma_z^2$  en fonction de  $E_0$  pour le cas d'un fil de GaAs et de Si pour  $r_a=1\mu\text{m}$ .

Les résultats montrent que  $\sigma_z^2$  et  $\sigma_r$  dépendent de  $E_0$  et de  $r_a$ . On fonction de  $E_0$ , la variation de  $\sigma_z^2$  et  $\sigma_r$  est une fonction croissante de type  $a E_0^b$ . Ceci est expliqué par le fait que lorsque  $E_0$  augmente, la taille du lieu spatial où EPH sont générées augmente aussi. La variation de ces deux paramètres en fonction de  $E_0$  est présentée sur les figures 3.9 et 3.10. Le fit de la courbe permet la détermination des paramètres  $a$  et  $b$ . Les principaux résultats du fit de  $\sigma_r$  et  $\sigma_z$  sont présentés dans le tableau 3.2 pour le GaAs et le tableau 3.3 pour le silicium.

**Tableau 3.2.** Fit de la variation de  $\sigma_z^2$  et  $\sigma_r$  pour le cas de GaAs.

$r_a(\mu\text{m})$	GaAs			
	$\sigma_z^2$		$\sigma_r$	
	$a$	$b$	$a'$	$b'$
0,05	0,009	1,42	0,008	0,2
0,1	0,01	1,64	0,009	0,3
0,3	0,002	2,66	0,01	0,7
0,5	4,8E-4	3,24	0,01	0,9
1	2,7E-4	3,42	0,003	1,45
3	2,69E-4	3,42	0,002	1,69
5	4E-4	3,28	0,002	1,72

**Tableau 3.3.** Fit de la variation de  $\sigma_z^2$  et  $\sigma_r$  pour le cas de Si.

$r_a(\mu\text{m})$	Si			
	$\sigma_z^2$		$\sigma_r$	
	$a$	$b$	$a'$	$b'$
0,05	0,048	1,32	0,049	0,31
0,1	0,049	1,47	0,05	0,2
0,3	0,05	1,65	0,05	1,5
0,5	0,016	2,14	0,02	1,55
1	0,006	3,26	0,01	1,6
3	0,0017	3,38	0,004	1,68
5	0,0015	3,39	0,003	1,7

Pour déterminer la loi de la variation des paramètres a et b en fonction de  $r_a$ , on a tracé la variation de ces deux paramètres en fonction de  $r_a$ , tel qu'il est présenté sur la figure 3.11 pour le GaAs et 3.12 pour le Si. Le fit des courbes a aboutie aux expressions suivantes :

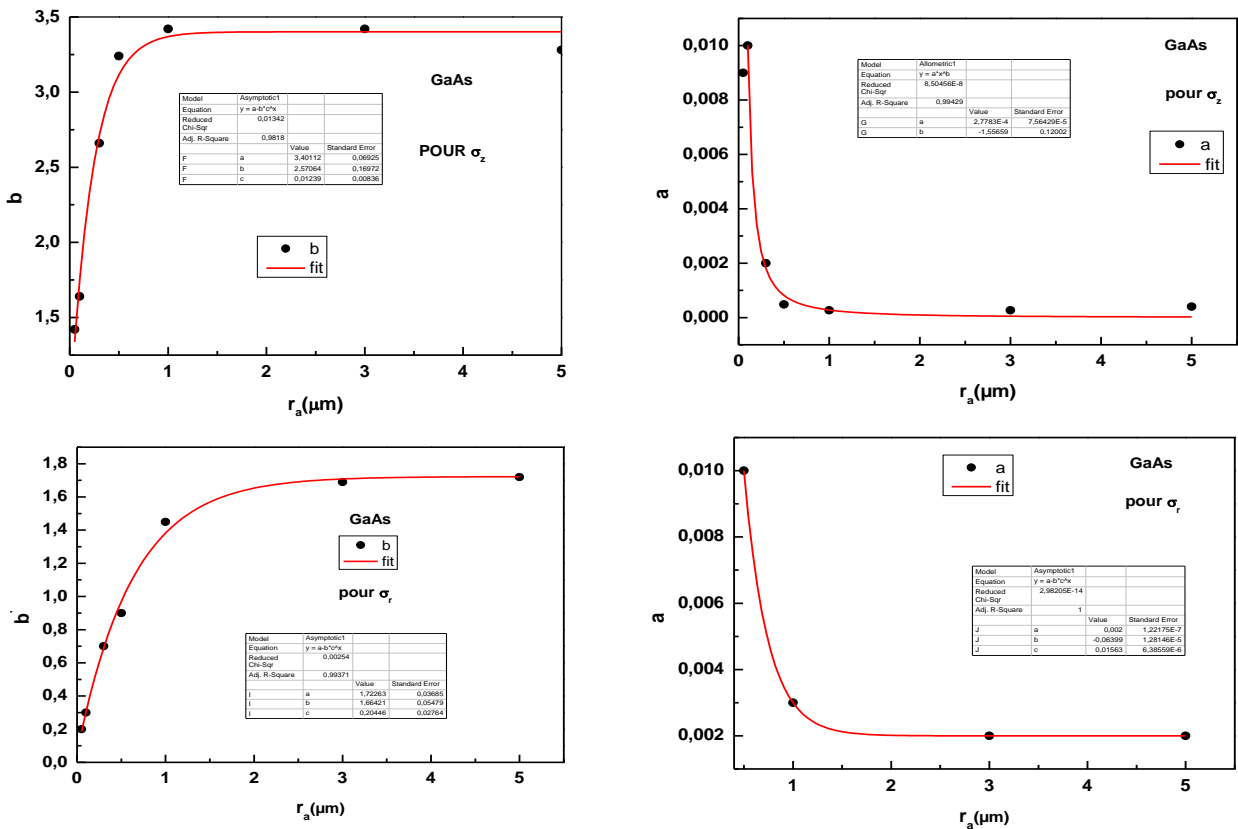


Figure 3.11. Fit des paramètres a et b pour le cas d'un fil de GaAs.

