

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

**UNIVERSITE LARBI BEN MHIDI OUM EL-BOUAGHI  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE  
DEPARTEMENT DE SCIENCES DE LA MATIERE**

**N° d'ordre :  
Série :**

**THESE**

Présentée pour obtenir le diplôme de doctorat en sciences en physique

**SPECIALITE : Sciences des matériaux**

**OPTION: Semiconducteurs**

**THEME**

**Etude par simulation de nitrure de  
gallium (GaN) et ses alliages**

Par :

**LEGHRIB LAZHAR**

Soutenue le : 18/12 /2018

**Devant le jury :**

<b>Président :</b>	Lazhar Hadjeris	Prof.	Université d'Oum-El-Bouaghi
<b>Rapporteur :</b>	Abelkader Nouiri	Prof.	Université d'Oum-El-Bouaghi
<b>Examineurs :</b>	Yassine Sayad	M.C.A.	Université de Souk Ahras
	Mohammed Ledra	M.C.A	Centre Universitaire de Mila

## Remerciements

Je voudrai tout d'abord remercier Mr Lazhar HADJRIS, directeur de laboratoire des matériaux et structures des systèmes électromécaniques et leur fiabilité (LMSSEF), qui m'a permis de rejoindre l'équipe LMSSEF et de découvrir le travail d'une équipe de recherche au sein de l'université Mohamed Elarbi Oum Elbouaghi, je le remercie aussi pour être président de jury de soutenance.

Je tiens à remercier tout particulièrement monsieur Abdelkader NOUIRI pour leur conseils, leur encadrement, pour tous les moyens nécessaires qu'il a su mettre à ma disposition pour mener à bien ma thèse, pour tout qu'il a fait pour moi.

Je tiens à remercier aussi les membres de jury Monsieur Yassine Sayad de l'Université de Souk Ahras et Monsieur Mohammed Ladraa de Centre universitaire de Mila, d'accepter juger ce travail.

Je remercie également l'ensemble de mes professeurs de l'université Mohamed Elarbi Oum Elbouaghi qui m'ont suivi durant mes années d'étude et qui ont su faire partager leurs connaissances.

## **Table des Matières**

## Table des matières

Introduction générale .....	8
-----------------------------	---

### Chapitre I: Le nitrure de gallium et ses alliages

<b>I. Les avantages, les intérêts et les applications de GaN et ses alliages .....</b>	<b>11</b>
<b>II. Propriétés structurales et optoélectroniques .....</b>	<b>12</b>
II.1. Propriétés structurales .....	13
II.2. Propriétés optoélectronique .....	15
II.2.1. Indice de réfraction .....	15
II.2.2. Gap d'énergie interdite dans le GaN .....	16
II.2.3. Le champ de claquage et la mobilité électronique .....	17
II.2.4. Le coefficient d'absorption .....	17
<b>III. Effet de la température et de la fraction molaire sur les propriétés du AlGaN .....</b>	<b>18</b>
III.1. Effet de la température .....	19
III.1.1. Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température .....	19
III.1.2. La conductivité thermique de GaN .....	20
III.1.3. La température de Debye et la chaleur spécifique de GaN .....	21
III.1.4. La dilatation thermique .....	22
III.1.5. La mobilité électronique .....	23
III.2. L'effet de la fraction molaire sur les propriétés de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	24
III.2.1. Evolution du gap d'énergie dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .....	25
III.2.2. La conductivité thermique .....	26
III.2.3. Le coefficient d'absorption .....	27
III.2.4. La mobilité électronique .....	28
III.2.5. La capacité thermique, la densité volumique et le poids atomique .....	29
<b>IV. Les nanostructures .....</b>	<b>30</b>
IV.1. Les procédés de fabrication .....	30
IV.1.1. La voie descendante (top-down) .....	31
IV.1.2. La voie ascendante (bottom-up) .....	31
IV.2. Effets de la diminution de la taille sur les propriétés électronique et thermiques .....	31
IV.2.1. Effets sur les propriétés électronique .....	32
IV.2.2. Effets sur les propriétés thermiques .....	33
IV.3. Les procédés de fabrication des nanomatériaux et les techniques de croissance .....	34
IV.3.1. Les procédés de fabrication des nanomatériaux .....	34
IV.3.2. Les techniques de croissance .....	35
IV.4. Les nanostructures à base de nitrure de gallium (GaN) .....	36
<b>V. Références bibliographiques du chapitre I .....</b>	<b>38</b>

### Chapitre II: Quelques techniques de caractérisation des semi-conducteurs

<b>I. La microscopie électronique à balayage (MEB) .....</b>	<b>46</b>
I.1. Formation de l'image et la résolution spatiale .....	47
I.2. Le pouvoir de résolution .....	47
I.3. Formation de l'image - Traitement de l'information .....	48
I.4. La résolution spatiale .....	48
I.5. Conditions de balayage .....	49
I.6. Courant et taille de sonde .....	49

<b>II. La luminescence dans le GaN</b> .....	49
II.1. Mécanismes de recombinaison .....	50
II.1.1. Les recombinaisons radiatives ou bande à bande .....	50
II.1.2. Les mécanismes de recombinaison via les centres profonds .....	50
II.1.3. Les recombinaisons Auger .....	51
II.2. La cathodoluminescence .....	51
II.2.1. La résolution spatiale en cathodoluminescence .....	52
II.2.2. Les avantages de la cathodoluminescence .....	53
II.2.3. L'excitation locale et la distribution de la profondeur .....	54
<b>III. Les courants induits par un faisceau d'électrons (EBIC)</b> .....	56
<b>IV. Microscopie à force atomique (AFM)</b> .....	57
<b>V. Autres méthodes</b> .....	58
V.1. Microscope électronique à transmission (TEM) .....	59
V.2. Microscope électronique à transmission et à balayage (STEM) .....	59
V.3. Microscope à effet tunnel (STM) .....	59
V.4. Spectromètre Auger .....	59
V.5. L'électroluminescence et la photoluminescence .....	60
<b>VI. Effets de l'irradiation par un faisceau d'électrons</b> .....	60
VI.1. Les effets thermiques .....	61
VI.1.1. L'échauffement de l'échantillon .....	62
<b>VII. Références bibliographiques du chapitre II</b> .....	64

### **Chapitre III: Modélisation de l'interaction électrons-matière (GaN et ses alliages)**

<b>I. Rappels sur les interactions électrons-matière</b> .....	67
I.1. Les collisions élastiques .....	69
I.2. Les collisions inélastiques .....	69
I.3. Conséquences d'interaction élastique .....	70
I.4. Conséquences d'interaction inélastique .....	71
I.5. La cathodoluminescence et le signal EBIC .....	71
I.6. La section efficace et le libre parcours moyen .....	72
I.6.1. La section efficace .....	72
I.6.2. La section efficace différentielle .....	72
I.6.3. Formule de Rutherford .....	74
I.6.4. Le libre parcours moyen .....	75
<b>II. Transfert de la chaleur et les vibrations de réseau</b> .....	76
II.1. Transfert de la chaleur dans les solides .....	76
II.1.1. Transfert de chaleur par convection .....	77
II.1.1. Transfert de chaleur par rayonnement .....	77
II.1.1. Transfert de chaleur par conduction .....	78
II.2. Vibrations de réseau .....	78
II.2.1. Modèle classique de vibrations .....	79
II.2.2. Chaleur spécifique des solides .....	83
II.2.2.1. Quantification de l'énergie .....	83
II.2.2.2. Conservation de l'énergie .....	84
II.2.2.3. La capacité de la chaleur .....	85
II.2.2.4. Contribution des phonons à la chaleur spécifique et la conductivité thermique .....	90
<b>III. La méthode de Monte Carlo</b> .....	92
III.1. Génération de nombre aléatoire .....	94

III.2. La marche aléatoire .....	94
III.3. Exemple d'application de la méthode de Monte Carlo .....	95
<b>IV. La méthode de Monte Carlo pour l'interaction electron-matière .....</b>	<b>96</b>
<b>IV.1. La profondeur de pénétration, le volume de génération et distribution de charges générées</b> .....	<b>96</b>
IV.1.1. La profondeur de pénétration .....	96
IV.1.2. Le volume de génération .....	98
IV.1.3. Distribution des porteurs générés et le taux d'injection .....	99
<b>IV.2. La cathodoluminescence .....</b>	<b>100</b>
IV. 2.1. Dépendance en température de la cathodoluminescence .....	102
<b>IV.3. Synthèse sur les effets secondaires du faisceau électronique (l'augmentation de la</b> <b>temperature pendant le bombardement) .....</b>	<b>103</b>
<b>IV.3.1. Quelques modèles existent concernant l'augmentation de la température locale</b> <b>pendant l'irradiation électronique .....</b>	<b>104</b>
<b>V. Le model proposé .....</b>	<b>121</b>
V.1. Modélisation de la structure de l'échantillon .....	122
V.2. La diffusion des électrons (la marche aléatoire) .....	123
V.3. Calcul du la profondeur de pénétration dans la matière .....	124
V.4. La détermination de la concentration des porteurs minoritaires .....	125
V.5. Le signal de la cathodoluminescence et d'EBIC .....	126
V.6. Calcul de l'augmentation de la température .....	128
V.6. .1. L'influence de la durée de balayage (dynamique moléculaire) .....	131
V.7. Programmation .....	132
<b>VI. Références bibliographiques du chapitre III .....</b>	<b>136</b>

## Chapitre IV: Résultats et discussions

<b>I. Trajectoire des électrons .....</b>	<b>144</b>
<b>II. La profondeur de pénétration .....</b>	<b>146</b>
<b>III. Le volume de génération (volume d'interaction) .....</b>	<b>149</b>
<b>IV. Signal de la cathodoluminescence .....</b>	<b>150</b>
IV.1. L'influence du coefficient d'Absorption ( $\alpha$ ).....	151
IV.2. L'influence de la longueur de Diffusion ( $L_n$ ). .....	151
IV.3. L'effet de la fraction molaire .....	152
<b>V. Le courant induit par faisceau électronique (EBIC) .....</b>	<b>153</b>
<b>VI. Les effets secondaires de du faisceau électronique (l'augmentation de la température</b> <b>locale) .....</b>	<b>155</b>
VI.1. L'effet de l'énergie d'accélération .....	157
VI.2. L'effet du courant de faisceau .....	161
VI.3. L'effet de la durée d'irradiation .....	164
VI.4. L'effet de la fraction molaire .....	167
VI.5. La comparaison avec des résultats expérimentaux .....	168
VI.6. La distribution de la température locale dans des heterostructures AlN/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N/AlN et GaN/ Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N /GaN .....	173
VI.7. Une brève synthèse sur l'influence de la temepature sur les propriétés intrinsèque de GaN .....	175
<b>VII. Références bibliographiques du chapitre IV .....</b>	<b>177</b>
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>181</b>

# **Introduction générale**

Le nitrure de gallium (GaN) est un bon candidat pour la réalisation des composants optiques et optoélectroniques dédiés aux applications télécoms telles que les diodes électroluminescentes et les dispositifs électroniques à haute température/forte puissance, aux transistors à haute mobilité électronique (HEMT) et les diodes lasers (LD) [1]. Les nanotubes GaN sont proposés pour des applications en électronique nanométrique, en optoélectronique et en détection biochimique [2]. Les techniques de microscopie électronique à balayage (MEB) jouent un rôle clé dans la caractérisation de divers matériaux semi-conducteurs inorganiques et/ou organiques, micro/nanostructures et dispositifs. La puissance des méthodes MEB réside principalement dans l'imagerie, la caractérisation et le diagnostic des propriétés locales proches de la surface. Parmi une variété de méthodes MEB, les méthodes de cathodoluminescence (CL) et de courant induit par faisceau d'électrons (EBIC) ont été largement utilisées pour la caractérisation des phénomènes de génération / recombinaison et des propriétés électriques des semi-conducteurs de masse et des structures à semi-conducteurs.

La caractérisation de ces semi-conducteurs utilisant des techniques de faisceaux d'électrons basés sur l'interaction électrons-matière offrent de nombreux avantages [3]. En générale, les interactions électron-matière (événements de diffusion) peuvent être divisées en deux catégories ; interactions élastiques et inélastiques [3]. L'énergie transférée d'un faisceau d'électrons incident (interaction inélastique) au matériau peut provoquer des vibrations collectives d'atomes (génération de phonons); ces vibrations sont équivalentes au flux de chaleur dans l'échantillon. Les mécanismes de perte d'énergie des électrons qui ont lieu dans la région de diffusion peuvent produire un échauffement local de l'échantillon [4].

Plusieurs travaux sur l'augmentation de la température locale (réelle) d'un échantillon soumis aux radiations d'un faisceau d'électron: Castaing (1951) [5], Vigne et Einstein (1964) [6], Talmon et Thomas (1978) [7], Roll (1980) [8], Randolph (2005) [9] et Nouri (2006 et 2014) [4, 10]. Cependant, à l'échelle nanométrique, Nouri et al. [6] ont démontré qu'une faible variation du courant du faisceau primaire peut considérablement augmenter le degré de chauffage de surface, en particulier à des tensions d'accélération plus faibles. Enfin, dans le travail récemment réalisé par Nouri [10], il a introduit la dynamique moléculaire avec la méthode de Monte Carlo afin d'estimer l'influence de la durée d'analyse sur l'effet thermique.

Le travail présenté dans cette thèse a eu pour objectifs de mettre en évidence et d'étudier les principales propriétés de GaN et ses alliages sous le bombardement électronique à l'échelle nanométrique. Donc pour élucider les effets de l'échauffement due au faisceau d'électrons, un modèle numérique hybride (Monte Carlo-dynamique moléculaire) basé sur les travaux de Nouri [10] a été développé pour calculer la profondeur de pénétration des électrons, le signal

cathodoluminescence ( $I_{CL}$ ), le courant induit par faisceau électronique ( $I_{EBIC}$ ) et l'élévation de la température locale lors de la caractérisation par faisceau d'électrons de GaN et ses alliages, en fonction de l'énergie du faisceau, le courant de faisceau et la géométrie de la nanostructure, la chaleur produite peut être considérable.

Dans le premier chapitre, nous rappellerons les principales propriétés de GaN et ces alliages. Dans le deuxième chapitre, nous présentons une brève synthèse sur les techniques de caractérisation des semi-conducteurs composés III-V (GaN). Le troisième chapitre sera consacré à la modélisation de l'interaction électron-matière (la cathodoluminescence, élévation de température locale pendant l'irradiation et leur effet sur les propriétés de matériau caractérisé). Dans le quatrième chapitre, nous présentons les résultats de simulation obtenus, ainsi la comparaison de ces résultats avec les résultats expérimentaux disponibles en littérature.

# **Chapitre I**

## **Le nitrure de galium et ses alliages**

## I. Les avantages, les intérêts et les applications de GaN et ses alliages

Dans ce chapitre nous allons reporter un résumé sur les principales propriétés de GaN et ses alliages. Le GaN poly-cristallin a été synthétisé pour la première en 1932 [11] au début des années 1970, la première croissance des couches épitaxiales de GaN a été rapporté dans la littérature [11, 12, 13, 14]. Le GaN et ses alliages avec le nitrure d'indium (InN) et le nitrure d'aluminium (AlN) sont actuellement l'objet de beaucoup de recherches concernant les semi-conducteurs [15].

La structure de bande interdite directe est mise à profit pour la réalisation de dispositifs optiques (GaN et alliages), ce qui autorise un spectre d'applications du visible aux ultraviolets, en émission et en détection : le matériau GaN est le seul qui puisse prétendre à des applications optoélectroniques aux courtes longueurs d'onde (bleu, ultraviolet, blanc). Les recherches sur le GaN sont commencées dans les années 60 et la première bleue- LED réalisé à base de GaN en 1971 [16]. Le GaN présente les avantages d'une bande interdite directe, d'une grande stabilité chimique, de très bonnes propriétés mécaniques, mais également de propriétés physiques intéressantes qui le rendent non seulement attractif pour les émetteurs bleus, mais également pour l'électronique haute température, haute puissance et haute fréquence. Sa large bande interdite permet également d'envisager son utilisation dans des photo-détecteurs UV insensibles au rayonnement visible du soleil.