Pour le GaAs

$$a = 2.78 \times 10^{-4} r_a^{-1.56}$$

$$b = 3.4 - 2.57 \times 0.012 r_a$$

$$a' = 0.002 + 0.064 \times 0.2 r_a$$

$$b' = 1.72 - 1.66 \times 0.2 r_a$$

Pour le Si

$$a = 0.004 \times r_a^{-2.07}$$

$$b = 3.45 - 2.4 \times 0.23 r_a$$

$$a' = 0.005 + 0.21 \times 0.066 r_a$$

$$b' = 1.64 - 4.36 \times (1.52 \times 10^{-5}) r_a$$

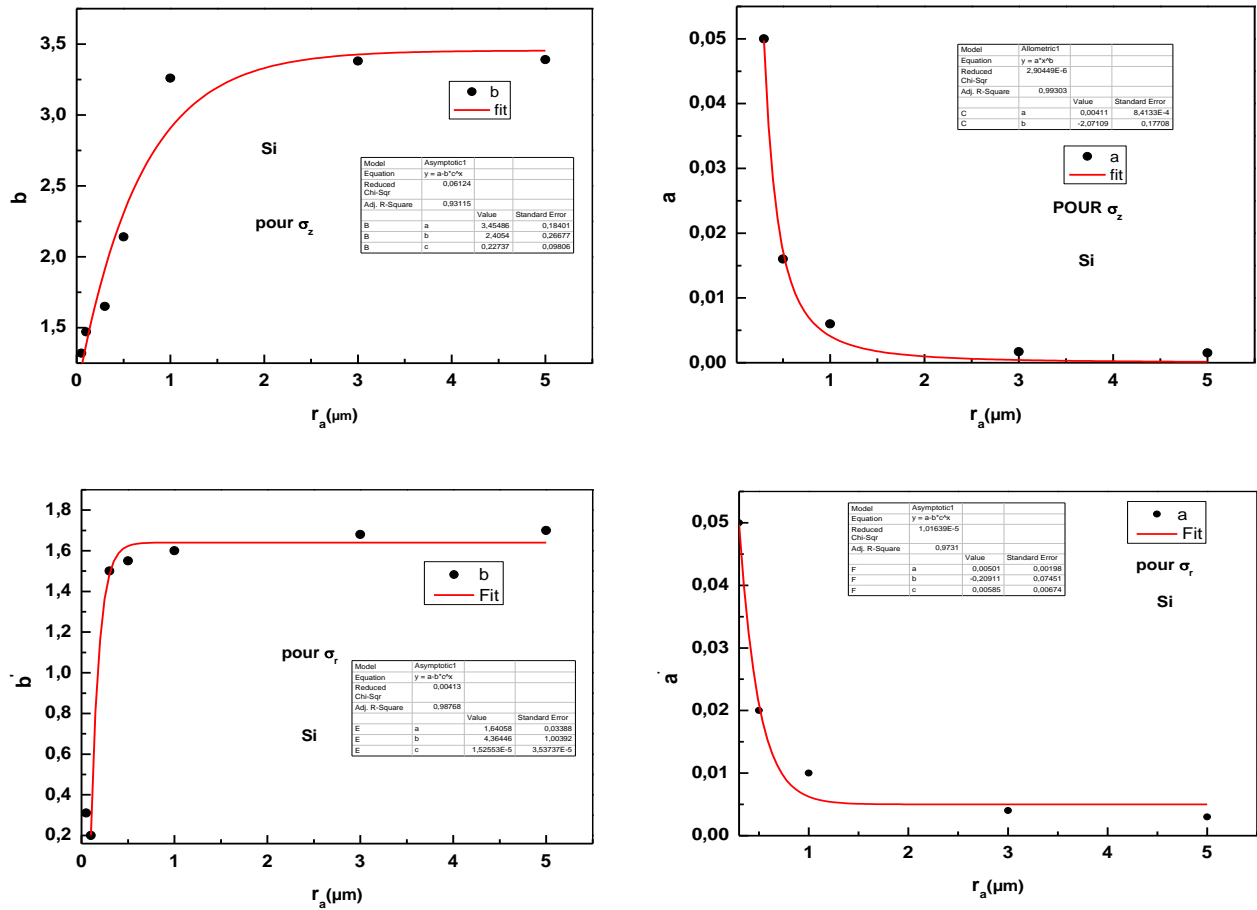


Figure 3.12. Fit des paramètres a et b pour le cas d'un fil de Si.

Au final la fonction de génération pour le cas d'un fil peut s'écrire comme suite :

$$g(r, z) = cst e^{\frac{-z^2}{\sigma_z^2}} (r^2) e^{\frac{r}{\sigma_r}} \quad (3.4)$$

Où cst est le facteur de normalisation, définie par

$$cst = \frac{2}{\sqrt{\pi} \left( 6\sigma_r^4 - e^{\frac{-r_a}{\sigma_r}} \sigma_r (r_a^3 + 3r_a^2 \sigma_r + 6r_a \sigma_r^2 + 6\sigma_r^3) \right) \sigma_z \text{Erf} \left[ \frac{h}{\sigma_z} \right]} \quad (3.5)$$

**Pour le GaAs**

$$\sigma_z^2 = a(r_a)E_0^{b(r_a)}$$

$$a(r_a) = 2.78 \times 10^{-4} r_a^{-1.56}$$

$$b(r_a) = 3.4 - 2.57 \times 0.012 r_a$$

$$\sigma_r = a'(r_a)E_0^{b'(r_a)}$$

$$a'(r_a) = 0.002 + 0.064 \times 0.2 r_a$$

$$b'(r_a) = 1.72 - 1.66 \times 0.2 r_a$$

**Pour le Si**

$$\sigma_z^2 = a(r_a)E_0^{b(r_a)}$$

$$a(r_a) = 0.004 \times r_a^{-2.07}$$

$$b(r_a) = 3.45 - 2.4 \times 0.23 r_a$$

$$\sigma_r = a'(r_a)E_0^{b'(r_a)}$$

$$a'(r_a) = 0.005 + 0.21 \times 0.006 r_a$$

$$b'(r_a) = 1.64 - 4.36 \times (1.52 \times 10^{-5}) r_a$$

**3.3 Modélisation du signal EBIC****3.3.1 Model**

La figure 3.13 montre le schéma du modèle proposé. On considère une jonction pn formée par un fil semiconducteur de longueur  $h$  et de rayon  $r_a$ . Le dopage est considéré homogène dans les deux régions de la jonction. La région 'n' est caractérisée par une longueur de diffusion constante  $L_p$  pour les porteurs minoritaires qui sont les trous. La région 'p' est caractérisée par une longueur de diffusion constante  $L_n$  pour les porteurs minoritaires qui sont les électrons.

La jonction pn est considérée comme étant parfaite (pas de recombinaison des porteurs de charges à l'intérieur de la zone de charge d'espace). Les contacts de collection de courant réalisés sur les deux bases du fil (à  $z=0$  et à  $z=h$ ) sont caractérisés par une vitesse de recombinaison de collecte des porteurs de charge noté  $v_p$ . Sur une surface latérale du fil, les recombinaisons non radiatives qui ont lieu sont prise en considération. Le taux de recombinaison sur cette surface est caractérisé par une quantité appelée vitesse de recombinaison  $v_r$ .

Le faisceau électronique de bombardement (électrons primaires) est considéré perpendiculaire sur la surface latérale du fil et radial.



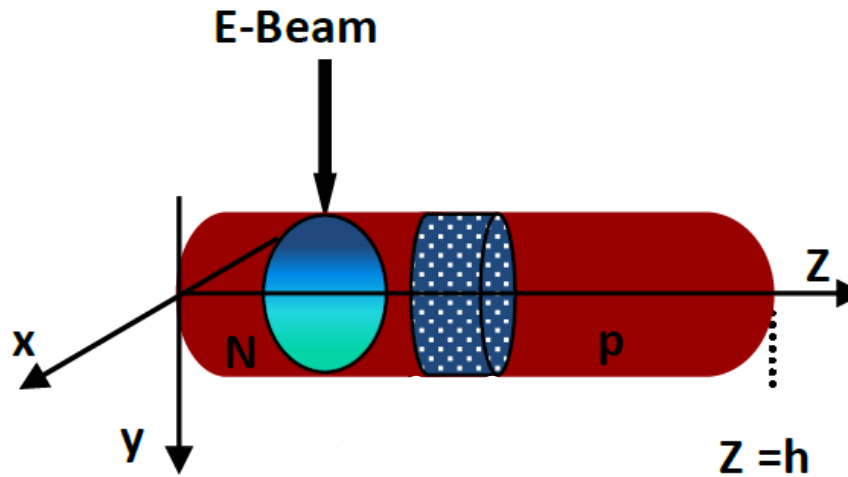


Figure 3.13. Schéma du modèle proposé.

Le transport des porteurs minoritaires de charges générés est contrôlé par l'équation de continuité avec des conditions aux limites appropriées pour chaque région du fil.

**Région n:**

$$\frac{\partial^2 p(r,z)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p(r,z)}{\partial r} + \frac{\partial^2 p(r,z)}{\partial z^2} - \lambda^2 p(r,z) = -\frac{g(r,z-z_0)}{D_p} \quad (3.5)$$

$\lambda^2 = \frac{1}{L_p}$ ,  $L_p = D_p \tau$  et  $g(r, z - z_0)$  la fonction de génération.

$$p = 0 \text{ à } D_p \frac{\partial p}{\partial z}(r, z = 0) = -v_p \cdot p(r, z = 0) \quad (3.6.a)$$

$$p = 0 \text{ à } z = d \quad (3.6.b)$$

$$p < \infty \text{ à } r < r_a \quad (3.6.c)$$

$$D_p \frac{\partial p}{\partial r}(r = r_a, z) = -v_r \cdot p(r = r_a, z) \quad (3.6.d)$$

L'équation différentielle 3.5 soumise aux conditions aux limites 3.6.a–d, peut être résolue par la méthode des fonctions de green (voir l'annexe pour les détails de calcul) :

$$p(r, z) = \iint G(r, r', z, z') \cdot g(r', z' - z_0) dr' dz' \quad (3.7)$$

$G(r, r', z', z')$  est la fonction de Green.

Pour la fonction de génération nous allons utiliser trois fonctions de génération et trois parcours électroniques.

1- La fonction génération de Bonard [31] :

$$g(r, z) = \frac{1}{a} \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_1^2}\right) (r_a - r) \exp(-r/\sigma_2) \quad (3.8)$$

$$a = \sqrt{\pi} \sigma_1 \sigma_2^3$$

$$\sigma_1 = \sqrt{0.05 + 0.0001 E_0^{2.78}}$$

$$\sigma_1 = 0.02 + 0.003 E_0^{1.50}$$

$z_0 = 0.3 R_{KO}$ ,  $R_{KO}$  le parcours électronique, son expression est donnée par [24]:

$$R_{KO}(\mu m) = 2.76 \frac{10^{-2} A}{\rho Z^{0.889}} E_0^{1.67} \quad (3.9)$$

Où  $\rho$  (g/cm<sup>3</sup>) est la masse volumique du matériau, A et Z sont, respectivement, la masse atomique et le nombre atomique, et  $E_0$  (keV) est l'énergie incidente des électrons.

2- La fonction de génération gaussienne [32] :

$$g(r, z) = \frac{A(z)}{2\pi R \sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.10)$$

$$A(z) = 1.14 \exp\left(-7.5 \left(\frac{z}{R_K} - 0.3\right)^2\right)$$

$$\sigma^2 = d_e^2 + \frac{0.11 z^3}{R_K}$$

$d_e$  Le diamètre du faisceau de bombardement.

$z$  La profondeur de pénétration

$R_K$  Le parcours électronique de Kyzer [25]

$$R_K(\mu m) = \frac{25.6}{\rho} \left(\frac{E_0}{30}\right)^{1.68} \quad (3.11)$$

3- Notre fonction de génération (3.4) avec son parcours électronique (3.1).

La fonction de green s'écrira

$$G(r, r', z, z') = \frac{1}{2\pi \cdot d \cdot D} \sum_{i=0}^{\infty} \left( M(\mu_p, r_a) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_{>}) + K_0(\mu_p \cdot r_{>}) \right) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_{<}) \cdot \sin(k_i(d - z)) \cdot \sin(k_i(d - z')) \quad (3.12)$$

$$\text{Avec } \mu_p = \sqrt{k_i^2 + L_p^{-2}}, \quad k_i = \frac{v_p}{D_p} \text{tg}(k_i \cdot d) \quad (3.13)$$

$$r_{>} = \max(r, r'), \quad r_{<} = \min(r, r')$$

$$M(\mu_p, r_a) = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} \quad (3.14)$$

avec,  $s_p = v_p/D_p$ .

**Région p :**

$$\frac{\partial^2 n(r,z)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n(r,z)}{\partial r} + \frac{\partial^2 n(r,z)}{\partial z^2} - \lambda'^2 n(r,z) = -\frac{g(r,z-z_0)}{D_n} \quad (3.15)$$

$$\lambda'^2 = \frac{1}{L_n}, L_n = D_n \tau$$

$$n(r, z = d_2) = 0 \quad (3.16.a)$$

$$D_p \frac{\partial n}{\partial z}(r, z = h) = v_n \cdot n(r, z = h) \quad (3.16.b)$$

$$n < \infty \text{ à } r < r_a \quad (3.16.c)$$

$$D_n \frac{\partial n}{\partial r}(r = r_a, z) = -v_n \cdot n(r = r_a, z) \quad (3.16.d)$$

La solution de l'équation différentielle 3.15 soumise aux conditions aux limites 3.16.a-d, peut être exprimée par (voir l'annexe pour les détails de calcul) :

$$n(r, z) = \iint G'(r, r', z, z') \cdot g(r', z' - z_0) dr' dz' \quad (3.17)$$

$$G'(r, r', z, z') = \frac{1}{2\pi \cdot (h - d_2) \cdot D_n} \sum_{i=0}^{\infty} (M(\mu_n, r_a) \cdot I_0(\mu_n \cdot r_>) + K_0(\mu_n \cdot r_>)) \cdot I_0(\mu_n \cdot r_<) \cdot \sin(k'_i(z - d_2)) \cdot \sin(k'_i(z' - d_2)) \quad (3.18)$$

$$\text{Avec } \mu_n = \sqrt{k'_i{}^2 + L_n^{-2}}, k'_i \text{ est } k'_i = \frac{v_p}{D_p} \text{tg}(k'_i \cdot (h - d_2)) \quad (3.19)$$

$$r_> = \max(r, r'), r_< = \min(r, r')$$

$$M(\mu_n, r_a) = \frac{\mu_n \cdot K_1(\mu_n \cdot r_a) - s_n \cdot K_0(\mu_n \cdot r_a)}{\mu_n \cdot I_1(\mu_n \cdot r_a) + s_n \cdot I_0(\mu_n \cdot r_a)} \quad (3.20)$$

Avec,  $s_n = v_n/D_n$ .

**Zone de charge d'espace ZCE :**

A cause du champ électrique intense qui règne dans cette région, le transport des porteurs de charges se fait principalement par dérive. Le champ électrique va séparer immédiatement les paires électrons-trous générées dans cette région. En plus, la jonction p-n est considérée parfaite (pas de recombinaison dans ZCE), donc, toutes les charges générées dans cette région sont collectées et participent à la formation du signal EBIC enregistré.

**Le courant collecté :**

L'expression du courant EBIC collecté peut être estimé par :

-Dans ZCE :

$$I_C = 2\pi \int_0^{\min(R_c, r_a)} \int_{d_1}^{d_2} g(z' - z_0, r') dz' dr' \quad (3.19)$$

Dans la région n :

$$I'_C = e \cdot D_p \cdot 2\pi \int_0^{r_a} r dr \frac{\partial p}{\partial z} (z = d) \quad (3.20)$$

Dans la région p :

$$I''_C = -e \cdot D_n \cdot 2\pi \int_0^{r_a} r dr \frac{\partial n}{\partial z} (z = d_2) \quad (3.21)$$

Les courant total collecté est

$$I_{cc} = I_C + I'_C + I_C(ZCE) \quad (3.22)$$

Pour pouvoir mettre en évidence l'effet du choix de la fonction de génération et du parcours électronique adopté pour le calcul théorique du signal EBIC, nous avons utilisé deux fonctions de génération. Ces fonctions sont : la fonction de génération de Bonard ( $g_B$ ) [32], et celle de Donolato ( $g_G$ ) [33]. Pour les parcours électroniques, nous avons considéré celui de Kyzer [25] noté  $R_K$ , celui de Kanaya et Okayama [24] noté  $R_{KO}$  et celui de Everhart et Hoff [26] noté  $R_{EH}$ . Ensuite, nous avons calculé le signal EBIC en utilisant notre modèle avec les différentes fonctions de générations et parcours électroniques.

Le dispositif étudié est une diode à base de GaAs avec un dopage de l'ordre de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le courant de bombardement est de l'ordre de  $10^{-10} \text{ A}$ .

Pour alléger la lecture, on a noté par exemple la courbe du signal EBIC calculée avec la fonction  $g_G$  et le parcours  $R_K$  par  $g_G-R_K$ , la même notation est utilisée avec les autres courbes.