Les III-nitrures ont des propriétés intrinsèques supérieures, comme le champ de claquage électrique élevée (de 3,3 MV.cm<sup>-1</sup> pour GaN à 11,7 MV.cm<sup>-1</sup> pour AlN), la haute mobilité d'électrons ( $\approx 2\,000\text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ), et une large bande interdite (de 3,4 pour GaN eV à 6,2 eV pour AlN) en comparaison avec des matériaux utilisés souvent pour les composants électroniques comme le Si ou GaAs [17]. Ainsi la forte conductivité thermique du GaN (1.3 W.cm<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup> contre 0.5 W.cm<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup> pour le GaAs) et de certains substrats (diamant > 9 W.cm<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>, SiC > 5 W.cm<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>) est avantageuse pour l'évacuation de la chaleur. Mais, le développement de GaN a été limité par la mauvaise qualité du matériau obtenu, et les échecs dans les tentatives de dopage p. Des recherches ont abouti à un matériau de bonne qualité, et dans le développement de dopage p [18]. Cependant, les années 1990 ont apporté des avancées significatives dans la sophistication des techniques de croissance, la pureté des produits chimiques utilisés pour le dépôt du film, l'introduction contrôlée et l'activation des impuretés sélectionnées, et les progrès dans les techniques de traitement. La plupart des obstacles mentionnés ci-dessus ont été suffisamment surmontés, et les dispositifs électroniques et optiques ont été démontrés et partiellement commercialisés.

Autres applications importantes des LED à base de GaN sont de retour éclairage (téléphones cellulaires, ordinateurs portables, ...), la lumière blanche (lampes de poche, phares de voiture),

l'éclairage général (intérieur et extérieur), des systèmes de purification de l'eau, et médicales (capteurs, chirurgicale lunettes) [19].

Le développement futur dans ce domaine va certainement être alimenté par la demande croissante de haute température, applications haute puissance. Pour des applications dans le génie électrique ou l'électronique, qui nécessitent à la fois des tensions maximales et des temps de commutation les plus courts possibles les propriétés des GaN sont bien supérieures à celles du Si ou de GaAs. D'une façon générale, les nitrures du groupe III-V offrent une combinaison de valeur de comportement électrique, optique et piézoélectrique, et permettent la fabrication de diodes électroluminescentes, LDs, détecteurs, et des transistors et les principaux domaines actuels d'application industrielle des nitrures d'éléments III, sont en particulier les suivants [20]:

- Les diodes électroluminescentes émettant dans le violet, le bleu, le vert, l'ambre (hétérostructures GaN/InGaN) et l'ultra-violet (hétérostructures GaN/AlGaInN).
- Les lasers bleus (hétérostructures GaN/AlGaInGaN).
- Les transistors à effet de champ à gaz d'électrons bidimensionnels (hétérostructures GaN/AlGaIn).
- Les photo-détecteurs dans l'ultraviolet.
- Et des transistors à haute mobilité électronique d'AlGaIn/GaN pour l'application biocapteur [21].

## II. Propriétés structurales et optoélectroniques

L'intérêt important et croissant dans les semiconducteurs III-nitrures réside dans la large gamme d'applications utiles qui peuvent être obtenus, à partir de transistors de haute mobilité d'électrons (HEMT) à de LED et les lasers. Cependant, les matériaux de nitrure III sont généralement obtenus par croissance épitaxiale sur des substrats étrangers, qui conduisent à la formation d'un grand nombre de dislocations et les variations de contraintes significatives dans les couches épitaxiales qui affectent sérieusement la performance des dispositifs basés sur eux. Le GaN est un semi-conducteur de la famille des «III-V», étant composé d'atomes des colonnes III et V du tableau périodique [20].

**Tableau (II-1)** Les principaux éléments des rangées II, III, IV, V et VI, qui constituent les semi-conducteurs.

II	III	IV	V	VI
4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O
12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S
30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se
48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te
80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po

## II.1. Propriétés structurales

Les semi-conducteurs III-nitrides existent sous deux formes cristallines : la phase wurtzite (hexagonale) (figure (I.1) (a)) et la phase blende de zinc (cubique) (figure (I.1) (b)). Le GaN, AlN et ses alliages peuvent exister dans la phase cubique (zinc-blend) et dans la phase hexagonale (wurtzite), ce dernier étant thermodynamiquement favorable. La structure cristalline de type wurtzite, présentée à la figure (I.1) (a), appartient au groupe d'espace P6<sub>3</sub>mc dans la notation d'Hermann-Mauguin. La structure wurtzite se compose de deux sous-réseaux hexagonaux compacts, l'un occupé par l'azote (N) et l'autre par l'élément III (Ga, Al, In), décalés de  $u$  suivant l'axe [0001] ( $u = 3c/8$  pour une structure hexagonale compacte). Dans la structure de wurtzite idéal  $c$  est liée à  $a$  une, du côté de l'hexagone de base, par (tableau) [22].

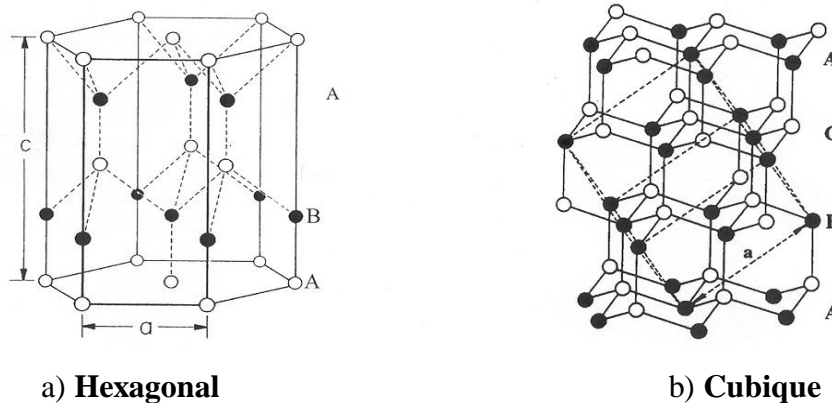


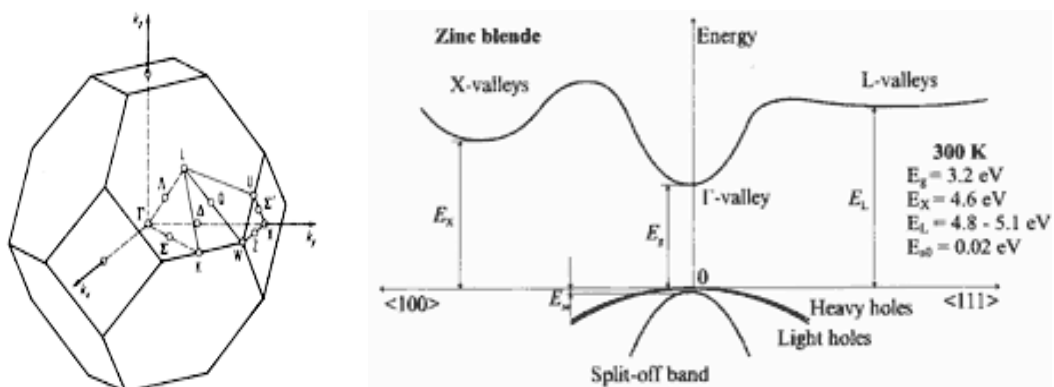
Figure (I.1) Structure a) wurtzite et b) blende de zinc des nitrides d'éléments III. [22].

Tableau (II-2) Paramètres de maille des trois nitrides [22].

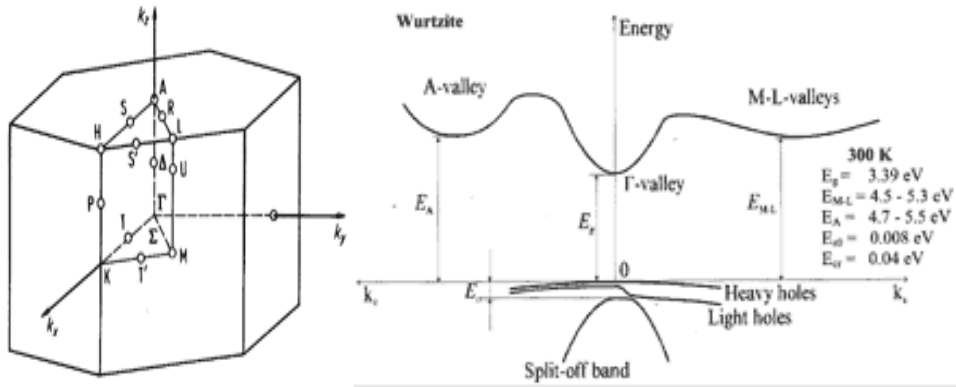
Paramètre	AlN	GaN	InN
$a$	3.112 Å	3.189 Å	3.545 Å
$c$	4.982 Å	3.185 Å	3.703 Å
$c/a$ (1.663)	1.601	1.626 Å	1.608
$u/c$ (0.375)	0.382	0.377	0.375

### II.1.1. La zone de Brillouin

De même que la description de la maille élémentaire suffit à décrire tout le réseau cristallin il suffit de connaître les propriétés de la zone de Brillouin pour décrire tout l'espace réciproque. A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie - vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $k$  caractérisant la propagation de l'onde considérée. Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centre. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin est représentée sur la figure (I.2). Elle présente un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $k = 0$ ), et un certain nombre d'axes de symétrie : il existe trois axes équivalents  $\langle 100 \rangle$  coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents  $\langle 111 \rangle$ , avec les points correspondants L.



**Figure (I.2)** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique faces centrées. Zinc blende (Cubic) GaN [23].



**Figure (I.3)** Première zone de Brillouin d'un réseau cubique faces centrées. Wurtzite GaN (*hexagonale*) GaN [23].

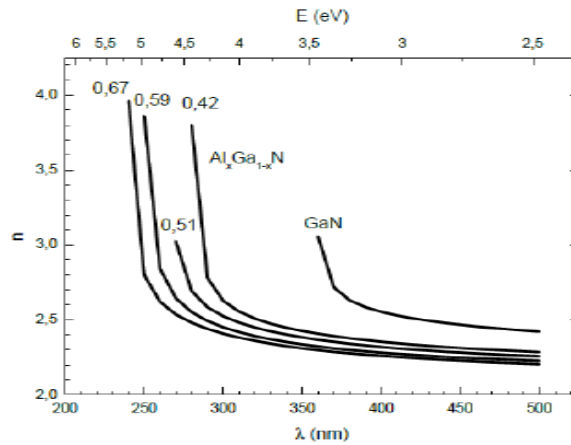
## II.2. Propriétés optoélectronique

Les propriétés optiques d'un matériau regroupent principalement son indice de réfraction et son coefficient d'absorption. Ces propriétés sont primordiales pour les composants optoélectroniques puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant. Par exemple, dans un dispositif composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. On peut alors confiner la lumière dans une couche particulière, comme c'est le cas pour les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications cellules solaires afin d'augmenter l'efficacité d'absorption de la lumière. Les nitrures d'éléments III présentent une grande variété de structure de bande [20].

### II.2.1. Indice de réfraction

L'indice de réfraction est un paramètre très utile dans les structures laser, pour cela, la connaissance de ce paramètre est indispensable pour le confinement optique, la propagation des photons dans le guide d'onde ....etc. Dans le cas du GaN, l'indice de réfraction est égal à environ 2,3 [24], alors que pour l'InN il vaut environ 2,9 dans l'infrarouge [25]. Anani et al [26] ont estimé expérimentalement la variation de l'indice de réfraction des alliages de nitrures d'éléments III en fonction de l'énergie d'un photon absorbé par le matériau. Le tracé de l'indice de réfraction en fonction de la composition reporté sur la Figure (I.4) montre que l'équation qui relie ces valeurs est de type quadratique. La variation de l'indice de réfraction ordinaire  $n$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$ , dans la gamme de transparence, est décrite par une loi de type Sellmeier [27]:

$$n(\lambda) = \sqrt{a + \frac{b \cdot \lambda^2}{\lambda^2 - c^2}} \quad (I.1)$$

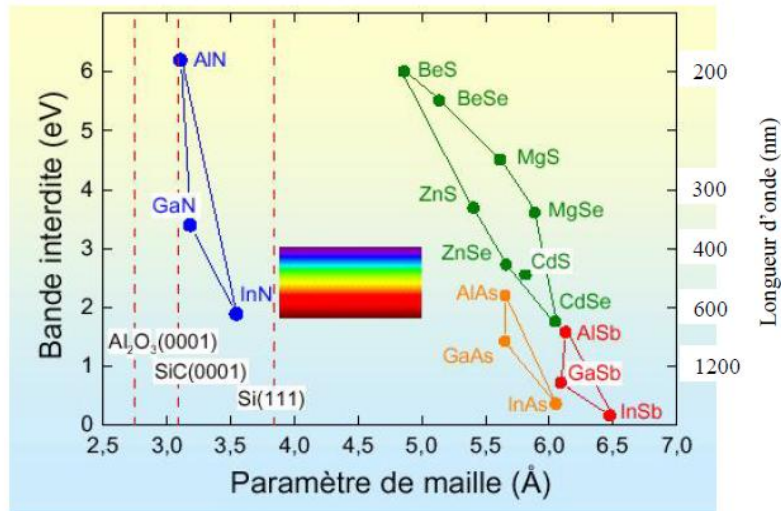


**Figure (I.4)** Indice de réfraction (ordinaire) pour le GaN et l'AlGaN en fonction de la longueur d'onde [28].

### II.2.2. Gap d'énergie interdite dans le GaN

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux), et donc dans le fonctionnement des composants utilisés en optoélectronique. On peut remarquer, pour l'instant, que dans un SC à gap direct un électron du haut de la  $B_V$  qui acquière une énergie  $E_g$  passe dans la  $B_C$  sans changer de quantité de mouvement ce qui n'est pas le cas dans un SC à gap indirect.

La largeur de la bande interdite joue aussi un rôle important selon l'application envisagée. Les semi conducteurs à grand gap permettent d'atteindre des tensions de claquage et des températures de fonctionnement assez élevées, ce qui rend possible leur utilisation dans les dispositifs à haute tension d'alimentation. III-nitrides présentent toujours une bande interdite directe, qui couvre une large gamme d'énergie qui va du mi-infrarouge pour InN à l'UV profond pour AlN (Figure (I.5)). SiC et GaN possèdent un gap deux à trois fois plus grand et le champ de claquage est de l'ordre de grandeur plus grand que celles de Si, le GaAs ou InP [29].



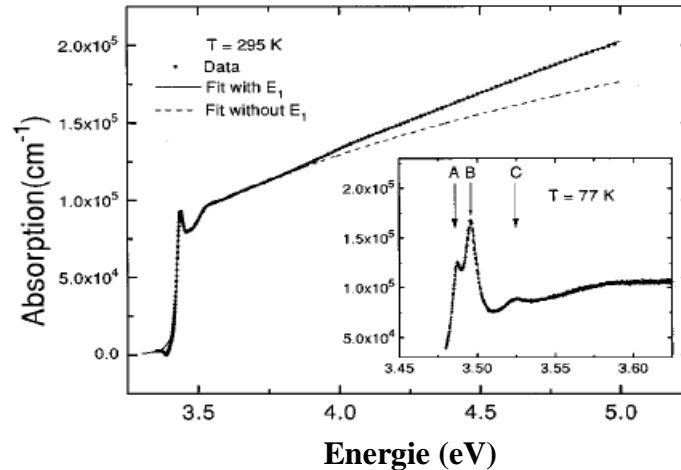
**Figure (I.5)** La bande interdite pour le group III nitrides en fonction du paramètre de maille.

### II.2.3. Le champ de claquage et la mobilité électronique

Une propriété électrique importante dans les semi-conducteurs est la capacité de déplacement des électrons sous l'effet d'un champ électrique, appelée mobilité électronique. La mobilité électronique dépend fortement de la qualité cristallographique du matériau. Le GaN possède une mobilité électronique satisfaisante, ce qui favorise la montée en fréquence des composants électroniques (les HEMTs par exemples). Le champ de claquage d'un matériau représente le champ électrique maximal qu'il peut supporter. Comme pour tous les matériaux à large bande interdite, le champ de claquage du GaN est très élevé. Les composés III-N sont des matériaux de choix pour la réalisation de dispositifs microélectroniques hyperfréquence et de puissance. La combinaison d'un champ de claquage important ( $>3.3 \text{ MV.cm}^{-1}$  pour GaN) avec la possibilité d'atteindre des mobilités et des densités électroniques élevées permet à la technologie GaN d'être aujourd'hui largement acceptée comme un véhicule pour les applications haute fréquence/haute puissance [29].

### II.2.4. Le coefficient d'absorption

Dans la figure (I.6), le spectre d'absorption de GaN à la température ambiante est présenté. L'encart est une vue agrandie de la structure excitonique à  $77^\circ\text{K}$ . A température ambiante, les excitons A et B se chevauchent en raison de l'élargissement de phonon pour former un pic alors que l'exciton C apparaît comme un changement de pente. À  $77^\circ\text{K}$ , les excitons A, B, et C sont clairement résolus montrant l'absorption excitonique en raison des trois bandes de valence [30].



**Figure (I.6)** Le spectre d'absorption de GaN à la température ambiante [30].

### III. Effet de la température et de la fraction molaire sur les propriétés du GaN

Les alliages semiconducteurs, avec la richesse de leurs structures électroniques et leurs propriétés thermiques, électriques, ont trouvé une large application dans les dispositifs optoélectroniques. Il est donc impératif de donner quelques notions de base traitant ce sujet, en reliant les propriétés des alliages semiconducteurs à leurs constituants, notamment à la température et de a la fraction molaire. L'influence de la température et de la fraction molaire dans des matériaux utilisées (caractérisées) se traduit par une évolution de leurs propriétés physiques telles que : largeur de la bande interdite, concentration intrinsèque de porteurs, longueur de diffusion, coefficient d'absorption, la conductivité thermique, mobilité des porteurs de charges, etc. Dans cette section nous allons présenter une brève étude de l'effet de la température et de la fraction molaire sur les paramètres physiques intervenant dans les calculs dans le chapitre de modélisation (l'intensité de la cathodoluminescence et l'augmentation de la température locale sous l'impact un faisceau électronique). Pour mieux comprendre la dépendance en température et de la fraction molaire, nous utiliserons les expressions analytiques proposées dans la littérature qui permettent d'expliquer d'une manière adéquate les différents comportements liés à ces paramètres caractéristiques. De plus, il est nécessaire de connaître l'ordre de grandeur pour la compréhension et l'interprétation des résultats obtenus par la simulation. Nous allons introduire des variations à certains paramètres tels que la chaleur spécifique, la conductivité thermique, qui sont considérés comme des constantes dans l'ancien modèle de simulation de Nouri et al [31]. En réalité, ils varient en fonction de la température. Pour améliorer ce modèle et pour étudier l'influence de la température sur les paramètres physiques tels que la bande interdite ( $E_g$ ), la longueur de diffusion ( $L_n$ ), la concentration intrinsèque ( $n_i$ ) et autres, ces derniers sont exprimés en fonction de la température.

### III.1. Effet de la température

Suivant le développement de la technologie surtout dans le domaine des puits quantiques récemment, le GaN et ces alliages ont attiré une grande attention vue son importance remarquable dans le domaine d'application comme diode laser. Les composants de technologie GaN présentent des effets parasites dus aux matériaux et à sa « faible maturité » qui limite leurs caractéristiques optoélectroniques. Plusieurs paramètres comme la chaleur spécifique, la conductivité thermique, la bande interdite, la température de Debye et la dilatation thermique peuvent définir les propriétés thermiques du nitrure de gallium. Des études ont été réalisées pour améliorer l'évacuation de la chaleur et voire l'effet de la température sur ces paramètres cela implique une limitation importante du fonctionnement des composants à base de GaN [32,33], Il est donc primordial d'évaluer exactement la température du composant pendant la caractérisation.

#### III.1.1. Evolution du gap d'énergie interdite en fonction de la température

La taille de la bande interdite confère des caractéristiques optoélectroniques importantes à chaque semi-conducteur. En effet, la largeur de bande interdite fixe la limite en température en dessous de laquelle le dispositif peut fonctionner sans détérioration, ainsi que l'aptitude du semi-conducteur à résister aux radiations.

D'après [34 ,35], deux mécanismes sont responsables à la diminution de l'énergie de bande interdite d'un semiconducteur lorsque sa température augmente:

- *la dilatation thermique*, qui modifie les positions des bandes de valence et de conduction.
- *les interactions électron-phonon*, qui induisent un décalage des positions relatives des bandes de valence et de conduction. C'est ce phénomène qui donne lieu à la plus forte contribution dans la variation en température d' $E_g$ .

Pour décrire la variation du gap en fonction de la température, on utilise généralement la loi de Varshni qui s'écrit :

$$E_g(T) = E_g(T_0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (I. 2)$$

Où  $E(T_0)$  est le gap à la température  $T_0$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des paramètres ajustables qui dépendent de la nature du semi-conducteur.

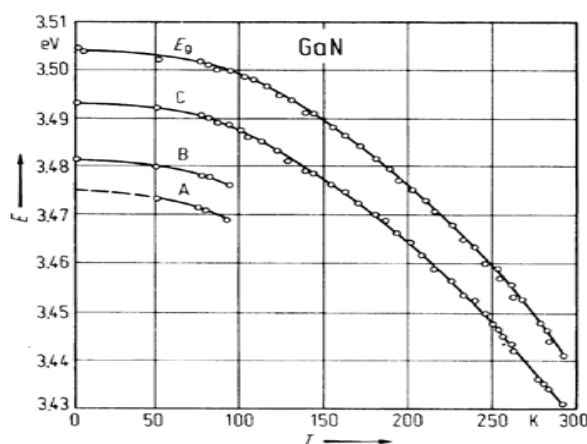
**Tableau (I-3)** Paramètres de Varshni et gap d'énergie du GaN et de l'AlN [37]

Matériau	$E_g(300K)$ [eV]	$\alpha$ [eV.K <sup>-1</sup> ]	$\beta$ [K]
GaN	3.4	$9.09 \cdot 10^{-4}$	800
AlN	6.2	$18.0 \cdot 10^{-4}$	1462

La variation de la bande interdite avec la température a été mesurée pour le GaN à partir d'analyse par photoluminescence du spectre de réflexion de l'exciton du nitrure de gallium massif réalisé par Monemar [36] et donne une relation empirique précise de l'évolution de la bande interdite en fonction de la température :

$$E_g(T) = 3.503 - \frac{(5,08 \cdot 10^{-4} T^2)}{T - 996} \text{ eV pour } T < 295 \text{ K} \quad (\text{I.3})$$

La validité de cette expression est limitée à des températures inférieures à la température ambiante  $T < 300^\circ\text{K}$ , avec une incertitude de  $0.002\text{eV}$ .

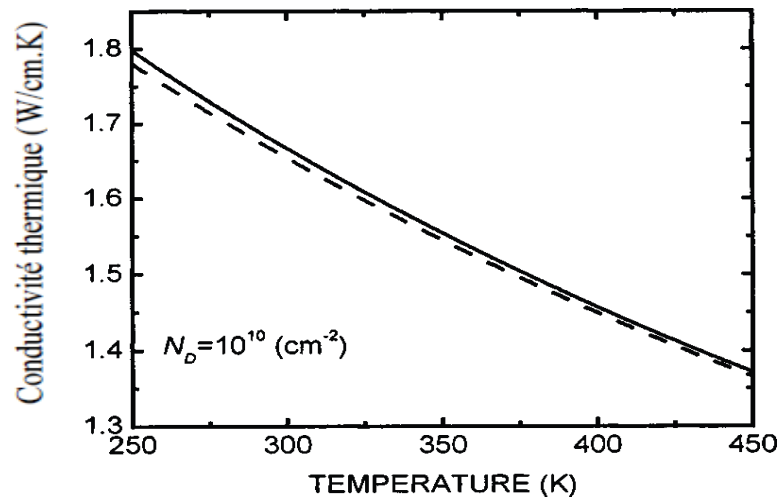


**Figure (I.7)** Evolution du gap d'énergie de GaN en fonction de la température. Les courbes A, B et C font référence aux excitons du même nom [36].

### III.1.2. La conductivité thermique de GaN

La conductivité thermique est la propriété cinétique qui est déterminée par les contributions des degrés de liberté électronique : de rotation et de vibration. Dans les semiconducteurs, à cause des faibles densités d'électrons de conduction et de trous, la contribution principale au transport de chaleur vient des phonons. Dans un cristal pur, la conductivité thermique est déterminée uniquement par le processus de la diffusion des phonons. Dans un cristal réel, elle est déterminée aussi par les défauts ponctuels. De toutes les propriétés thermiques, la conductivité thermique est la plus affectée par les défauts de structure. Concernant le group III-V, la conductivité thermique du nitrure de gallium varie de façon significative en fonction de la température (interaction phonon-phonon), de la concentration des défauts cristallins dans le matériau et de la concentration des impuretés (Figure (I.8)) [38]. Elle a été mesurée sur différents types d'échantillons : couche mince sur substrat saphir, par la méthode MVPE [39] et monocristaux de GaN [40]. Les valeurs obtenues sont respectivement  $1.3\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$  et  $1.7\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . D'un point de vue thermique, les composants à base de GaN ont des

conductivités thermiques bien meilleures que les composants à base d'autres matériaux comme GaAs, Si par exemple [41].



**Figure (I.8)** Evolution de la conductivité thermique du GaN wurtzite en fonction de la température [38].

Soit  $k(T_0)$  la conductivité thermique à  $T_0$ . Alors la variation avec la température est [42]:

$$k(T) = k(T_0) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^\alpha \quad (I.4)$$

Avec  $k(T_0)$  est la valeur à 300 K. A partir des premières expériences, on a extrait  $k(T_0) = 1,3$  W/cm.K pour le GaN en volume [43]. Cependant, des mesures ultérieures des structures épitaxiales ont donné des valeurs plus élevées [44], et une forte dépendance à la densité de dislocation a été observée [45]. Le paramètre  $\alpha$ , qui modélise la diminution avec la température, est étalonné par rapport aux données expérimentales mesurées [46,47].

**Tableau (III-4)** Résumé de paramètres pour la conductivité thermique [42].

Matériau	k (W/cm.K) (a $T_0=300^\circ\text{K}$ )	$\alpha$
GaN	1.30	-0.43
AlN	2.80	-1.7

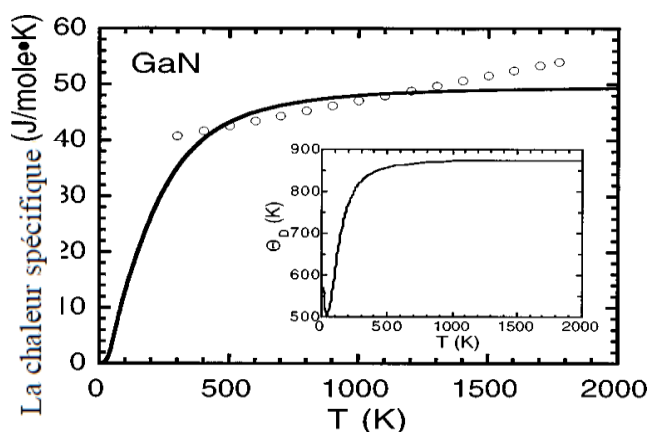
### III.1.3. La température de Debye et la chaleur spécifique de GaN

Pour la température de Debye  $\theta_D$ , elle caractérise la valeur maximale des énergies des vibrations. Elle a été calculée par *Polian et al* [48] à partir de la chaleur spécifique ou encore par *Demidienko et al* [49] à partir des propriétés élastiques. Les valeurs obtenues sont respectivement de  $700^\circ\text{K}$  et  $650^\circ\text{K}$ . Concernant la chaleur spécifique, dans les semi-conducteurs, l'énergie apportée a pour effet une augmentation du nombre de phonons présents, les électrons des bandes de conduction et les trous des bandes de valence étant en général en nombre insuffisant pour jouer un rôle important par

rapport aux phonons. La capacité thermique est une fonction monotone croissante de la température. Il y a une forte déviation par rapport à la courbe prévue par la théorie de Debye dans laquelle la capacité calorifique suit la formule [50]:

$$C_L(T) = C_L(T_0) \frac{20 - (\theta_D/T)^2}{20 - (\theta_D/300^\circ\text{K})^2} \quad (\text{I.5})$$

Avec  $C_L(T_0)$  est la capacité à l'ambiante (en  $\text{cal.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ),  $\theta_D$  est la température de Debye et  $\rho$  est la densité. La chaleur spécifique pour GaN a été calculée à pression constante en fonction de la température [51] pour des températures comprises en 298 et 1773 °K.



**Figure (I.9)** La chaleur spécifique calculée (trait plein) et mesurées (cercles ouverts) par rapport à la température [51].

### III.1.4. La dilatation thermique

Le coefficient de dilatation thermique est important à connaître pour l'élaboration de couches hétéroépitaxiées mais également pour l'étude des propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes. Il est ainsi très important de connaître ces coefficients des matériaux épitaxies et des substrats afin de connaître la déformation engendrée dans la couche, et éventuellement dans le substrat, mais également pour l'étude des propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes [52].

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi, une couche hétéroépitaxiée complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante. Les coefficients de dilatation thermique permettent d'évaluer la déformation de la maille cristalline en fonction de la variation de température. Le coefficient de dilatation thermique noté  $\alpha$  décrit la dilatation d'un

réseau cristallin suite à une variation de température. Il dépend du matériau mais aussi de la stœchiométrie, des défauts étendus et de la concentration en charges libres dans le matériau.

$$\frac{l_f - l_0}{l_0} = \alpha_l (T_f - T_0) \quad (I. 6a)$$

Ou

$$\frac{\Delta l}{l_0} = \alpha_l \Delta T \quad (I. 6b)$$

Le coefficient thermique volumique :

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \alpha_v \Delta T \quad (I. 6c)$$

Pour un matériau isotrope :

$$\alpha_l = 3\alpha_v \quad (I. 6d)$$

### III.1.5. La mobilité électronique

Les électrons et les trous dans les composants électroniques actifs comme par exemple les HMETs sont accélérés par le champ électrique, mais perdent de leur vitesse à la suite de divers processus de diffusion. Ces mécanismes de diffusion comprennent des vibrations de réseau (phonons), d'impuretés, des surfaces et d'autres imperfections. Puisque les effets de tous ces phénomènes microscopiques sont groupés dans les mobilités macroscopiques introduites par les équations de transport, ces mobilités sont donc des fonctions du champ électrique local, de la température du réseau, de la concentration de dopage, etc. Dans ce présent travail on s'intéresse à la dépendance de la mobilité à la composition chimique (teneur en aluminium ou de l'indium) et à la température. L'augmentation de la température engendre des perturbations dans le réseau cristallin qui affectent la mobilité des porteurs. À proximité de la température ambiante ( $T = 300^{\circ}\text{K}$ ) et à des champs électriques faibles, la mobilité est souvent considéré comme suivant :

$$\mu = \mu_{T_0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\gamma_1} \quad (I. 7a)$$

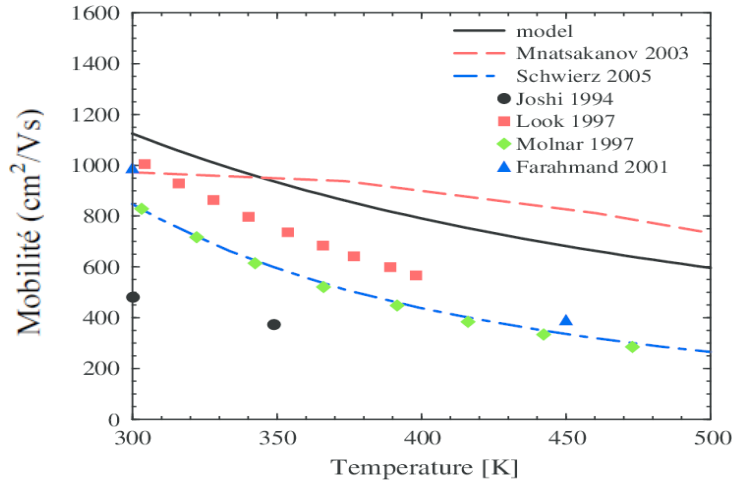
Ou  $\mu_{T_0}$  est la mobilité la température ambiante  $T_0$  et  $\delta_0$  un paramètre.