3.3.2 Effet du parcours électronique sur le signal EBIC

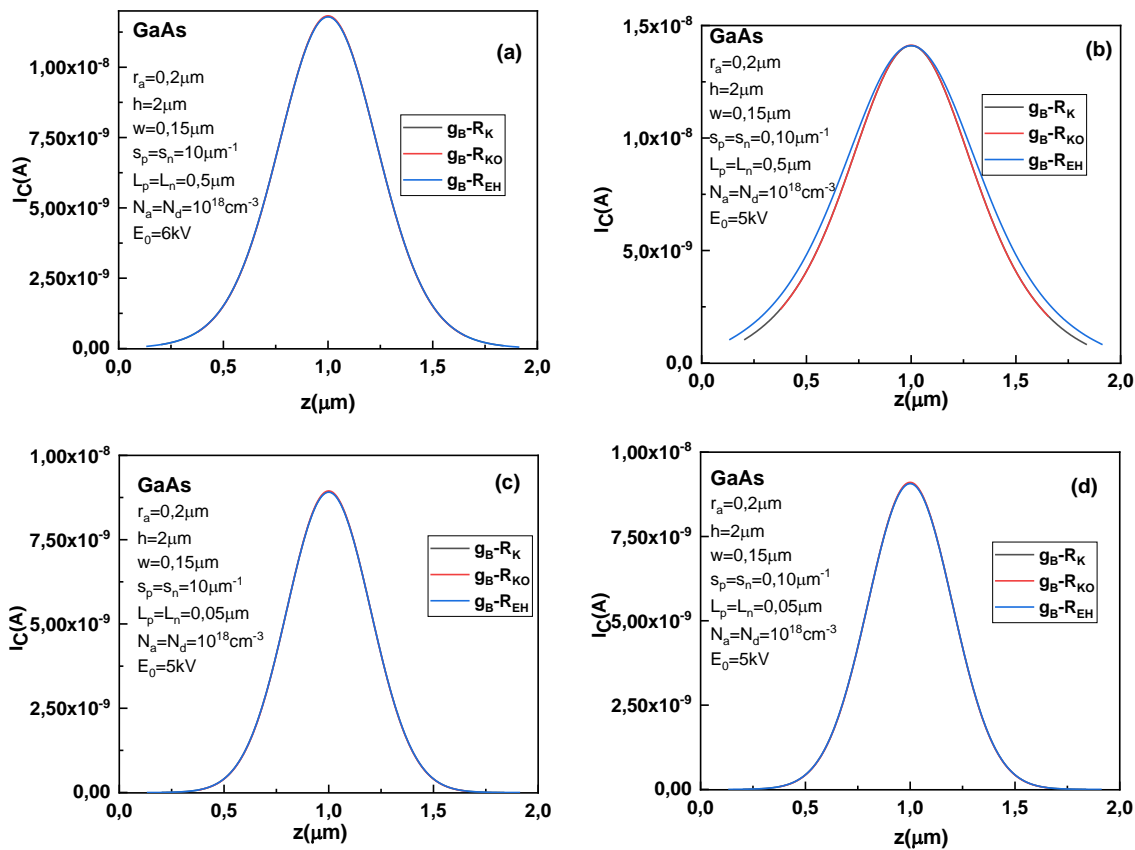


Figure 3.14. Variation du signal EBIC en fonction de la distance de scan calculé avec différentes expressions du parcours électronique pour une jonction de GaAs.

La figure 3.14 présente la variation du signal EBIC d'une jonction p-n à base de GaAs calculée pour différentes valeurs de parcours électronique avec la fonction de génération de Bonard. Les calculs montrent que le signal EBIC est indépendant du choix de l'expression du parcours électronique pour le cas  $L_p(L_n) < r_a$  (figure 3.14 c et d). Pour le cas  $L_p(L_n) > r_a$ , le signal dépend du choix de R si la vitesse de recombinaison des porteurs de charge sur la surface latérale de la jonction est faible (figure (3.14b)). Par contre, il est indépendant du choix de R pour le cas de forte valeurs de cette dernière (figure (3.14a)). En général, on peut dire que le choix de R n'influe pas énormément sur le calcul du signal EBIC pour le cas des nano-fils, contrairement au cas du modèle massif [33]. Ceci peut être expliqué par le fait que pour le cas des nano-fils, l'énergie des électrons de bombardement utilisée pour la caractérisation est souvent inférieure à 10 kV. Dans ce cas la différence entre les valeurs de R calculées à partir des différentes expressions mathématiques ne déplace en aucun cas 5%, ce qui rend leur impact sur le calcul de signal EBIC négligeable.

3.3.3 Effet de la fonction de génération

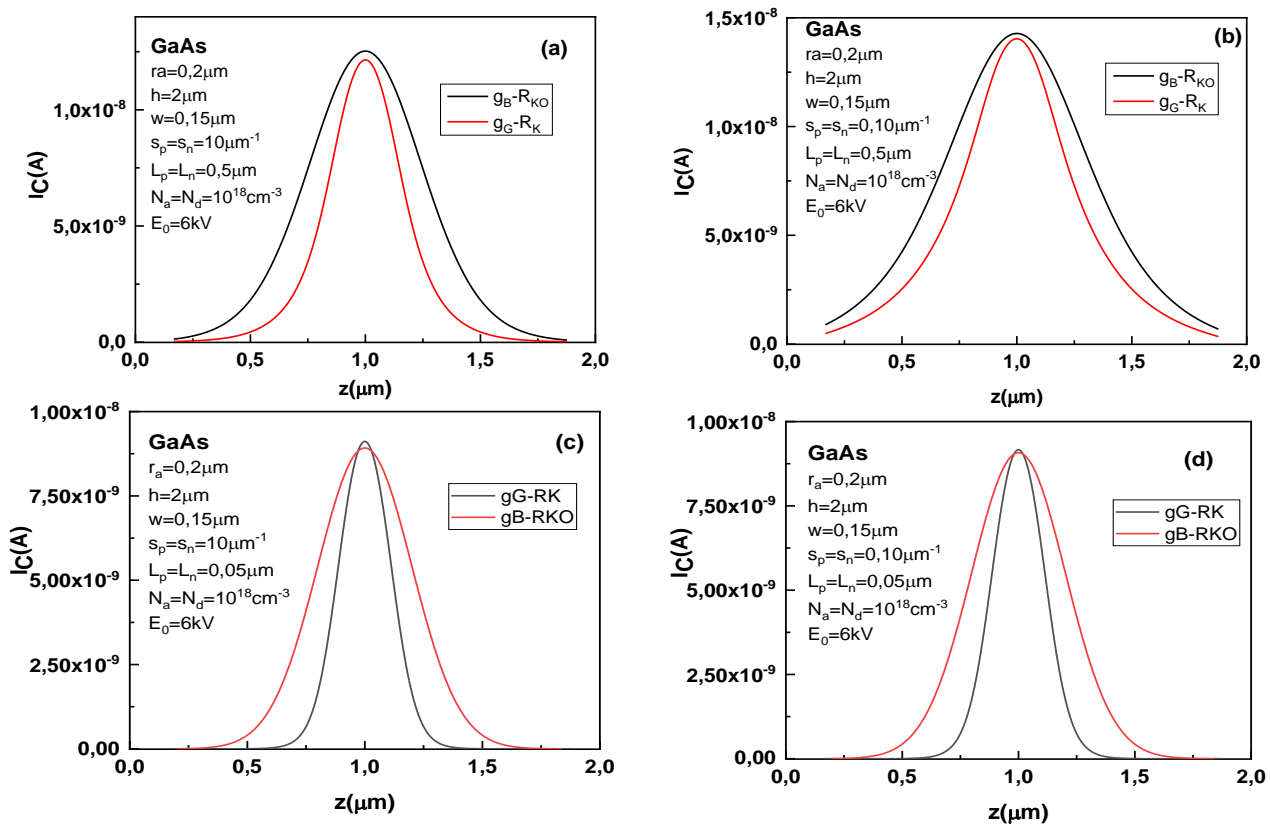
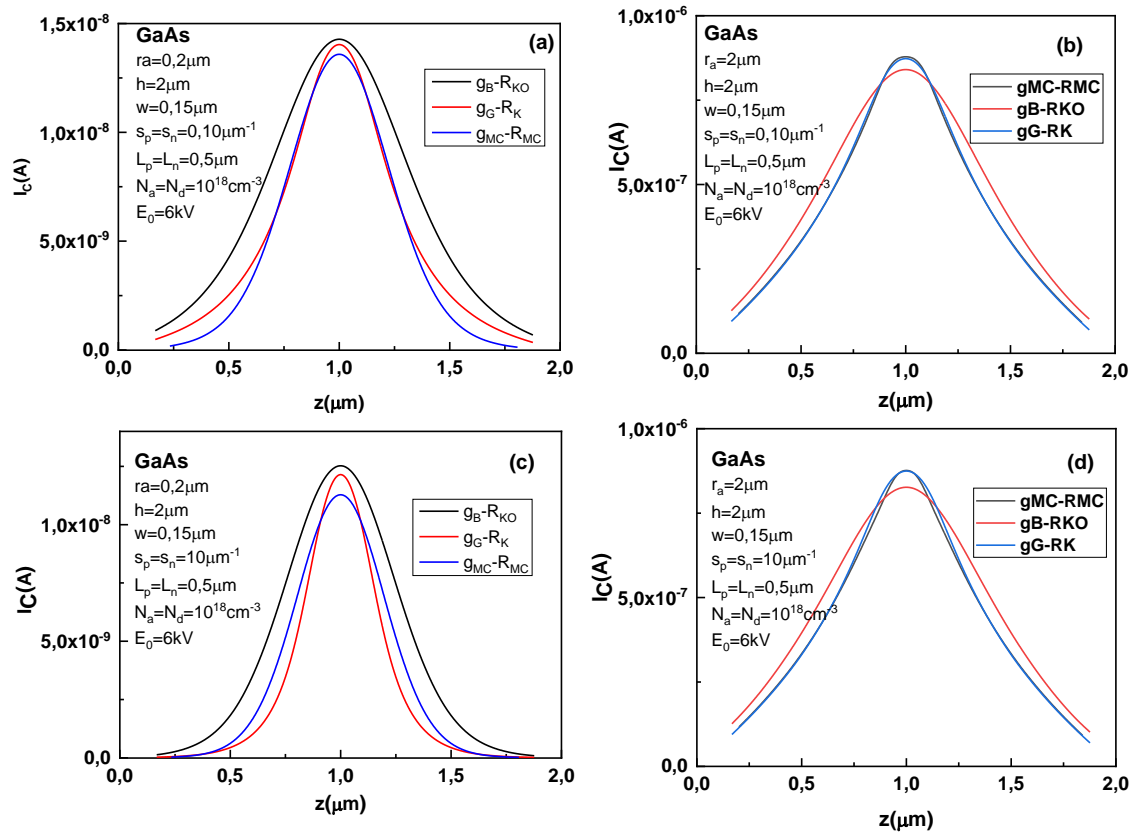


Figure 3.15. Variation du signal EBIC en fonction de la distance de scan calculer avec différentes expressions de parcours électronique et de fonction de génération pour une jonction de GaAs.

Contrairement au cas de parcours électronique, le signal EBIC dépend fortement du choix de la fonction de génération quel que soit les propriétés électriques de la jonction. Ce résultat est en accord avec ceux obtenus pour le cas des matériaux massifs [34]. La différence entre les profils est plus marquée pour le cas  $L_p(L_n) > r_a$  avec des faibles valeurs de la vitesse de recombinaison.

La différence entre les profils est due à la différence entre les distributions initiales des EPH gènes suite au bombardement du semiconducteur. Cette distribution dépend du choix du modèle physique pour décrire les interactions des électrons primaires avec la substance, car elle a un lien directe avec la fonction de dissipation des électrons de bombardement. Il faut noter aussi que les fonctions de générations utilisées dans cette étude sont obtenues pour le cas des semiconducteur massifs qui ne sont pas forcément valable pour notre cas. Donc, il est préférable d'utiliser des parcours électroniques et des fonctions de génération adaptés au cas des filiformes.

La figure 3.16 présente la variation du signal EBIC calculé avec le parcours électronique et la fonction de génération obtenus dans notre étude à l'aide d'une simulation Monte Carlo.



**Figure 3.16.** Variation du signal EBIC en fonction de la distance de scan calculé avec différentes expressions du parcours électronique et de fonction de génération pour  $r_a=0.2\mu m$  et  $r_a=2\mu m$ .

Le signal EBIC calculé avec  $g_{MC-RMC}$  ( $g_{MC}$ , fonction de génération obtenue par simulation Monte Carlo et  $R_{MC}$  parcours électronique obtenu par simulation Monte Carlo) et différent de celui obtenu par  $g_B$  pour les faibles et les grandes valeurs de  $r_a$ . Cette différence est bien marquée pour le cas de faibles valeurs de  $r_a$ . Par contre, le signal  $g_{MC-RMC}$  est en accord avec le signal calculé avec  $g_G$  en particulier pour le cas des grandes valeurs de  $r_a$ .

### 3.3.4 Vérification du modèle

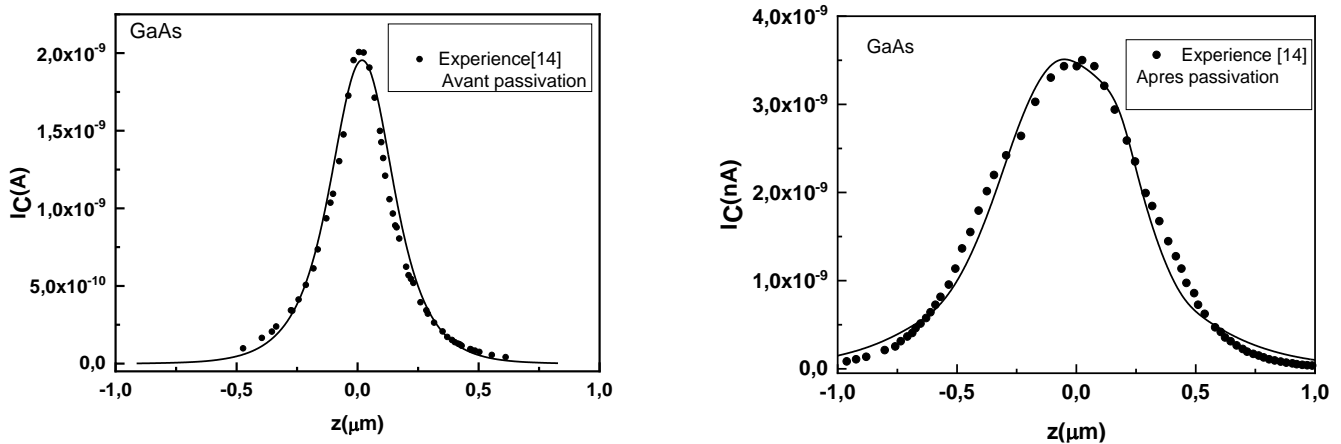
Pour la vérification du modèle, nous allons reproduire des profils EBIC expérimentaux de Gutsche et al [14] pour déterminer la longueur de diffusion des porteurs de charges et leur vitesse de recombinaison. Les profils EBIC ont été réalisés sur des diodes solaires à base de GaAs nano fil. Le premier profil est pour la cellule sans traitement chimique de sa surface (sans passivation électrique de sa surface) noté 'diode1'. Le deuxième est pour la même cellule après traitement chimique de sa surface (avec passivation de sa surface) noté 'diode2'.