Aussi, la mobilité des électrons à faible champ peut être modélisée par une expression similaire à celui proposé par Caughey et Thomas [52]:

$$\mu^{LI} = \mu^{min} + \frac{\mu^{LI} - \mu^{min}}{1 + \left( \frac{C_I}{C^{ref}} \right)^{\gamma_0}} \quad (I. 7b)$$

Ou  $C_I$  désigne la concentration d'impuretés ionisées,  $\mu^L$  est la mobilité dans le matériau non dopé,  $\mu^{min}$  est la mobilité dans un matériau dopé, limité par la diffusion des impuretés et ( $C^{ref}$  et  $\gamma_0$ ) les paramètres décrivant la diminution de la mobilité avec une l'augmentation de la concentration d'impuretés ; Pour modéliser dépendance a la température, les mobilités sont en outre paramétrées en utilisant les lois suivant :

$$\mu^L = \mu_{300}^L \left(\frac{T_L}{T_0}\right)^{\gamma_1} \quad (I.7c), \quad \mu^{min} = \mu_{300}^{min} \left(\frac{T_L}{T_0}\right)^{\gamma_2} \quad (I.7d) \text{ et } C^{ref} = C_{300}^{ref} \left(\frac{T_L}{T_0}\right)^{\gamma_3} \quad (I.7e)$$



**Figure (I.10)** Mobilité des électrons à faible champ de GaN en fonction de la température [52].

**Tableau (III-5)** Résumé des paramètres du modèle de mobilité à faible champ pour le GaN [52].

Matériau	Porteurs	$\mu_{300}^L$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	$\mu_{300}^{min}$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	$C_{300}^{ref}$ (cm <sup>-3</sup> )	$\gamma_0$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$
GaN	n	1600	100	$3 \cdot 10^{17}$	0.7	-1.5	-0.2	1.3
	p	175	10	$2.5 \cdot 10^{17}$	1.5	-3.7	-1.5	1.0
AlN	n	683	29	$5 \cdot 10^{17}$	0.8	-3.21	1.21	-0.18

### III.2. L'effet de la fraction molaire sur les propriétés du $Al_xGa_{1-x}N$

L'alliage  $Al_xGa_{1-x}N$  sert souvent de barrière de confinement dans les structures optoélectroniques à base de nitrures. La connaissance de ses propriétés et la maîtrise de sa croissance sont des objectifs impératifs, pour développer de nouveaux composants en particulier dans le domaine de l'UV lointain [53]. Généralement, les alliages ne sont pas traités comme un nouveau composé à part entière, mais comme un composé intermédiaire entre ses constituants ainsi que leurs propriétés qui se déduisent par une interpolation linéaire en fonction des deux constituants comme suit [54] :

$$F(x) = x \cdot F_A + (1 - x)F_B \quad (I.8)$$

Où  $F$  est le paramètre physique ( $F_A$  et  $F_B$  étant les paramètres physiques des constituants A et B) et  $x$  la composition molaire. Mais, dans le cas d'un alliage ternaire, on le considère composé de molécules AC avec la fraction molaire  $x$  et de molécules BC avec la fraction  $(1-x)$  tout le raisonnement fait pour les binaires sont les mêmes pour les ternaires avec une certaine adaptation bien sur de formules aux composés constituants. La nouvelle formule pour la propriété physique d'un alliage ternaire est comme suit :

$$F(x) = x.F_{AC} + (1 - x)F_{BC} \quad (I. 9)$$

Où  $F_{AC}$  et  $F_{BC}$  étant les paramètres physiques des constituants binaires AC et BC.

### III.2.1. Evolution du gap d'énergie dans l' $Al_xGa_{1-x}N$

Une des propriétés clés d'un alliage est la dépendance du gap sur la composition ; et elle paraît contestée dans le cas de cet alliage. Ainsi en raison de son potentiel d'applications en hétérostructures d'AlGaIn et ces alliages a reçu le plus d'attention des alliages de la famille des nitrures III-V, de nombreux groupes ont fait la synthèse d'AlGaIn. L'évolution de l'énergie de bande interdite avec la composition peut être approximée par la relation suivante:

$$E_{Al_xGa_{1-x}N}^g(x) = x.E_{AlN}^g + (1 - x)E_{GaN}^g - (1 - x).x.b \quad (I. 10a)$$

Avec  $b$  le terme de non linéarité (*bowing*) représentant la déviation par rapport à la loi linéaire de type *Vegard*. Le gap du composé ternaire nitrure de gallium-aluminium  $Al_xGa_{1-x}N$  reste également direct quelque soit la teneur en aluminium [55].

En remplaçant  $E_g$  (AlN) et  $E_g$  (GaN) par leurs valeurs à 300°K,  $b=1$ , dans la relation (&6), nous trouvons les équations suivantes qui donnent le gap du  $Al_xGa_{1-x}N$  en fonction de  $x$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{Al_xGa_{1-x}N}^g(x) = x.E_{AlN}^g + (1 - x)E_{GaN}^g - (1 - x).x.b \quad (\text{Cubique}) \\ E_{Al_xGa_{1-x}N}^g(x) = x.E_{AlN}^g + (1 - x)E_{GaN}^g - (1 - x).x.b \quad (\text{Hexagonal}) \end{array} \right. \quad (I. 10b)$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \quad (I. 10c)$$

Et la dépendance de l'énergie de bande interdite avec la composition et avec la temperature en même temps peut être approximée par la relation suivante :

$$E_g(x, T) = E_g(x, T = 0) - \frac{\alpha(x)T^2}{\beta(x) + T} \quad (I. 10d)$$

Basé sur des données expérimentales, Nepal et al [56] obtiennent les équations empiriques suivantes pour décrire les coefficients  $\alpha$  et  $\beta$ :

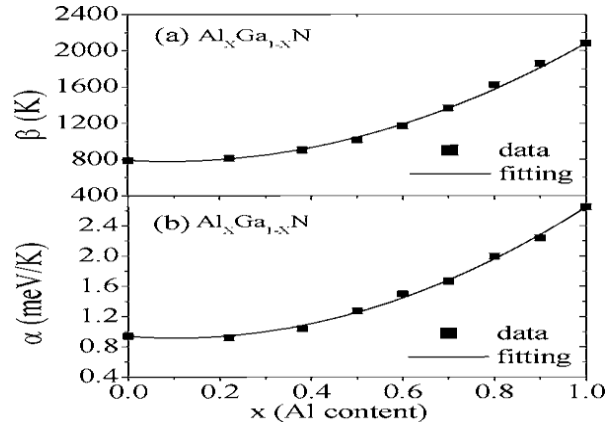
$$\alpha(x) = (1 - x)\alpha(GaN) + x.\alpha(AlN) + c.x.(1 - x) \quad (I. 10e)$$

$$\beta(x) = (1 - x)\beta(GaN) + x.\beta(AlN) + d.x.(1 - x) \quad (I. 10f)$$

Où c et d sont liés aux termes quadratiques de  $\alpha(x)$  et  $\beta(x)$ , et  $\alpha(\text{GaN})$ ,  $\alpha(\text{AlN})$ ,  $\beta(\text{GaN})$ , and  $\beta(\text{AlN})$  sont les coefficients Varshni pour les composés binaires, de GaN et AlN. Ce qui donne pour une ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium :

$$E_g(x, T) = E_g(x, T = 0) - \frac{((1-x)\alpha(\text{GaN}) + x.\alpha(\text{AlN}) + c.x.(1-x))T^2}{(1-x)\beta(\text{GaN}) + x.\beta(\text{AlN}) + d.x.(1-x) + T} \quad (\text{I.10g})$$

Les courbes en traits pleins représentés sur la Figure III10 les données expérimentales de  $\alpha(x)$  et  $\beta(x)$  par Eq. (2) et (3) calculées par la méthode des moindres carrés.



**Figure (I.11)** La dépendance compositionnelle des coefficients de Varshni  $\alpha(x)$  et  $\beta(x)$  dans  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  pour  $0 < x < 1$  respectivement [56].

$$E_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^g(x, T) = x.E_{\text{AlN}}^g(T) + (1-x)E_{\text{GaN}}^g(T) - (1-x).x.b \quad (\text{I.10h})$$

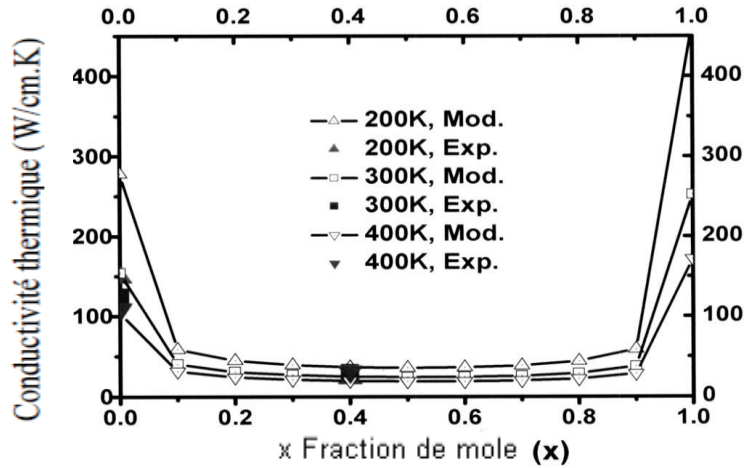
Maintenant, nous considérons le changement dans d'énergie de gap dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec la température [55]:

$$E_g(x, T) = (4.42.x + 0.068) - \frac{8.73.10^{-4}.T^2}{830 + T} \quad (\text{I.10i})$$

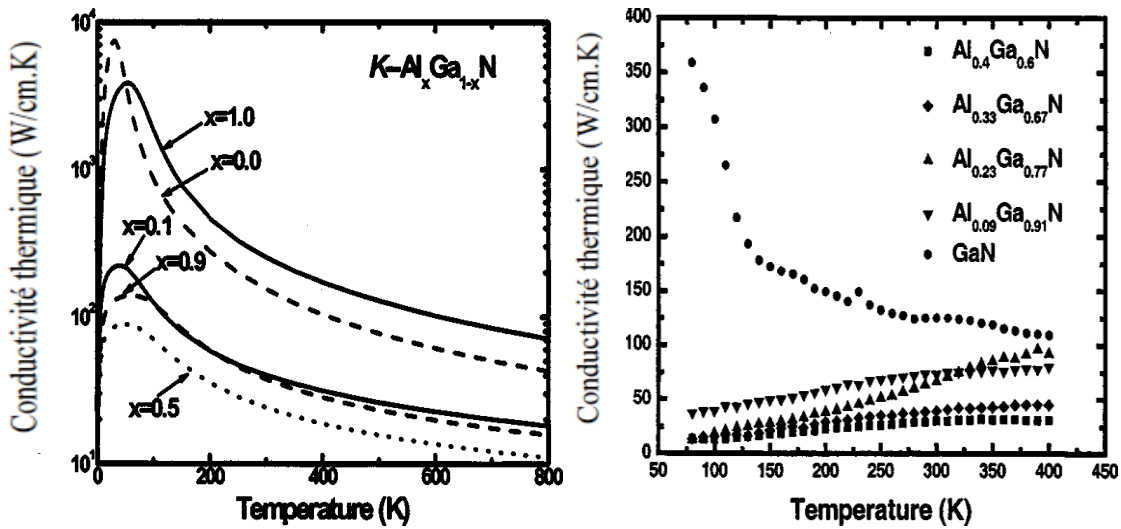
### III.2.2. La conductivité thermique

Les conductivités des alliages sont difficilement interprétables. Liu *et al* [57], ont rapporté une étude expérimentale et théorique de la conduction thermique dans les alliages  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Un objet de cette étude est sur la compréhension de l'effet de la fraction x de l'aluminium et de la température sur la conductivité thermique dans les couches minces  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

$$k_{\text{AlGa}} = \left( \frac{(1-x)}{k_{\text{GaN}}} + \frac{x}{k_{\text{AlN}}} + \frac{x.(1-x)}{c_{\text{AlGa}}} \right)^{-1} \quad (\text{I.11})$$



**Figure (I.12)** La conductivité thermique en fonction de la fraction de mole  $x$  (Al) pour l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Les courbes théoriques sont calculées à partir du modèle de cristal virtuel, les points indiquent les données de mesure [57].



**Figure (I.13)** a) Simulation de la conductivité thermique en fonction de la température pour un alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec  $x=1.0, 0.9, 0.5, 0.1,$  et  $0.0$ , b) Mesure de la conductivité thermique d'un GaN (HVPE),  $\text{Al}_{0.09}\text{Ga}_{0.91}\text{N}$ ,  $\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ ,  $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{N}$ , et  $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$  couches minces dans une gamme de température de 80 à 400 °K [57].

### III.2.3. Le coefficient d'absorption

Dans ce paragraphe, nous revenons encore une fois pour voir l'influence de la température et de la fraction molaire sur le coefficient d'absorption. Tous d'abord, le coefficient d'absorption dépend de plusieurs paramètres qui sont : la longueur d'onde de la radiation incidente, le dopage, la pureté ainsi que la température de l'échantillon, cette dépendance est donnée par la loi d'Urbach [58]. L'énergie minimale nécessaire au photon incident pour provoquer la transition électronique dépend de la largeur de bande interdite du matériau, c'est la raison pour laquelle on détermine un coefficient d'absorption intrinsèque. Pour des photons d'énergie inférieure à  $E_g$ , le coefficient d'absorption est négligeable et la radiation lumineuse traverse le matériau avec une atténuation quasiment nulle.

$$\alpha(T) = \alpha_0 \cdot \exp\left(\frac{hv - E_g(T)}{k_B T}\right), \text{ Pour } hv < E_g \quad (\text{I.12})$$

$k_B$  : constante de Boltzmann.

La figure (I.14) représente des mesures effectuées sur des couches de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , pour différents teneurs en Aluminium ( $x=0-0,35$ ). La première caractéristique de ces spectres d'absorption est une variation abrupte du coefficient d'absorption pour les énergies de photon situées au voisinage du gap, ce qui met en évidence la qualité optique de ces couches d'AlGa<sub>N</sub>, où la concentration de niveaux d'énergie profonds est assez faible.

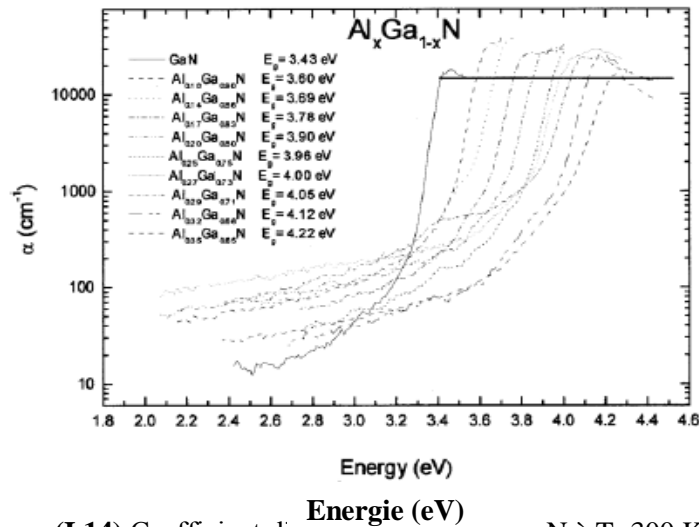


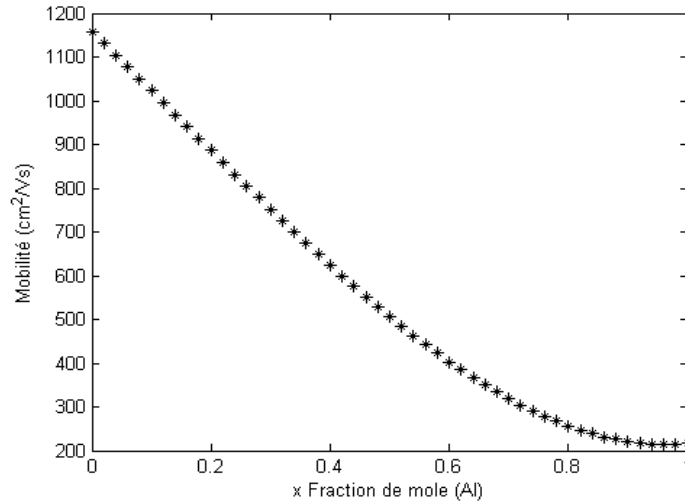
Figure (I.14) Coefficient d'absorption  $\alpha$  de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  à  $T=300$  K [59].

### III.2.4. La mobilité électronique

A faible champ ; la courbe décrivant la mobilité des électrons dans ces alliages, est approchée par l'équation [27]:

$$\mu(X) = a + b \cdot X + c \cdot X^2 + d \cdot X^3 \quad (\text{I.13})$$

Où a, b et d sont des constantes [27].



**Figure (I.15)** Mobilité des électrons dans  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , en fonction de la fraction de mole Al [27].