Les principaux paramètres de fit de ces courbes sont adressés dans le tableau 3.4 pour le cas de la diode traitée et non traitée respectivement.

**Tableau 3.4.** Différents paramètres de fit pour une diode avec et sans passivation de sa surface (sans traitement de surface) de diamètre  $2r_a=0.2\mu\text{m}$ .

Paramètre	$L_n(\mu\text{m})$	$L_p(\mu\text{m})$	$v_{rn}(\text{cm/s})$	$v_{rp}(\text{cm/s})$	$h(\mu\text{m})$	$r_a(\mu\text{m})$	$E_0(\text{keV})$	$I_b(\text{nA})$
diode1	0.18	0.15	$10^4$	$5 \cdot 10^4$	2	0.11	10	39.5
diode2	0.13	0.11	$3 \cdot 10^4$	$10^5$	2	0.11	10	39.5
diode1 <sup>ref[14]</sup>	0.170	0.135	-	-	2	0.1	10	40
diode2 <sup>ref[14]</sup>	0.118	0.145	$3 \cdot 10^5$	$4 \cdot 10^6$	2	0.1	10	40

La différence entre les valeurs de  $L$  et de  $v_r$  obtenues par notre modèle et ceux de Gutsche est dus au modèle choisi pour faire le fit. L'auteur a utilisé une loi exponentielle pour déterminer  $L$  ensuite il déduit  $v_r$  par une relation théorique. Cette loi n'est applicable que si les matériaux sont massifs et que la longueur de diffusion des porteurs de charge est très grande devant le parcours électronique [35,36].



**Figure 3.17.** Fit du signal EBIC pour une diode à base de nano fil de GaAs avec et sans passivation de surface.



**References**

- [1] B. G. Yacobi and D. B. Holt, “Cathodoluminescent Microscopy of Inorganic Solids”, Plenum Press (1991).
- [2] K. L. Luke, O. von Roos and L. J. Cheng, *J. Appl. Phys.* 57,1978 (1985)
- [3] W. Hergert, P. Reck, L. Pasmann and J. Schreiber, *Phys. Status Solidi A* 101, 611 (1987).
- [4] E. B. Dorothea, *IEEE Trans. Electron Devices*, 29, 1887 (1982).
- [5] R. Corkish, T. Puzzer, A.B. Spoul and K. L. Luke, *J. Appl. Phys.* 84, 5473 (1998).
- [6] Y. Beggah, Thèse de Magistère, Université de Constantine (1992).
- [7] A. Lahreche, Thèse de Doctorat es-Science-Université de Jijel (2014).
- [8] D. Abou-Ras and T. Kirchartz, *ACS Appl. Energy Mater.* 2, 6127 (2019).
- [9] N. Kedem, T. M. Brenner, M. Kulbak, N. Schaefer, S. Levchenko, I. Levine, D. Abou-Ras, G. Hodes and D. Cahen, *J. Phys. Chem. Lett.* 6, 2469 (2015).
- [10] A. Kraxner “Investigation of carrier transport in silicon p-n junction devices using scanning electron microscopy with electron beam induced current”, PhD thesis, Graz University of Technology (2016).
- [11] V. Piazza, L. Mancini, H-L. Chen, S Collin and M. Tchernycheva, “Nanoscale Analyses Applied to Nanowire Devices” book chapter in “Semiconductors and Semimetals” Volume 98 (2018)
- [12] O. Saket, C. Himwas, V. Piazza, F. Bayle, A. Cattoni, F. Oehler, G. Patriarche, L. Travers, S. Collin, F. H. Julien, J-C. Harmand and M. Tchernycheva, *Nanotechnology*, 31, 145708 (2019)
- [13] M. Yang, D. Dvorak, K. Leistner, C. Damm, S. P. Watkins and K. L. Kavanagh, *Nanotechnology* 30, 025701 (2019).
- [14] C. Gutsche, R. Niepelt, M. Gnauck, A. Lysov, W. Prost, C. Ronning and F-J. Tegude, *Nano Lett.*12, 1453 (2012).
- [15] V. Piazza, S. Wirths, N. Bologna, A. A. Ahmed, F. Bayle, H. Schmid, F. Julien and M. Tchernycheva, *Appl. Phys. Lett.* 114, 103101 (2019)

- [16] Z. Zhong, Z. Li, Q. Gao, Z. Li, K. Peng, L. Li, S. Mokkaati, K. Vora, J. Wu, G. Zhang, Z. Wang, L. Fu, H. H. Tan and C. Jagadish, *Nano Energy* 28, 106 (2016).
- [17] M. Yang, D. Dvorak, K. Leistner, C. Damm, S.P. Watkins and K. L. Kavanagh, *Nanotechnology* 30, 025701 (2019).
- [18] C. Y. Chen, A. Shik, A. Pitanti, A. Tredicucci, D. Ercolani, L. Sorba, F. Beltram and H. E. Ruda, *Appl. Phys. Lett.* 101, 063116 (2012)
- [19] Ahmed Ali Ahmed "Développements des dispositifs à base des nanofils III-V pour le photovoltaïque" Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay (2018).
- [20] M. Vladimir Neplokh "Développement et application de la technique analytique de courant induit par faisceau d'électrons pour la caractérisation des dispositifs à base de nanofils de nitrure de gallium et de silicium" Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay (2016).
- [21] P. Tchoulfian, F. Donatini, F. Levy, A. Dussaigne, P. Ferret and J. Pernot, *Nano Lett.* 14, 3491 (2014).
- [22] Z. Fang, F. Donatini, B. Daudin and J. Pernot, *Nanotechnology* 29, R1 (2018)
- [23] M. Tchernycheva, V. Neplokh, H. Zhang, P. Lavenus, L. Rigutti, F. Bayle, F. H. Julien, A. Babichev, G. Jacopin, L. Largeau, R. Ciechonski, G. Vescovi and O. Kryliouk, *Nanoscale* 7, 11692 (2015).
- [24] K. Kanaya and S. Okayama, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 5, 43(1972).
- [25] D.F. Kyser, *Proc. 6<sup>th</sup> Inst. Conf. on X-Ray Optics and Microanalysis Osaka*, Ed G. Shinoda et al (University of Tokyo, Press Tokyo), 147 (1971).
- [26] T. E. Everhart and P. H. Hoff, *J. Appl. Phys.* 42, 5837 (1971).
- [27] H. Demers, N.P. Demers, A.R. Couture, D. Joly, M. Guilmain, N. de Jonge and D. Drouin, *Scanning* 33, 135 (2011).
- [28] C. A. Klein, *J. Appl. Phys.* 39, 2029 (1968).
- [29] D. C. Joy and S. Luo, *Scanning* 11, 176 (1989).
- [30] C. Parish and P. Russell, *Appl. Phys. Lett.* 89, 192018 (2006)

- [31] J. Bonard and J. Ganière, *J. Appl. Phys.* 79, 6987 (1996).
- [32] C. Donolato and P. Venturi, *Physica Status Solidi (A)*, 73, 377 (1982).
- [33] A. Lahreche, Y. Beggah and R. Corkish, *Ultramicroscopy* 111, 959 (2011).
- [34] A. Kurniawan, “Devices parameters characterization with the use of EBIC”, PhD thesis, Nanyang Technological University (2008).
- [35] F. Berz and H. K. Kuiken, *Sol. Stat. Elec.* 19, 437(1976).
- [36] V. K. S. Ong, J. C. H. Phang and D. S. H. Chan, *Sol. Stat. Elect.* 37, 1(1994).