### III.2.5. La capacité thermique, la densité volumique et le poids atomique

La capacité calorifique  $c_p$ , densité  $\rho$  et poids atomique  $M$  des ternaires  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  est interpolées linéairement par les relations suivantes [60]:

➤ **La capacité calorifique**

$$c_{p,\text{AlGaN}} = (1 - x)c_{p,\text{GaN}} + x \cdot c_{p,\text{AlN}} \quad (\text{I. 14})$$

Où  $c_{p,\text{GaN}}$  et  $c_{p,\text{AlN}}$  sont respectivement la capacité calorifique de GaN et AlN.

➤ **La masse volumique (la densité)**

$$\rho_{\text{AlGaN}} = (1 - x)\rho_{\text{GaN}} + x \cdot \rho_{\text{AlN}} \quad (\text{I. 15})$$

Où  $\rho_{\text{GaN}}$  et  $\rho_{\text{AlN}}$  sont les densités de GaN et AlN respectivement.

➤ **Le poids atomique**

$$M_{\text{AlGaN}} = (1 - x)M_{\text{GaN}} + x \cdot M_{\text{AlN}} \quad (\text{I. 16})$$

Et où  $M_{\text{GaN}}$ ,  $M_{\text{AlN}}$  sont respectivement les poids atomiques du GaN et AlN.

➤ **Le nombre atomique**

$$Z_{\text{AlGaN}} = (1 - x)Z_{\text{GaN}} + x \cdot Z_{\text{AlN}} \quad (\text{17})$$

Où  $Z_{\text{GaN}}$ ,  $Z_{\text{AlN}}$  sont respectivement les nombre atomiques du GaN et AlN.

## **IV. Les nanostructures**

L'étude des nanostructures et nanomatériaux à base de semiconducteurs est actuellement en plein essor en raison des propriétés électroniques et optiques remarquables de ces systèmes, qui permettent d'une part, d'envisager de futurs composants pour la micro- et la nano-optoélectronique et, d'autre part, de permettre une étude expérimentale sur des problématiques jusque là purement théoriques. La miniaturisation des composants électroniques est importante pour les technologies nouvelles, et elle est également très intéressante de point de vue purement scientifique. Dans ce domaine, les dernières années ont été marquées par un effort soutenu dans la croissance et la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques (semiconducteurs à large bande interdite, composés à base de nitrure de type GaN). Dans le même temps, toute une ingénierie s'appuyait sur le progrès des techniques de fabrication et les connaissances acquises sur les propriétés fondamentales des semiconducteurs s'est développée et a acquis en maturité : réalisation de microcavités, cristaux photoniques, émetteurs à un photon, lasers à boîtes quantiques etc [61]. Une nanostructure est une structure atomique dont la taille se situe entre celle d'une molécule (de l'ordre de un milliardième de mètre, soit un nanomètre) et celle d'un objet microscopique, possédant des propriétés spécifiques dues à cette taille réduite. Les raisonnements classiques ne sont plus suffisants pour rendre compte des propriétés nouvelles observées : de nouveaux concepts, issus de la mécanique quantique, doivent être utilisés. Bien entendu, il ne suffit pas que l'une des dimensions du système étudié soit nanométrique pour que le phénomène observé soit d'ordre quantique [62]. Les structures nanométriques permettent alors d'obtenir de nouveaux matériaux présentant des propriétés mécaniques, électriques, magnétiques, optiques particulières ou des combinaisons de propriétés originales, différant parfois des propriétés du même matériau à une échelle différente. S'il s'agit d'un solide cristallin, la réduction de la taille du grain conduit à une plus grande interface à l'intérieur du matériau et ainsi peut en modifier les propriétés mécaniques et électriques. Elles permettent une miniaturisation des technologies notamment dans le domaine de l'optoélectronique, et contribuent à de nombreuses applications industrielles [63].

### **IV.1. Les procédés de fabrication**

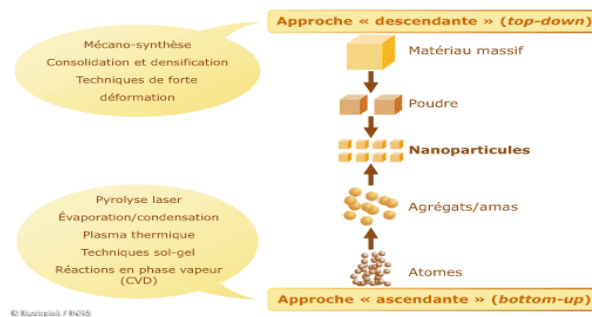
Les nombreuses techniques de création des nanostructures peuvent être classées selon deux approches : la voie descendante (top-down) et la voie ascendante (bottom-up). Deux chemins mènent en effet au nano-monde : la fabrication moléculaire, qui passe par la manipulation d'atomes individuels et la construction à partir de la base, et l'ultra-miniaturisation, qui produit des systèmes de plus en plus petits [64,65].

### IV.1.1. La voie descendante (top-down)

Cette méthode consiste à miniaturiser les systèmes actuels. Les structures sont ainsi graduellement sous dimensionnées jusqu'à atteindre des proportions nanométriques. Cette méthode fait appel à des procédés principalement mécaniques.

### IV.1.2. La voie ascendante (bottom-up)

Cette méthode permet l'assemblage ou le positionnement d'atome ou de molécules de façon précise permettant ainsi la fabrication de matériaux dont la structure est parfaitement maîtrisée. Cette méthode fait appel à des procédés d'élaboration principalement physiques et chimiques (voir tableau (III-6) ci-dessous). Il est aussi possible de réaliser des dispositifs micro et nanostructurés utiles pour une intégration à grande échelle dans un circuit électronique ou photonique. L'approche « top down » sera préférée lorsque les quantités de matières souhaitées sont importantes, mais le contrôle de l'état nanométrique sera moins précis. Par rapport aux méthodes « top down », les « bottom up » produisent moins de déchets et consomment moins d'énergie. Ces deux approches ont évidemment un grand intérêt pratique puisqu'elles permettent de réaliser, de façon collective, des objets fonctionnalisés de dimension nanométrique (voir figure (I.16)).



**Figure (I.16)** Illustration représentant les approches pour atteindre des nanostructures : la voie descendante (top-down) et la voie ascendante (bottom-up) [65].

## IV.2. Effets de la diminution de la taille sur les propriétés électronique et thermiques

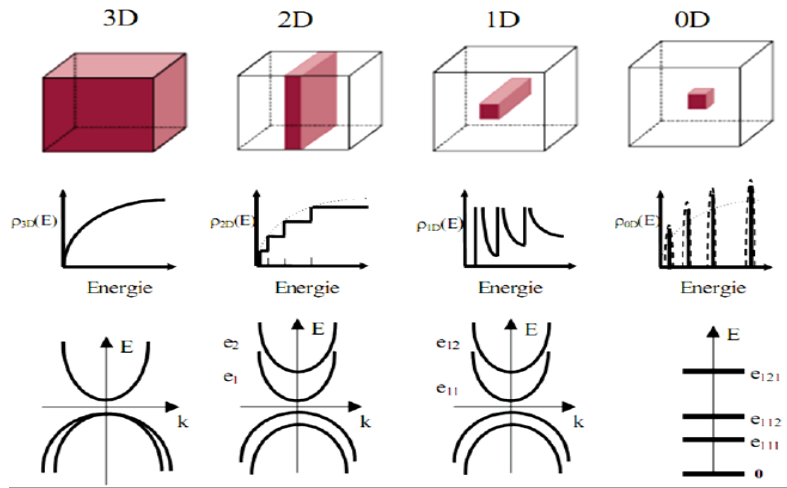
L'intérêt des nanostructures est de pouvoir changer les propriétés du matériau simplement en changeant la taille de la nanostructure. Ce phénomène est dû à la quantification des niveaux d'énergie qui augmente de gap d'énergie quand la taille de la structure diminue. De plus, ses structures contiennent généralement peu de défauts ce qui permet d'obtenir de très bonne qualité cristalline [66].

#### IV.2.1. Effets sur les propriétés électronique

La plupart des matériaux à l'échelle du micromètre présentent les mêmes propriétés physiques du matériau massif ; par contre à l'échelle du nanomètre ils peuvent posséder des propriétés physiques distinctement différentes du matériau massif. Avec les techniques de fabrication modernes, il est possible de réaliser des structures de taille nanométrique, qui offrent un confinement des porteurs dans une, deux ou trois directions de l'espace. Ceci modifie considérablement les propriétés du matériau puisque les effets quantiques, négligeables au niveau macroscopique, deviennent déterminants à cette échelle [67].

Au lieu d'un continuum d'états tel qu'on l'observe dans un matériau massif, les niveaux d'énergie sont discrétisés (Si on confine les porteurs dans un volume suffisamment petit, typiquement de l'ordre de la longueur d'onde de de-Broglie du porteur). Leur position dépend de la taille du nanocrystal et l'écart entre niveaux augmente à mesure que l'on réduit la dimension de l'objet [68]. Le confinement entraîne la quantification de l'énergie des porteurs et modifie la densité d'états. Lorsqu'au moins une des dimensions d'un matériau devient nanométrique, la structure électronique et les modes de vibrations des atomes, qui sont des fonctions quantifiées, sont modifiés par la taille de l'objet.

La figure (I.17) montre une représentation graphique de la densité d'états et de l'énergie en fonction de la dimension. La densité d'états continue en 3D augmente en paliers en fonction de l'énergie pour le cas 2D, en  $p E$  pour le cas 1D et est discrète en 0D. La quantification de l'énergie dans la direction de confinement affecte les états d'énergie. La fonction de densité d'états se discrétise progressivement lorsque la dimensionnalité diminue. La largeur de la bande interdite des matériaux semi-conducteurs varie avec la taille. Dans le cas d'une nanoparticule sphérique de rayon  $r$ , la largeur de la bande interdite est la somme d'un terme constant correspondant au cristal massif et d'un terme en  $1/r^2$ , qui devient non négligeable en-dessous d'une dizaine de nanomètres.



**Figure (I.17)** Variation de la densité d'états avec l'énergie en fonction de la dimensionnalité de la structure.

Or, puisque l'effet de confinement introduit une diminution de la diffusivité thermique lorsque les échelles sont inférieures au micromètre, se référer uniquement aux de la littérature disponibles pour des échantillons massifs conduirait à des erreurs de dimensionnement [69]. C'est pourquoi, mesurer les paramètres thermiques de films minces et modéliser le transfert de chaleur dans ces systèmes est important d'un point de vu théorique pour comprendre les mécanismes physique sous-joints, mais également d'un point de vu applicatif pour améliorer le dimensionnement [69].

#### IV.2.2.Effets sur les propriétés thermiques

Ces dernières années ont connu une croissance rapide de l'intérêt des communautés scientifiques et techniques aux propriétés des nanostructures à base matériaux de group *III-V*, notamment le GaN et ces alliages. Les propriétés optoélectroniques, électriques et notamment les propriétés thermiques des nanostructures semi-conducteurs et des super-réseaux ont récemment attiré beaucoup d'attention. Cela est principalement dû à la réduction de la taille des dispositifs microélectroniques, ce qui conduit à une augmentation de la température pendant la caractérisation avec des outils utilisent généralement un faisceau d'électrons (le MEB ou le MET par exemple). Dans de telles conditions, l'influence des effets de taille sur la conductivité thermique devient extrêmement importante pour la conception de dispositifs optoélectroniques à faibles tailles et la fiabilité [70]. Pour cela, l'évacuation de la chaleur est devenue un enjeu crucial pour la poursuite des progrès dans l'industrie. Les recherches des matériaux qui conduisent bien la chaleur est devenue essentielle pour la conception des prochaines générations de circuits intégrés et de l'électronique en trois dimensions (3D) [71]. La capacité d'un matériau à conduire la chaleur est enracinée dans sa structure atomique, et la connaissance des propriétés thermiques peut faire la lumière sur les caractéristiques des autres matériaux. Les propriétés thermiques des matériaux changent quand ils sont structurés à l'échelle

nanométrique. Les matériaux nanostructurés ne conduisent pas la chaleur comme les matériaux épais en raison de l'augmentation de la diffusion des phonons [72] ou des changements dans la dispersion des phonons [70]. Dans le même temps, des études théoriques de conduction thermique dans deux dimensions (2D) et unidimensionnelles (1D) a révélé un comportement de cristaux exotiques, qui conduisent infiniment à une grande conductivité thermique intrinsèque [73,74].

### IV.3. Les procédés de fabrication des nanomatériaux et les techniques de croissance

#### IV.3.1. Les procédés de fabrication des nanomatériaux

Il existe plusieurs méthodes pour obtenir des nanostructures à base de semiconducteurs. La plupart de ces méthodes de fabrication sont peu utilisées aujourd'hui car les récentes techniques de croissance ont permis d'obtenir des nanostructures de meilleures qualités. Les procédés actuels permettant l'élaboration de nano-objets sont classés en 3 grandes catégories :

- élaboration par voie physique.
- élaboration par voie chimique.
- élaboration par méthode mécanique.

**Tableau (III-6)** Les trois principaux procédés d'élaboration des nanomatériaux [75]:

Type de procédés	Définitions
<i>La voie physique</i>	L'élaboration de nano-particules peut être réalisée par l'action de micro-ondes ou à partir d'une phase vapeur extraite d'un matériau source par chauffage (fusion en creuset ou sans creuset, pyrolyse laser) ou par bombardement. L'ablation laser, la décharge plasma ou la décomposition catalytique sont des techniques plus spécifiquement utilisées dans la fabrication de nanotubes de carbone.  Enfin, des couches minces d'épaisseur nanométrique peuvent être réalisées par PVD (Physical Vapor, Deposition).
<i>La voie chimique</i>	Les techniques de fabrication par voie chimique les plus couramment utilisées sont : <ul style="list-style-type: none"> <li>• les réactions en phase vapeur: Réaction dans un réacteur CVD (Chemical Vapor Deposition),</li> <li>• les réactions en milieu liquide,</li> <li>• les techniques sol-gel.</li> </ul>
<i>Les méthodes mécaniques</i>	Les techniques mécaniques d'élaboration des nanomatériaux sont : <ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>la mécano-synthèse</u>, technique de broyage qui permet en particulier l'obtention de nano-précipités ou nano-objets dispersés de façon homogène au sein de la matrice,</li> <li>• <u>les opérations de compactage et de frittage</u>,</li> <li>• <u>les techniques de forte déformation</u> (torsion, extrusion...) développées pour l'obtention de nano-cristaux et nano-structures.</li> </ul>

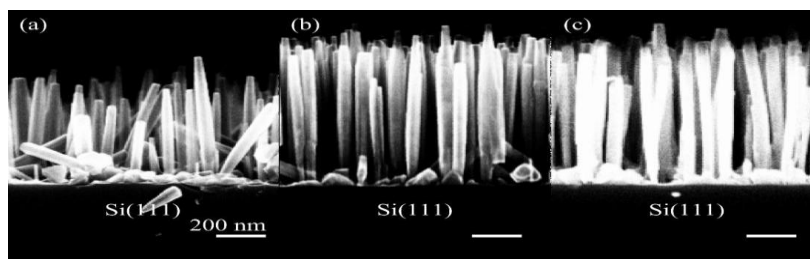
### IV.3.2. Les techniques de croissance

Le terme « épitaxie » a pour origine le mot grec « épi » qui signifie par-dessus et « taxie » qui signifie ordre. Il a été proposé en 1928 par le minéralogiste français Royer pour désigner la juxtaposition régulière de deux espèces cristallines. De manière générale, l'épitaxie consiste à faire croître une couche monocristalline d'un matériau sur un substrat lui-même monocristallin. Si ce substrat est de même nature que le dépôt, on parle d'homo-épitaxie, s'il est de nature différente, le terme d'hétéro-épitaxie est employé. Actuellement, le terme d'épitaxie est utilisé pour tout dépôt monocristallin dont l'orientation est fixée par un substrat. Pour fabriquer des dispositifs électroniques à partir de matériaux nitrures, l'élaboration de couches minces de bonne qualité est nécessaire. Mais les progrès dans l'utilisation des matériaux à base de nitrures d'éléments III (GaN, AlN et InN) ont été freinés par des difficultés intrinsèques liées au matériau, et surtout à l'absence de monocristaux ou de substrats adaptés. Généralement, l'épitaxie des structures à base des matériaux nitrures se fait par différents techniques d'élaboration telles qu'EJM (l'Épitaxie par Jets Moléculaire (MBE)), EPVOM (l'Épitaxie en Phase Vapeur d'Organométalliques (MOVPE)) et EPVH (l'Épitaxie en Phase Vapeur aux Halogénures (HVPE)). Dans la plupart des cas, l'utilisation des techniques de fabrication éprouvées telles que l'épitaxie par jet moléculaire (MBE) ou l'épitaxie en phase vapeur d'organométallique (MOCVD) qui sont adaptées aux besoins spécifiques des structures à dimensionnalité réduites. Mais la croissance en MOCVD est la plus fréquemment utilisée dans les applications industrielles c'est-à-dire pour la production des composants optoélectroniques destinés à la commercialisation [76].

L'épitaxie sélective à l'échelle nanométrique (NSAG pour Nano-Selective Area Growth) est une technique de choix pour l'élaboration de ces nanostructures. Cette technique de dépôt particulière permet un contrôle parfait du matériau déposé : il est possible de créer des nanostructures aux endroits désirés ainsi que de modifier leur géométrie. La nano-hétéroépitaxie, réalisée en utilisant l'approche de l'épitaxie sélective sur des substrats partiellement couverts de masques diélectriques contenant des nano-ouvertures, offre des avantages dans l'intégration complexe de matériaux hétérogènes. Cette technologie permet de superposer, sans propagation de dislocations, des couches minces de matériaux présentant entre eux de très forts désaccords de maille et de coefficients de dilatation thermique. La maîtrise de la taille, de l'emplacement et de la forme des nanostructures, ouvre également de nombreuses applications dans le domaine des nano-composants [77].

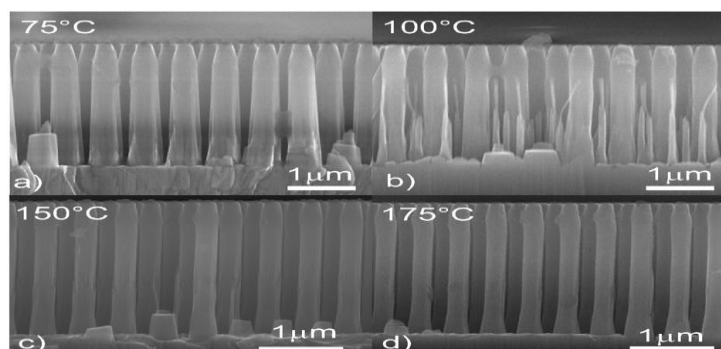
#### IV.4. Les nanostructures à base de nitrure de gallium (GaN)

Les nanostructures à base de matériaux semiconducteurs à grand énergie de bande interdite en nitrures d'éléments III sont très étudiées pour leurs applications aux dispositifs microélectroniques de puissance ou à l'émission de lumière dans le domaine spectral visible-UV. Sont de très bons candidats pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques nouveaux opérant dans la gamme des courtes longueurs d'onde. Bien que plus récent, l'intérêt porté au nitrure de gallium (GaN), un autre semi-conducteur à grand gap, n'a cessé de croître depuis qu'ont été montrées ses remarquables propriétés d'émissivité dans l'UV, combinées à une stabilité chimique [78]. Il est ainsi devenu particulièrement attractif pour différentes applications en microélectronique, électronique mais aussi dans le domaine du médical [79]. Les images de MEB illustrés à la figure II.5 (a) - (c) illustrent la morphologie de nanofils de GaN. À partir des images au MEB, les longueurs des sections AlGaIn presque de 200 nm ont été déduites pour tous les échantillons [78].



**Figure (I.18)** Les images au MEB (a) de GaN NWS et des sections  $Al_xGa_{1-x}N$  cultivées sur des nanofils GaN avec (b)  $x = 0,21$ , et (c)  $x = 0,50$  [78].

La figure II.5 montre des images MEB en coupe transversale de nano-tiges de GaN gravées pendant 10 minutes à une pression de 9 mTorr pour différentes températures. L'augmentation de la température de 75°C à 175°C a trois effets sur les caractéristiques de nano-tiges: 1) Une augmentation de la profondeur de gravure, 2) Une diminution du diamètre de nano-tiges et 3) Une modification de l'angle de la paroi latérale de nano-tige d'un angle conique à un profil vertical [80].



**Figure (I.19)** Images MEB : coupe transversale de nano-tiges de GaN gravées à différentes températures en utilisant [80].

### Quelques valeurs numériques :

**Tableau (III-7)** Propriétés physiques comparées des nitrures d'éléments III avec quelques semiconducteurs usuels [20].

	GaN	AlN	InN	Si	GaAs	6H-SiC
$E_g$ (eV)	3,39	6,2	0,7 <sup>1</sup>	1,12	1,43	2,86
Conductivité thermique ( $W.cm^{-1}.K^{-1}$ )	1,3	3,19	0,8	1,5	0,5	4,9
Point de fusion (K)	2791	3487	2146	1690	1510	3100
Mobilité électronique à T=300K ( $cm^2/V.s$ ) (effet Hall)	1250	300	3200	1400	8500	400
Mobilité des trous à T=300K ( $cm^2/V.s$ ) (effet Hall)	850	14		600	400	75
Constante diélectrique relative	9	8,5	15,3	11,8	12,5	9,7
Champ de claquage ( $10^5 V/cm$ )	26	20		3	6	24
Vitesse de saturation des électrons ( $10^7 cm/s$ )	2,5	1,4	2,5	1	2	2

### Conclusion

Les matériaux III-V offrent donc de multiples possibilités, aussi bien pour la microélectronique rapide que pour l'optoélectronique, par la grande variété des composés réalisables et l'ouverture qu'ils donnent sur la conception de dispositifs totalement nouveaux par l'ajustement des structures de bandes ("band gap engineering"). Nous avons décrit les propriétés physiques et optoélectroniques essentielles de ces matériaux avant de présenter un certain nombre de leurs applications à des composants optoélectroniques.

## V. Références bibliographiques du chapitre I

- [1] H. Morkoç, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov and M. Burns, Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies, *J. Appl. Phys.*, 76, 1363 (1994).
- [2] J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H-J Choi and P. Yang, Single-crystal gallium nitride nano-tubes *Nature*, 422, 599 (2003).
- [3] B.G. Yacobi, D.B. Holt, *Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids*, Plenum Press, New York, 1990.
- [4] A. Nouri, S. Chaguetmi and N. Belabed, Monte Carlo model of the temperature rise at a GaAs surface under an electron beam, *Surf. Interface Anal.*, 38, 1153 (2006).
- [5] R. Castaing, *Application des Sondes Electroniques à une Méthode d'Analyse Ponctuelle Chimique et Cristallographique*, these de doctorat de l'université de Paris (1951).
- [6] J. Vine and P.A. Einstein, "Heating Effects of an Electron Beam Impinging on a Solid Surface, Allowing for Penetration", *Proc. IEEE*, 111, n° 5, pp.921-930 (1964).
- [7] Y. Talmon E.L. Thomas, Electron Beam Heating Temperature Profiles in Moderately Thick Cold Stage STEM/SEM Specimens , *J. Microsc.-Oxford*, 113, 69 (1978).
- [8] K. Roll, "The Temperature Distribution in a Thin Metal Film Exposed to an Electron Beam", *Appl. Surf. Sci.* 5 n° 4, pp. 388-397 (1980).
- [9] S. J. Randolph , J. D. Fowlkes, and P. D. Rack, Effects of heat generation during electron-beam-induced deposition of nanostructures, *J. Appl. Phys.*, 97, 124312 (2005).
- [10] A. Nouri, Thermal Effect Behavior of Materials under Scanning Electron Microscopy. Monte Carlo and Molecular Dynamics Hybrid Model, *Res. J. Mater. Sci.*, 2, 1(2014).
- [11] Johnson W.C., Parsons J.B., Crew M.C., "Nitrogen Compounds of Gallium. III", *J. Phys. Chem.* 2651, pp.234 (1932).
- [12] Dingle R., Sell D.D., Stokowski S.E., Ilegems M., "Absorption, Reflectance, and Luminescence of GaN Epitaxial Layers", *Phys. Rev. B* 4, 1211(1971).
- [13] J.I.Pankove, "GaN for LED applications", Rapport finale, National Aeronautics and space administration Hampton, (1973).
- [14] H. P. Maruska and J. J. Tietjen, "The preparation and properties of Vapor-Deposited Single-Crystal GaN ", *Appl. Phys. Lett.*, 15, pp.327-329 (1969).
- [15] M. Razeghi and A. Rogalski, "Semiconductor ultraviolet detectors", *Journal of Applied Physics*, vol. 79, no. 10, pp. 7433-7474 (1996).
- [16] J.I.Pankov, E.A. Miller and J.E. Berkeyheiser, "GaN electroluminescent diodes", *RCA Review*, pp.32-383 (1971).
- [17] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys", *J. Appl. Phys.*, Vol. 89, No. 11, (2001).
- [18] C. Stampfl and C.G. Van de Walle, "Doping of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ", *Appl. Phys. Lett.* 72 (4), (1998).
- [19] S.Nakamura et al., "The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers", Springer-Verlag Telos: Berlin, Germany, (1997).
- [20] F. Omnès, "Couches minces de nitrures d'éléments III et de diamant : de la croissance par CVD des semiconducteurs de grand gap aux applications", Mémoire HDR de l'université Joseph Fourier–Grenoble 1 (2008).

- [21] O. Zeggai, "Étude et caractérisation d'un microsysteme à base de matériau nitruré AlGa<sub>N</sub> pour les applications biologique et biomédicale", These de doctorat, Université Abou Bekr Belkaid (Tlemcen) (2015).
- [22] O. Ambacher, "Growth and applications of Group III-nitrides", *J. Phys. D: Appl. Phys.* 31, pp.2653-2710 (1998).
- [23] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN", *Phys. Rev. B* 52, 11, pp.8132-8139 (1995).
- [24] GaN - Gallium nitride. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. Ioffe Physico-Technical Institute.
- [25] InN - Indium Nitride. New Semiconductor Materials. Characteristics and properties. Ioffe Physico-Technical Institute. (Cité page 17.)
- [26] M. Anani, H. Abid, Z. Chama, C. Mathieu, A. Sayade and B. Khelifa, "In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N refractive index calculations". *Micro-electronics Journal*, 38(2), pp.262-266 (2007). (Cité page 17.)
- [27] A. Hamdoune, "Elaboration du nitrure de galium ; étude de ces propriétés et application, These de doctorat, Université de Aboubeker Belkaid", Tlemcen (2006).
- [28] V. Fellmann, "Croissance et caractérisations structurales et optiques d'hétérostructures de nitrures d'éléments III émettant dans l'UV", Thèse de Doctorat de l'université de Grenoble, (2006).
- [29] T.P. Chow, V. Khemka, J. Fedison, N. Ramungul, K. Matocha, Y. Tang, R.J. Gutmann, "SiC and GaN bipolar power devices" *Solid-State Electronics*, vol. 44, no. 2, pp. 277-301 (2000).
- [30] J. F. Muth, J. H. Lee, I. K. Shmagin, R. M. Kolbas, H. C. Casey B. P. Keller, U. K. Mishra, and S. P. DenBaars, "Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements", *Appl. Phys. Lett.* 71 (18), (1997).
- [31] A. Nouiri, "Theoretical calculation of cathodoluminescence. Influence of surface and bulk physical parameters: Application at p-GaAs", Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Constantine (2000).
- [32] R. Aubry, "Etude des aspects électrothermiques de la filière HEMT AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> pour application de puissance hyperfréquence", these de doctorat université de Lille (2004).
- [33] Kuball, M. H. H., & Pomeroy, J. W. A, "Review of Raman Thermography for Electronic and Opto-Electronic Device Measurement with Submicron Spatial and Nanosecond Temporal Resolution", *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*, 16(4), pp.667-684 (2016).
- [34] H.Y. Fan, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors", *Physical Review*, vol. 82, n° 6, pp. 900-905 (1951).
- [35] Y.P.Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors" *Physica*, vol.34, pp. 148-154 (1967).
- [36] B. Monemar, "Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra", *Physical Review B*, 10, pp.676-681, (1974).
- [37] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors", *Journal of Applied Phys.*, 94, 3675 (2003).
- [38] J. Zou, D. Kotchetkov, and A. A. Balandin, D. I. Florescu and Fred H. Pollak, Thermal conductivity of GaN films: Effects of impurities and dislocations, *Journal of Applied Physics*, vol. 92, pp. 2534-2539 (2002).
- [39] E. K. Sichel and J. J. Pankove, "Thermal conductivity of GaN, 25–360 K", *J. Phys. Chem. Solids*, pp. 330-338 (1977).

- [40] S. Porowski and I. Grzegory, "Thermodynamical properties of III–V nitrides and crystal growth of GaN at high N<sub>2</sub> pressure", *J. Cryst. Growth*, 1-2, Vol. 178, p. 174-188 (1997).
- [41] H. Markoc, "Potential applications on III-V nitride semiconductors", *Materials Science and Engineering*, B43, pp.137-146 (1997).
- [42] S. Vitanov, V. Palankovski, S. Maroldt and R. Quay, "High-temperature modeling of AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> HEMTs", *Solid-State Electronics* 54, pp.1105–1112 (2010).
- [43] W. A. Gibson, "Comparison of Gallium Nitride High Electron Mobility Transistors Modeling in two and three Dimensions", these master de B.S.A.S.T, Thomas Edison State College, (2002).
- [44] C. Mion, J. F. Muth, E.A. Preble and D. Hanser, "Thermal conductivity, dislocation density and GaN device design", *Superlattices Microstruct*; 40, pp.338–342 (2006).
- [45] D. I. Florescu, V. M. Asnin, and F. H. Pollak, "Thermal conductivity of fully and partially coalesced lateral epitaxial overgrown GaN/ sapphire (0001) by scanning thermal microscopy", *Appl Phys Lett*; 77(10):1464 6 (2000).
- [46] A. Jacquot, B. Lenoir, A. Dauscher, P. Verardi, F. Cracuin, M. Gartner and M. Dinescu, "Optical and thermal characterization of AlN thin films deposited by pulsed laser deposition", *Appl Surf Sci*; 186(1-4):507–12 (2002).
- [47] G. Slack, L.J. Schowalter, D. Morelli and J.A. Freitas, G. Slack et al., "Some effects of oxygen impurities on AlN and GaN", *J Cryst Growth*; 246(3-4):287–98 (2002).
- [48] A. Polian, M. Grimsditch and I. Grzegory, "Elastic constants of gallium nitride", *J. Appl. Phys.* N°6, Vol. 79, pp. 3343-3344 (1996).
- [49] A. F. Demidienko, V. I. Koshchenko, L. D. Sabanova and Y. M. Gran, "Low-temperature heat capacity, entropy, and enthalpy of aluminum and gallium nitrides", *J. Phys. Chem.*, 49, pp.1586-1586 (1975).
- [50] Silvaco International, Silvaco International, ATLAS User's Manual, September (2007).
- [51] I. Barin, O. Knacke and O. Kubaschewski, "Thermochemical Properties of Inorganic Substances", Springer-Verlag, Berlin, (1977).
- [52] T.L. Bergman, F.P. Incropera, D.P. DeWitt, and A.S. Lavine, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", John Wiley & Sons, Inc. (2011).
- [53] E. Muñoz, E. Monroy, J.L. Pau, F. Calle, F. Omnès and P. Gibart, "III nitrides and UV detection", *J. Phys. Condens. Matter*, 13, pp.7115-7137 (2001).
- [54] S. Adachi, "Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors".
- [55] J.C. Freeman, "Basic Equations for the Modeling of Gallium Nitride (Ga<sub>N</sub>) High Electron Mobility Transistors (HEMTs)", Glenn Research Center, Cleveland, Ohio. NASA 211983, (2003).
- [56] N. Nepal, J. Li, M.L. Nakarmi, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, "Temperature and compositional dependence of the energy band gap of AlGa<sub>N</sub> alloys", *Appl. Phys. Lett.* 87, 242104 (2005).
- [57] W. Liu and A. A. Balandin, "Thermal conduction in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N alloys and thin films", *J. Appl. Phys.* 97, 073710 (2005).
- [58] F. Urbach, "The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids", *Phys. Rev.* 92, 1324 (1953).
- [59] F. Omnès, N. Marengo, B. Beaumont, Ph. de Mierry, E. Monroy, F. Calle, and E. Muñoz, "Metalorganic vapour-phase epitaxy-grown AlGa<sub>N</sub> materials for visible-blind ultraviolet photodetector applications", *J. Appl. Phys.* 86(9), 5286 (1999).
- [60] R. Quay, "Gallium Nitride Electronics", Springer-Verlag, Berlin (2008).