---

## CONCLUSION GENERALE

---

Dans ce mémoire, en utilisant la simulation Monte Carlo, nous avons déterminé une fonction de génération et un parcours électronique propre aux nano fils semiconducteurs. Ceci est pour une meilleure estimation de la distribution spatiale initiale des paires électron-trou dans le volume de ces derniers, qui, sera utilisée dans la modélisation du signal EBIC. Ensuite, nous avons modélisé le signal EBIC d'une jonction p-n filiforme pour extraire quelques paramètres électriques importants tels que la longueur de diffusion des porteurs de charges et leur vitesse de recombinaison sur la surface latérale du fil.

Les résultats de la simulation Monte Carlo montrent que la fonction de génération et son parcours électronique dépendent du rayon du fil pour le cas de faibles valeurs de  $r_a$ . Par contre, ils sont indépendants de ce paramètre pour le cas des grandes valeurs.

Les résultats de la modélisation du signal EBIC montrent que le choix de parcours électronique n'influe pas sur le signal calculé. Ceci est due au choix de faibles valeurs d'énergie de bombardement (pour avoir un volume de génération complètement à l'intérieur du fil). Dans ce cas, la différence entre les valeurs de parcours électronique calculées par différentes expressions ne dépasse en aucun cas 5%.

En général, les calculs montrent que le signal EBIC augmente avec l'augmentation de la valeur de longueur de diffusion et avec l'augmentation du rayon fil. Par contre, il diminue avec l'augmentation de la vitesse de recombinaison. Si la valeur de  $L < r_a$ , le signal est indépendant de la vitesse de recombinaison.

**Annexe****A. Calcul de la fonction de green :**

On a la fonction de Green doit satisfaire l'équation :

$$\frac{\partial^2 G(r, r', z, z')}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial G(r, r', z, z')}{\partial r} + \frac{\partial^2 G(r, r', z, z')}{\partial z^2} - \lambda^2 G(r, r', z, z') = -\frac{1}{D2\pi r} \delta(r - r') \delta(z - z') \quad (\text{A.1})$$

Avec les conditions aux limites :

$$D_p \left. \frac{\partial G(r, r', z, z')}{\partial z} \right|_{z=0} = v_p G(r, r', z = 0, z') \quad (\text{A.2})$$

On considère que la jonction est parfaite :

$$G(r, r', \theta, \theta', z = d, z') = 0 \quad (\text{A.3})$$

Sur la surface latérale

$$D \frac{\partial G}{\partial r}(r = r_a, r', \theta, \theta', z, z') = -v_r \cdot p(r = r_a, \theta, \theta', z, z') \quad (\text{A.4})$$

$$G(r, r', \theta, \theta', z, z') < \infty \text{ si } r < r_a \quad (\text{A.5})$$

Considérant le problème de Sturm-Liouville pour la variable z.

$$\frac{\partial^2 \varphi(z)}{\partial z^2} + k_n^2 \varphi(z) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Avec les conditions aux limites :

$$D_p \left. \frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = v_p \varphi(z = 0) = 0 \text{ à } z=0 \quad (\text{A.7})$$

$$\varphi(z = d) = 0 \text{ à } z=d \quad (\text{A.8})$$

La solution est :

$$\varphi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \sin(k_n(d - z)) \quad (\text{A.9})$$

$$\text{Avec, } k_n = \frac{v_p}{D_p} \text{tg}(k_n d)$$

Nous développons la fonction  $\delta(z, z')$  sous forme d'un produit de fonctions orthogonales :

$$\delta(z, z') = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(z) \quad (\text{A.10})$$

$$c_n = \frac{\int_0^d \delta(z, z') \varphi_n(z) dz}{\int_0^d \varphi_n^2(z) dz} = \frac{2}{d} \sin(k_n(d - z')) \quad (\text{A.11})$$

$$\delta(z, z') = \frac{2}{d} \sum_{n=0}^{\infty} \sin(k_n(d - z)) \cdot \sin(k_n(d - z')) \quad (\text{A.12})$$

Donc, la solution sera

$$G(r, r', z, z') = \frac{1}{2\pi \cdot d \cdot D} \sum_{n=0}^{\infty} g_n(r, r') \sin(k_n(d - z)) \cdot \sin(k_n(d - z')) \quad (\text{A.14})$$

En remplaçant dans l'équation différentiel on trouve :

$$\frac{\partial^2 g_n(r, r')}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial g_n(r, r')}{\partial r} - \mu_p^2 g_n(r, r') = -\frac{1}{r} \delta(r - r') \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial g_n}{\partial r}(r = r_a, r') = -s_p \cdot g_n(r = r_a, r') \quad (\text{A.16})$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} g_n(r, r') < \infty \quad (\text{A.17})$$

$$\text{avec } \mu_p = \sqrt{k_n^2 + L_p^{-2}} \text{ et } s_p = \nu_r/D_p \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{cases} g_1(r, r') = A \cdot I_0(\mu_p \cdot r) + B \cdot K_0(\mu_p \cdot r) & \text{si } r < r' \\ g_2(r, r') = C \cdot I_0(\mu_p \cdot r) + E \cdot K_0(\mu_p \cdot r) & \text{si } r > r' \end{cases} \quad (\text{A-19a})$$

De (A.17) on a :

$$g_1(r, r') = A \cdot I_0(\mu_p \cdot r) \text{ et } B=0 \quad (\text{A.20})$$

De (A.16)

$$C \cdot \mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) - \mu_p E \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) = -s_p \cdot (C \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a) + E \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)) \quad (\text{A.21})$$

$$C = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E \quad (\text{A.22})$$

$$g_2(r, r') = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E \cdot I_0(\mu_p \cdot r) + E \cdot K_0(\mu_p \cdot r) \quad (\text{A.23})$$

La continuité de la fonction de Green :

$$g_1(r = r', r') = g_2(r = r', r')$$

$$A \cdot I_0(\mu_p \cdot r') = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E \cdot I_0(\mu_p \cdot r') + E \cdot K_0(\mu_p \cdot r')$$

$$A = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E + E \cdot K_0(\mu_p \cdot r') / I_0(\mu_p \cdot r') \quad (\text{A.24})$$

La discontinuité de la première dérivée de la fonction de green :

$$\frac{\partial g_2(r=r')}{\partial r} - \frac{\partial g_1(r=r')}{\partial r} = \frac{-1}{r'} \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E \cdot \mu \cdot I_1(\mu_p \cdot r') - E \cdot \mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r')$$

$$- \left( \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} E + E \cdot \frac{K_0(\mu_p \cdot r')}{I_0(\mu_p \cdot r')} \right) \mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r') = \frac{-1}{r'}$$

$$-E \cdot \mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r') - E \cdot \frac{K_0(\mu_p \cdot r')}{I_0(\mu_p \cdot r')} \cdot \mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r') = \frac{-1}{r'} \quad (\text{A.26})$$

$$-E \cdot \mu_p \cdot (K_1(\mu_p \cdot r') I_0(\mu_p \cdot r') - E \cdot \mu_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r') \cdot I_1(\mu_p \cdot r')) = \frac{-1}{r'} I_0(\mu_p \cdot r') \quad (\text{A.27})$$

$$I_0(\mu_p \cdot r') \cdot K_1(\mu_p \cdot r') + I_1(\mu_p \cdot r') \cdot K_0(\mu_p \cdot r') = \frac{1}{\mu_p r'} \quad ([1] \text{eq } 8.477 - 2) \quad (\text{A.28})$$

$$E = I_0(\mu_p \cdot r') \quad (\text{A.29})$$

$$A = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} I_0(\mu_p \cdot r') + K_0(\mu_p \cdot r') \quad (\text{A.30})$$

$$C = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} I_0(\mu_p \cdot r') \quad (\text{A.31})$$

$$g_1(r, r') = \left( \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} I_0(\mu_p \cdot r') + K_0(\mu_p \cdot r') \right) \cdot I_0(\mu_p \cdot r) \text{ si } r < r' \quad (\text{A-32a})$$

$$g_2(r, r') = \left( \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} \cdot I_0(\mu_p \cdot r) + K_0(\mu \cdot r) \right) I_0(\mu_p \cdot r') \text{ si } r > r' \quad (\text{A-32b})$$

$$g(r, r') = \left( \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} I_0(\mu_p \cdot r_>) + K_0(\mu_p \cdot r_>) \right) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_<) \quad (\text{A.33})$$

$$r_> = \max(r, r') \text{ et } r_< = \min(r, r') \quad (\text{A.34})$$

$$g(r, r') = \left( M(\mu_p, r_a) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_>) + K_0(\mu_p \cdot r_>) \right) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_<) \quad (\text{A.35})$$

$$M(\mu_p, r_a) = \frac{\mu_p \cdot K_1(\mu_p \cdot r_a) - s_p \cdot K_0(\mu_p \cdot r_a)}{\mu_p \cdot I_1(\mu_p \cdot r_a) + s_p \cdot I_0(\mu_p \cdot r_a)} \quad (\text{A.36})$$