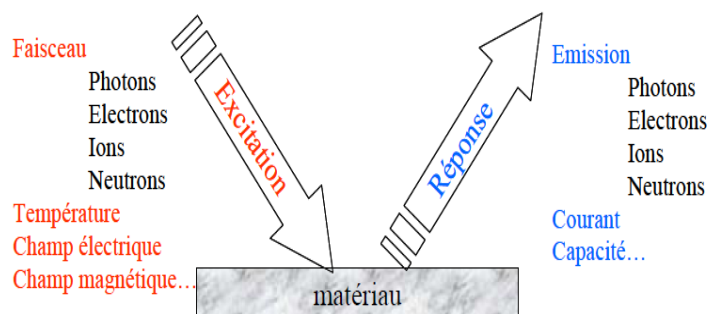
- [61] K.Barnham and D.Vvedensky, *Low-dimensional semiconductor structures*, Cambridge: Cambridge University Press (2001).
- [62] J-L.Robert, "Les nanosciences, à l'intersection des sciences fondamentales et des technologies", *Annales des Mines, Groupe d'études des semiconducteurs Université de Montpellier 2* (2004).
- [63] S.J. Pearton et al, *Superlattices and Microstructures*, 34 (2003).
- [64] J. Turret, "Etude de l'épitaxie sélective de GaN/saphir et GaN/GaN-MOVPE par HVPE. Application a la croissance de structure périodique de faible dimensionnalité", thèse de doctorat de l'Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, (2008).
- [55] L.C. Klein, "Sol-gel technology for thin film, fiber, performs, electronic and specialty form", Park ridge, New Jersey: Nuyes publications, (1988).
- [66] V. Gorge, "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V", thèse de doctorat de l'université de Paris-Sud 11 (2012).
- [67] H.Bourque, "Étude par spectroscopie pompe-sonde de la dynamique des porteurs de charges dans des nanostructures d'InAs/InAlAs/InP", Mémoire M.Sc, Université de Sherbrooke, Canada (2005).
- [68] N. Didier, "Les nanomatériaux et leurs applications pour l'énergie électrique", Coll. EDF R&D (2014).
- [69] *Developments and trends in thermal management technologies*, Report of DTI Global Watch Missions, (2006).
- [70] A.Balandin and K.L. Wang, "Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well". *Phys. Rev. B.* 58, pp.1544-1549 (1998).
- [71] A.Balandin, "Better computing through CPU cooling", *IEEE Spectrum*. 29-33, October (2009).
- [72] T. Borca-Tasciuc, D. Achimov, W.L. Liu, G. Chenb, H.W. Ren, C.H. Lin, and S. S. Pei , "Thermal conductivity of InAs/AlSb superlattices", *Micro-scale Thermophys. Eng.* 5, pp.225-231 (2001).
- [73] S. Lepri, R. Livi and A. Politi, "Thermal conduction in classical low-dimensional lattices", *Phys. Rep.* 377, p.1-80 (2003).
- [74] G. Basile, C. Bernardin, and S. Olla, "Momentum conversion model with anomalous thermal conductivity in low dimensional system". *Phys. Rev. Lett.* 96, pp.204303-204304 (2006).
- [75] D. Carlac'h et Y.Hemery, "étude prospective sur les nanomatériaux", Etude réalisée par Developpement & Conseil pour le compte du MINEFI/DIGITIP/SIMAP DIGITIP, (2004).
- [76] J.Martin, "Etude par Epitaxie en Phase Vapeur aux Organo Metalliques de la croissance sélective de Nano-Hetero-Structures de matériaux à base de GaN", These de doctorat Université de Metz, (2010).
- [77] H. Kang, "A Study of the Nucleation and Formation of Multifunctional Nanostructures using GaN-Based Materials for Device Applications", These PhD Institute de Technologies Georgia (2006).
- [78] C. Himwas, "III-Nitride nanostructures for UV emitters", Thèse de doctorat de l'université de Grenoble (2006).
- [79] O. ZEGGAI, "Étude et caractérisation d'un microsysteme à base de matériau nitruré AlGaN pour les applications biologique et biomédicale", these de doctorat université Abou Bekr Belkaid - Tlemcen (2015).

[80] E.D. Le Boulbar, C.J. Lewins, D.W.E. Allsopp, C.R. Bowen and P.A. Shields, "Fabrication of high-aspect ratio GaN nanostructures for advanced photonic devices", *Microelectronic Engineering* 153, pp.132-136 (2016).

## **Chapitre II**

# **Quelques techniques de caractérisation des semi-conducteurs**

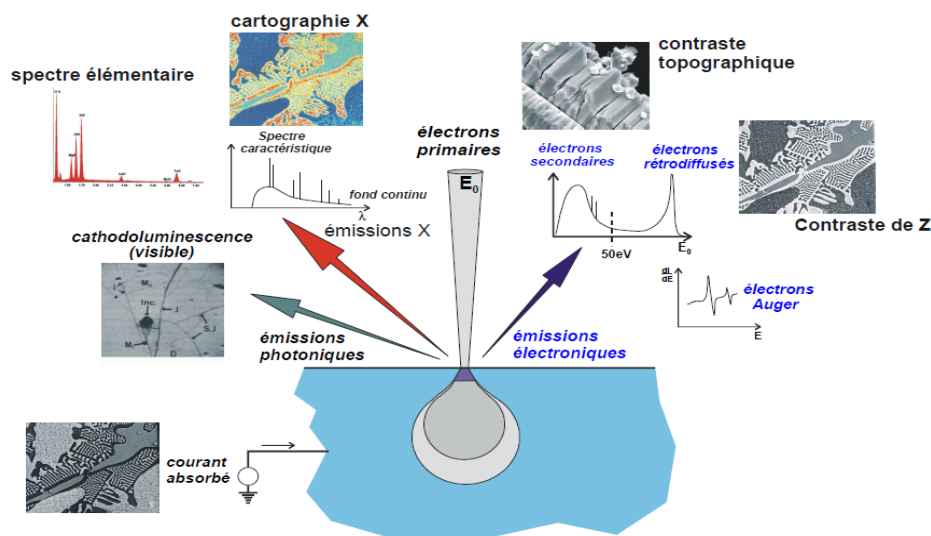
La plupart des techniques physiques d'analyse (et d'observation) utilisent l'interaction d'un faisceau de particules primaires (photons, électrons, particules, ions...) avec la matière pour en déduire, à partir des modifications du faisceau primaire et de l'émission de faisceaux secondaires, des informations sur la nature, la composition, la structure... de la cible (figure (II.1)). Une bonne connaissance de la nature des interactions que subit le faisceau primaire avec la matière permet, non seulement de sélectionner le type d'instrument le plus approprié pour résoudre un problème donné, mais également de choisir les meilleures conditions opératoires. Lors des interactions, le faisceau primaire peut perdre tout ou une fraction de son énergie ; s'il s'agit d'une particule d'énergie cinétique, cela se traduit par une perte de vitesse ("ralentissement") ; si la perte d'énergie est totale, il y a "absorption" avec affaiblissement de l'intensité du faisceau d'une quantité  $dl$ , définie par une loi exponentielle. Le faisceau peut aussi être dévié dans une autre direction, il y a alors "diffusion", avec une modification du vecteur  $k$ .



**Figure (II.1)** Description générale des techniques de caractérisation.

Dès le début du XVIIème siècle, les scientifiques sont parvenus à observer des échantillons de petites tailles à l'aide de lentilles optiques. Puis après les appareils optiques et électroniques à faisceau fixe sont apparus les microscopes à balayage en réflexion et en transmission et les microscopes à champ proche: à effet tunnel et à force atomique. Aujourd'hui, ces techniques permettent d'observer des objets à l'échelle atomique. La caractérisation poussée des matériaux est un besoin permanent dans de nombreux domaines et ce n'est pas le développement des méthodes de modélisation et de simulation numérique qui va totalement modifier cet état de fait. Il est en effet bien difficile de prévoir le comportement d'un matériau par un code de calcul sans avoir à introduire un certain nombre grandeurs physicochimiques adéquates, et la validation des résultats obtenus ne peut se faire pleinement sans une comparaison avec l'expérience. Avec le développement de matériaux optoélectroniques à faibles dimensions, la caractérisation des variations locales de la luminescence a une grande importance [1]; la technique de la cathodoluminescence (CL) à faible énergie à des avantages décisifs à cet effet, elle permet la caractérisation des nanostructures qui peuvent être

utilisés pour évaluer les matériaux pour plusieurs applications industrielles. Avec la cathodoluminescence, on peut également cartographier à la fois la distribution de la luminescence latéralement et en profondeur de l'échantillon qui peut fournir des informations précieuses sur les mécanismes de croissance [2]. Comme illustré sur la figure (II.2), l'interaction des électrons incidents avec la matière peut générer des différents signaux qui fournissent des informations sur les différents matériaux. À côté des propriétés optiques obtenus avec de cathodoluminescence, l'information structurale peut être obtenue à partir la réflexion (diffraction d'électrons à haute énergie, RHEED) et les électrons transmis (microscopie électronique en transmission, MET), la morphologie de surface des électrons secondaires (microscopie électronique à balayage, SEM) (Cette technique de caractérisation morphologique permettent de visualiser un échantillon (état de surface, défauts, structure) et par extension de mesurer des dimensions d'objets), la structure chimique électrons Auger (spectroscopie d'électrons Auger) et les rayons X (spectroscopie à dispersion d'énergie des rayons X, EDS) et les propriétés électriques du courant induit en raison de la séparation des paires e-h générés (courant par faisceau d'électrons induite, EBIC). La combinaison de ces techniques avec la cathodoluminescence se traduit par une meilleure compréhension de l'origine de la luminescence [3].



**Figure (II.2)** Description générale des techniques de caractérisation.

#### La classification des techniques de caractérisation

- Les techniques de « caractérisation morphologique » qui servent à visualiser un échantillon et par extension à mesurer les dimensions d'un échantillon.
- Les techniques de « caractérisation chimique » qui permettent d'identifier la nature chimique des éléments présents dans un échantillon et pour certaines de déterminer l'environnement chimique d'un élément présent dans l'échantillon (type de liaison chimique).

- Les techniques de « caractérisation structurale » qui mettent en évidence l'éventuel agencement ordonné des atomes dans un échantillon.
- Les techniques de « caractérisation fonctionnelle » qui permettent de mesurer la réponse d'un composant élémentaire à une sollicitation extérieure.

## **I. La microscopie électronique à balayage (MEB)**

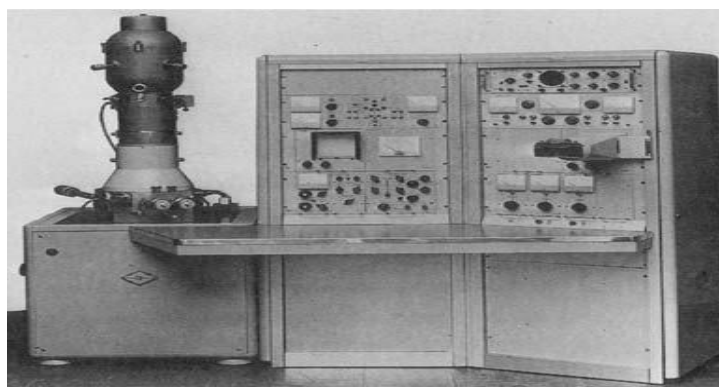
La microscopie électronique à balayage (MEB) est une technique d'observation de surface présentant une excellente résolution spatiale, de l'ordre de quelques nanomètres et une très grande profondeur de champ. Outre l'observation, elle permet d'obtenir d'autres informations complémentaires, telles que la composition chimique locale, la structure cristallographique et la texture, etc. Dans un microscope électronique ou une microsonde électronique, un faisceau incident d'électrons, appelés aussi électrons primaires, interagit avec l'échantillon. En effet, cette technique consiste à envoyer un faisceau accéléré (1 à 40 kV) d'électrons sur l'échantillon à observer. Ce faisceau peut balayer suivant deux directions la surface de l'objet. Le signal détecté est transmis à un écran vidéo dont le balayage est synchrone de celui du faisceau. Le signal détecté est en fait produit par certains électrons qui ont interagi avec la matière. Ceci permet, en sélectionnant les différents types d'électrons, d'obtenir soit une image du contraste topographique (électrons secondaires), soit de visualiser le contraste chimique (électrons rétrodiffusés) de l'échantillon. Il en résulte des modifications internes de la cible (agitation thermique, absorption d'électrons, création de paires électron - trou, ...) et diverses émissions d'électrons (secondaires, rétrodiffusés, transmis et Auger) et de photons sur un spectre large de longueur d'onde (rayons X, ultra-violet, visible, infrarouge, ...). Ces particules sont utilisées en imagerie ou en spectroscopie et apportent des informations sur l'échantillon : sa morphologie, sa topographie, la nature et le nombre des éléments le composant, sa structure cristalline, sa structure électronique, ... Chaque particule donne lieu à un signal, analysé par un détecteur particulier et renseigne sur une des propriétés de l'échantillon, aussi appelé cible. Actuellement, les microscopes à balayage peuvent fonctionner avec des tensions d'accélération très basses, parfois <1kV, pour étudier des surfaces. Les Applications ne sont pas seulement l'imagerie d'objets, mais aussi de la métrologie et de l'analyse de défiance [4].

L'avantage principal de microscope électronique à balayage est l'imagerie des surfaces solides et la morphologie avec une résolution spatiale très élevée et grande profondeur de champ.

- Il permet de visualiser les échantillons en 3 dimensions.
- Il donne des informations sur les relations entre les différentes structures du tissu.
- On peut également obtenir une image de composition du matériel étudié.

- Il permet l'observation d'objet macro et microscopiques.
- Le détail minimum obtenu dépend de la taille de la sonde.

En 1942 aux Etats-Unis (Laboratoire RCA), Vladimir Zworykin (russe, New Jersey) et J Hillier et RL Snyder, publient les détails du premier MEB (SEM). Ce MEB permet l'analyse de surfaces opaques. Les électrons étaient accélérés sous 10keV et l'appareil était doté de trois bobines électrostatiques. Résolution=50nm. Le canon à électrons se trouvait en bas du microscope pour que la chambre d'analyse soit à bonne hauteur pour le manipulateur. Dans les premières versions, le balayage était obtenu par déplacement électromécanique de l'échantillon [5].



**Figure (II.3)** Photographie du premier microscope électronique à balayage commercialisé en 1965.

### **I.1. Formation de l'image et la résolution spatiale**

En microscopie optique classique, la lumière visible réagit avec l'échantillon et les photons réfléchis sont analysés par des détecteurs ou par l'oeil humain. En microscopie électronique, le faisceau lumineux est remplacé par un faisceau d'électrons primaires qui vient frapper la surface de l'échantillon et les photons réémis sont remplacés par tout un spectre de particules ou rayonnements : électrons secondaires, électrons rétrodiffusés, électrons Auger ou rayons X. Ces différentes particules ou rayonnements apportent différents types d'informations sur la matière dont est constitué l'échantillon [4].

### **I.2. Le pouvoir de résolution**

En 1873, Ernst Abbe montre que le pouvoir de résolution d'un microscope a une limite imposée par le phénomène de diffraction c'est-à-dire Le pouvoir séparateur d'un microscope optique est limité par la longueur d'onde de la lumière visible .Pour que deux points distants de  $d$  donnent deux images distinctes il faut que:

$$d \geq 0.6\lambda \dots (II. 1)$$

Avec  $n$  est l'indice de réfraction du milieu;  $n$  (air sous vide) = 1,  $\theta$  est demi-angle d'ouverture du faisceau incident entrant dans l'objectif,  $\theta$  dépend du diamètre de la lentille optique et de sa distance focale. Avec le produit ( $n \cdot \sin\theta$ ) est appelé ouverture numérique [4].