La solution générale :

$$G(r, r', z, z') = \frac{1}{2\pi \cdot d \cdot D_p} \sum_{n=0}^{\infty} \left( M(\mu_p, r_a) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_>) + K_0(\mu_p \cdot r_>) \right) \cdot I_0(\mu_p \cdot r_<) \sin(k_n(d - z)) \cdot \sin(k_n(d - z')) \quad (\text{A.37})$$

La distribution des porteurs est donnée par :

$$p(r, z) = \iint G(r, r', z, z') \cdot g(r', z' - z_0) dr' dz' \quad (\text{A.38})$$

Avec le même raisonnement on trouve pour la région P :

$$G'(r, r', z, z') = \frac{1}{2\pi \cdot (h - d_2) \cdot D_n} \sum_{n=0}^{\infty} \left( M(\mu_n, r_a) \cdot I_0(\mu_n \cdot r_>) + K_0(\mu_n \cdot r_>) \right) \cdot I_0(\mu_n \cdot r_<) \sin(k_n(z - d_2)) \cdot \sin(k_n(z' - d_2)) \quad (\text{A.39})$$

$$n(r, z) = \iint G'(r, r', z, z') \cdot g(r', z' - z_0) dr' dz' \quad (\text{A.40})$$

### Les équations de base de CASINO :

Nous allons présenter dans cette partie les équations de base de CASINO en dix étapes.

On commence par définir l'échantillon

- Orientation des couches : horizontales ou verticales.
- Composition des couches : L'élément (Z), sa densité (p) en g.cm<sup>-3</sup>, la fraction atomique (F), la masse atomique (A) et la fraction massique (C).
- Énergie (E) du faisceau en keV
- Diamètre (d) du faisceau en nm.

La deuxième étape est de définir les coordonnées d'atterrissage de l'électron sur l'échantillon X<sub>0</sub>, Y<sub>0</sub>.

$$X_0 = \frac{d\sqrt{\log(R_1)}}{2 \times 1.65} \times \text{COS}(2\pi R_2) \quad (\text{A.41})$$

$$Y_0 = \frac{d\sqrt{\log(R_1)}}{2 \times 1.65} \times \text{COS}(2\pi R_3) \quad (\text{A.42})$$

Où les variables R<sub>x</sub> désignent les nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1, et l'indice qui leur est associé est uniquement là pour les distinguer.

## Annexe

La troisième étape consiste à trouver la valeur de la section efficace élastique totale des atomes qui composent la région. Nous utilisons la formule de Newbury et Myklebust [2] Pour trouver ces sections.

$$5.21 \times 10^{-7} \times \frac{Z^2}{E^2} \times \frac{4\pi}{\alpha(1+\alpha)} \times \left( \frac{E+511}{E+1022} \right)^2 \quad (\text{A.43})$$

Où  $\alpha$  est le paramètre d'écran, définit par Hénoc et Maurice [3]

$$\alpha = 3,4 \times 10^{-3} \frac{Z^{2/3}}{E} \quad (\text{A.44})$$

Pour déterminer l'atome qui est responsable de la collision on utilise la formule suite [4]

$$P_j = \frac{\sum_{i=1}^j F_i \sigma_i}{\sum_{j=1}^n F_j \sigma_j} \quad (\text{A.45})$$

Dans cette équation où  $P_j$  est la probabilité de diffusion par l'atome  $j$ ,  $\sigma_i$  la section efficace de l'élément  $i$ ,  $F_i$  est la fraction atomique de l'élément dans la région et  $n$  le nombre d'éléments dans la région. On pose  $P_{j-1} \leq R_i < P_j$ , ainsi on peut déterminer l'atome  $j$  qui va être responsable de la collision.

L'étape suite consiste à calculer l'angle  $\varphi$  et  $\theta$

$$\varphi = R_3 \times 2\pi \quad (\text{A.46})$$

$\varphi$  ne dépend d'aucun paramètre physique

$$\theta = \cos^{-1} \left( 1 - \frac{2\alpha R_2}{1 + \alpha - R_2} \right) \quad (\text{A.47})$$

$\theta$  Dépend du matériau, de l'énergie (par le paramètre d'écran  $\alpha$ ) et d'un nombre aléatoire [2] :



L'étape six et sept est de calculer le libre parcours moyen de l'électron (A.48) et la distance entre deux collisions (A.49) [4]:

$$\lambda = \frac{1 \times 10^{21} \sum_{i=1}^n \frac{C_i A_i}{\rho}}{N_o \sum_{i=1}^n F_i \sigma_i} \quad (\text{A.48})$$

$$L = -\lambda \log(R_4) \quad (\text{A.49})$$

La huitième étape est de calculer la position de l'électron après une collision.

$$x = x_0 + L \times r_x \quad (\text{A.50})$$

$$y = y_0 + L \times r_y$$

$$z = z_0 + L \times r_z$$

Où  $r_x$   $r_y$   $r_z$  sont les cosinus directeurs à la position future.

La neuvième étape consiste à calculer la perte d'énergie, associée au matériau et ses diverses caractéristiques. Afin de conserver une grande plage de validité, CASINO utilise le modèle de perte d'énergie continue de Joy et Luo [5]

$$\frac{dE}{dS} = \frac{-7.85 \times 10^{-3} \rho \sum_{j=1}^n \frac{C_j Z_j}{F_j} \ln \left[ 1.116 \left( \frac{E_0}{J_j} + k_j \right) \right]}{E_0} \quad (\text{A.51})$$

Dans cette formule,  $J_j$  est le potentiel d'ionisation de l'atome  $j$   $E_0$  l'énergie lors de la collision précédente, et  $k_j$  une variable dépendante de  $Z$  [6]

La dernière étape consiste à vérifier si  $E$  a atteint le minimum fixé à 50 eV.

$$E = E_0 + L \times \frac{dE}{dS} \quad (\text{A.52})$$

### Reference

- [1] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", *Eighth Edition*, Academic Press, 936 (2014).
- [2] Newbury, D. E. et Myklebust, ROG. (1981), A monte carlo electron trajectory simulation for analytical electron microscopy, *Analytical Electron Microscopy*
- [3] Henoc, J. et Maurice, F. (1976), Characteristics of a Monte Carlo program for microanalysis study of energy loss, dans *Use of Monte Carlo calculations in Electron probe microanalysis and scanning electron microanalysis*.
- [4] Hovington, P., Drouin, D., Gauvin R., (1997a) CASINO A New Era of Monte Carlo Code in C Language for the Electron Beam Interaction Part I: Description of the Program.
- [5] Joy, D. C. et Luo, S. (1989) An Empirical Stopping Power Relationship for Low-Energy electrons.
- [6] Gauvin, R. et L'Espérance G. (1992) A Monte Carlo code to simulate the effects of fast secondary electrons on kAB factors and Spatial Resolution in the TEM.