### **I.3. Formation de l'image - Traitement de l'information**

Les signaux provenant des détecteurs produisent sur un écran fluorescent une image en noir et blanc. On peut également numériser les images et traiter l'information (traitement du contraste, intégration, filtrage, ...). Le balayage du faisceau électronique consiste à asservir la position du point d'impact du faisceau sur l'objet à deux rampes en tension. La durée totale du balayage doit être suffisante pour former une image de qualité (pour l'œil), c'est-à-dire suffisamment lumineuse, nette et contrastée. L'image dans le MEB est une carte d'intensité 2D dans le domaine analogique ou numérique. Chaque pixel de l'image sur l'écran correspond à un point sur l'échantillon, qui est proportionnelle à l'intensité du signal capté par le détecteur en chaque point spécifique. L'image est générée et affichée électroniquement.

Les images dans le MEB sont formées par la synthèse électronique, aucune transformation optique n'a lieu, et aucuns réels de l'image optique virtuelle ne sont produits dans la SEM. Dans un système de balayage analogique, le faisceau est déplacé en continu; avec un balayage rapide le long de l'axe X (balayage de ligne) complété par un balayage lent par étapes le long de l'axe Y au nombre prédéfini de lignes. Le temps de balayage d'une seule ligne, multiplié par le nombre de lignes dans une trame donne le temps de trame. Dans les systèmes de balayage numériques, seuls endroits de faisceau discrets sont autorisés. Le faisceau est positionné dans un endroit particulier y reste pendant un temps fixe, appelé temps de séjour, puis il est déplacé vers le point suivant [4].

### **I.4. La résolution spatiale**

En microscopie électronique à balayage, la limite inférieure de la résolution spatiale est donnée par le diamètre de la sonde électronique et ses caractéristiques (intensité etc ...), il ne faut pas oublier que la résolution spatiale réelle est liée à la dimension de la zone émettant le signal donnant l'image lors de l'interaction avec le faisceau électronique [6]. Les électrons irradiés dans un matériau peuvent subir des diffusions élastiques et inélastiques. Le matériau irradié est excité par la diffusion les électrons inélastiquement, et cette excitation entraîne la formation de rayons X, d'électrons Auger, d'électrons secondaires, les paires électron-trou, et ainsi de suite. CL lumières sont émises par l'intermédiaire de la recombinaison des paires électron-trou. La résolution spatiale des mesures CL est donc déterminée par la distribution des paires électron-trou. Lorsque les électrons sont pénétrés

dans un matériau, chaque électron change de direction par l'intermédiaire d'une diffusion élastique, et elle réduit son énergie cinétique par l'intermédiaire d'une diffusion inélastique. En conséquence des processus de diffusion, les trajectoires des électrons d'origine sont répartis de façon aléatoire.

### **I.5. Conditions de balayage**

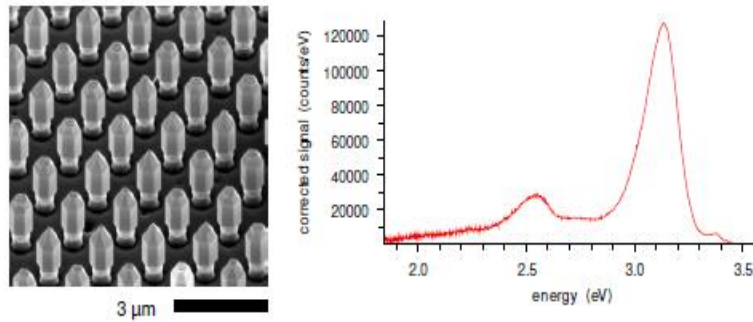
La vitesse de balayage est choisie en fonction du grandissement et du rapport "signal/bruit" observé expérimentalement. En effet, plus l'image est "bruitée", plus il faudra accumuler des signaux en chaque pixel de l'image. Néanmoins, pour nos matériaux à grand gap, il est nécessaire de faire un compromis puisqu'un balayage lent engendre une augmentation des charges accumulées en surface. Dans certain type de MEB, la tension du faisceau électronique peut varier entre 0, 1 et 25keV. Dans l'absolu, plus la tension est élevée meilleure est la résolution. En effet, l'augmentation de la tension d'accélération améliore la brillance du canon ce qui permet de réduire fortement le diamètre du faisceau incident. Par contre, l'utilisation d'une énergie des électrons élevée accroît leur profondeur de pénétration et la diffusion latérale dans l'échantillon, ce qui augmente le volume des zones d'émission et réduit la proportion d'électrons secondaires émergents [7].

### **I.6. Courant et taille de sonde**

Le diamètre du faisceau arrivant sur l'échantillon agit directement sur la résolution spatiale de l'image. Elle augmente avec l'intensité du faisceau incident et modifie le "confort" d'observation à vitesse de balayage et grandissement donnés (rapport «signal/bruit»). En effet, plus le courant est important, moins l'image est bruitée au détriment de la résolution [7].

## **II. La luminescence dans le GaN**

Les propriétés de luminescence des matériaux semiconducteurs peuvent être sondées par diverses techniques spectroscopiques apparentées, qui diffèrent par le procédé par lequel des porteurs en excès sont introduits dans le matériau. Dans les mesures d'électroluminescence et de photoluminescence (en utilisant respectivement l'injection de courant continu et l'excitation optique), la diffraction en champ lointain limite la résolution spatiale. En revanche, la résolution de la cathodoluminescence (CL) n'est limitée que par la distribution spatiale des porteurs excédentaires qui sont générés dans le matériau sous un faisceau d'électrons à haute énergie dans un microscope électronique à balayage, permettant de cartographier les propriétés d'émission à l'échelle nanométrique [8].



**Figure (II.4)** Image électrons secondaire du nanorod GaN / InGaN et spectre CL à température ambiante extrait de l'ensemble de données hyperspectrales [8].

## II.1. Mécanismes de recombinaison

Dans ce paragraphe nous allons citer une bref description sur les mécanismes de recombinaison .Dans un événement de rayonnement, un photon d'énergie égale à l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur est émis, tandis que lors de la recombinaison non radiative, l'énergie des électrons est convertie en énergie vibration d'atomes du réseau, l'émission d'un phonon, l'énergie est ainsi convertie en chaleur. Les principaux mécanismes de recombinaison des porteurs de charge libres dans les semiconducteurs sont : (i) les recombinaisons radiatives ou bande à bande, (ii) les mécanismes de recombinaison via les centres profonds (ou recombinaison Shockley-Read-Hall, SRH) introduits par les défauts cristallins (ponctuels, linéaires, 2D et 3D) et les atomes impurétés (en insertion ou en substitution) et (iii) les recombinaisons Auger [9].

### II.1.1. Les recombinaisons radiatives ou bande à bande

L'énergie relaxe par émission de photon d'énergie de l'ordre du gap, l'émission est donc le plus souvent dans l'UV. Le mécanisme est différent suivant que la transition est verticale ou oblique. Dans le second cas, en effet, pour conserver le moment cristallin, il faut qu'il y ait absorption ou émission de phonons de vecteur d'onde relativement élevé. Or a basse temperature, de tels modes de phonons ne sont pas excites, rendant la probabilité de ce mécanisme faible. Pour une transition verticale, la paire doit avoir des caractéristiques très contraignantes pour assurer la conservation du moment cristallin, la probabilité de transition diminue de plus exponentiellement avec la temperature. Ce mécanisme est finalement lui aussi négligeable a basse temperature [9].

### II.1.2. Les mécanismes de recombinaison via les centres profonds (ou recombinaison Shockley-Read-Hall, SRH)

Le processus de recombinaison SRH implique des niveaux d'énergie à l'intérieur de la largeur de la bande interdite de semi-conducteur qui sont générés par des défauts cristallins. Ces défauts de niveau profond peuvent capturer les porteurs et servir ainsi de centres de recombinaison. Ils sont caractérisés

par le coefficient de capture en fonction de la section de capture, la densité de pièges et d'énergie de piège. Les porteurs de charge qui se recombinent selon la théorie SRH libèrent leur énergie par phonons. Selon la théorie de la SRH, le taux de recombinaison nonradiative est donnée par [9]:

### II.1.3. Les recombinaisons Auger

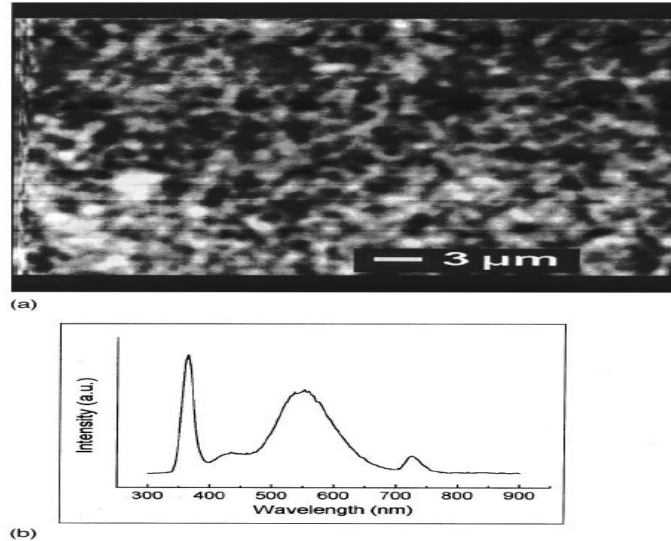
L'électron et le trou se recombinent en étant éventuellement assistés par un piège, l'énergie de la paire est communiquée à un porteur libre (electron ou trou). Le nombre de porteurs étant très faible à basse température pour un semi-conducteur non dope, ce mécanisme est peu probable [9].

## II.2. La cathodoluminescence

Elle est reconnue comme étant un outil efficace pour analyser des matériaux luminescents tels que des semi-conducteurs à larges bandes interdites (GaN, ZnO) aussi bien à l'échelle micrométrique que nanométrique [1]. La qualité d'un cristal semi-conducteur peut être mesurée en observant la lumière émise par le cristal quand il est excité par une source d'énergie. Ceci est appelé luminescence du matériau. La luminescence est, à certains égards, le processus inverse de l'absorption. De façon générale, la luminescence est l'émission de la lumière d'une substance excitée par une forme d'énergie. L'émission de lumière à partir de la surface du cristal, et se traduit par un pic d'émission de lumière à une longueur d'onde correspondant à l'énergie [1]. Lorsque des matériaux semi-conducteurs ou isolants sont bombardés par un faisceau d'électrons, des photons de grande longueur d'onde (ultraviolet, visible) sont émis. Le spectre obtenu dépend du matériau étudié et de sa pureté. Le bombardement d'un matériau par des électrons de haute énergie peut provoquer l'émission de la lumière, ce processus est appelé la cathodoluminescence (CL). Dans le cas des semi-conducteurs l'origine des photons proviennent de la recombinaison radiative des paires électron-trou générées lors de l'interaction électron-matière et le spectre obtenu dépend du matériau étudié et de sa pureté. La recombinaison directe de ces porteurs avec les porteurs majoritaires d'une jonction p-n permet l'émission d'un photon dont l'énergie correspond à la bande interdite  $E_g$  du semiconducteur [1]. La cathodoluminescence c'est un outil pour obtenir l'information détaillée des ces émissions et d'expliquer l'origine des émissions spécifiques de petite zone spécifique, même à partir de nanostructures.

$$\lambda = \frac{1.24}{E_g} \quad (\mu\text{m}) \quad (\text{II. 2})$$

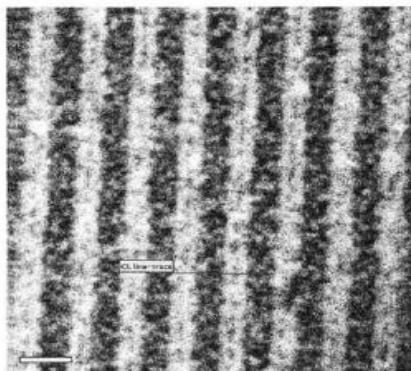
Un autre grand avantage de la spectroscopie CL est que le petit faisceau peut sonder les nanostructures sélectionnée avec une résolution spatiale peut aller jusqu'à plusieurs dizaines de nanomètres en fonction de la tension de génération.



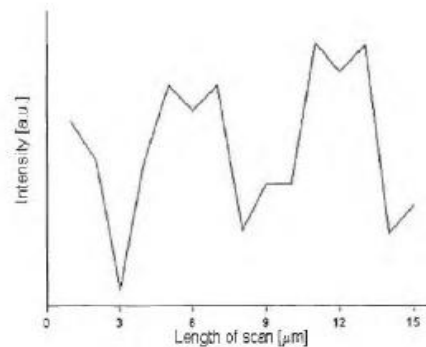
**Figure (II.5)** (a) image-CL pour une surface de film GaN, (b) sepctre - pour une surface de film GaN [10].

### II.2.1. La résolution spatiale en CL

Nous avons vu que la taille du volume de génération et donc la résolution spatiale en CL sont affectées par un ensemble de paramètres comprenant l'énergie d'excitation, le semiconducteur, le type de porteurs, la dimensionnalité, etc.... Il est donc très important de connaître ces conditions afin de mieux comprendre la relation entre la génération de porteurs et les contrastes lumineux sur les cartographies de CL. On notera qu'une haute résolution spatiale (quelques dizaines de nanomètres) peut être obtenue pour de faibles tensions d'accélération et un semi-conducteur massif présentant une faible longueur de diffusion. L'intérêt de cette technique repose sur sa grande résolution spatiale latérale.



**Figure 4.10:** Monochromatic cathodoluminescence image of ELO GaN at 364 nm using an electron beam of energy 15 keV, a probe current of 5 nA and 800 μm slits



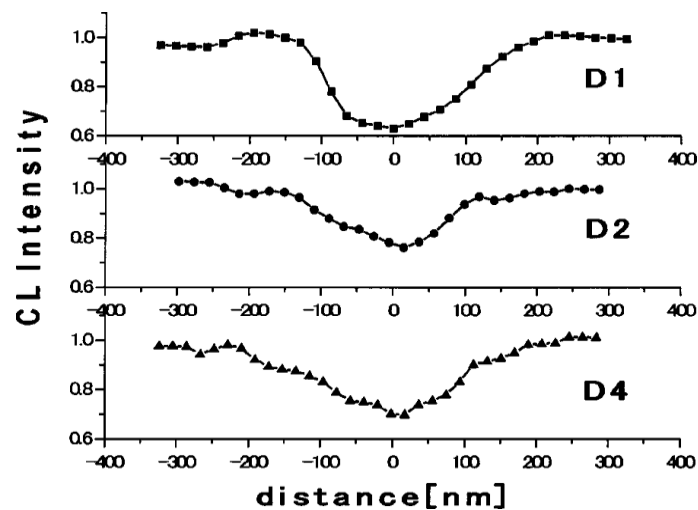
**Figure 4.11:** Line scan corresponding to region from figure 4.10

**Figure (II-6)** a) image de cathodoluminescence d'un ELO de GaN b) lignes de Figure. II-6.balayage [11].

La résolution en CL dépend non seulement de la taille du faisceau d'électrons et de l'étalement des électrons primaires dans le matériau, autrement dit de l'extension du volume d'interaction, mais également de la capacité des paires e-h à diffuser au delà de leur point de création.

## II.2.2. Les avantages de la cathodoluminescence

Pour mieux comprendre l'utilité de CL comme étant un outil d'analyse quantitative, on va la comparer avec la technique de microanalyse par les rayons x. Les deux techniques analysent les rayons électromagnétiques émis par l'échantillon suite à l'impacte d'un faisceau d'électrons. La différence majeure provient de la nature des rayons analysés où les rayons x émis sont dus à des transitions concernant les niveaux atomiques, donc ils renseignent sur la nature chimique des atomes particuliers et des défauts (voir figure (II-7)) [12].



**Figure (II-7)** Profils d'intensité CL le long des dislocations (Dans le GaN); (a) Les trois dislocations TD (D1), (b) Une seule dislocation TD (D2), et (c) La dislocation de bord(D4) [12].

Par contre la CL analyse des photons émis dans le domaine qui se prolonge du proche ultraviolet, passant par le visible et arrivant au proche infrarouge, et qui, résultant les transitions électroniques entre les bandes et les niveaux situés dans le gap par les défauts et les impuretés, nous donne des informations sur la nature électrique des défauts. Mais la technique de microanalyse par les rayons x est modélisée par une règle générale pour l'identification des éléments par la détermination de leur nombre atomique  $Z$  en utilisant la loi Moseley ( $\nu \propto Z^2$ ) qui relie la fréquence  $\nu$  d'une raie caractéristique au nombre atomique  $Z$ , par contre l'absence d'une règle générale d'identification pour la CL et le manque d'une théorie quantitative universelle et applicable sur un large domaine font que les développements de la CL comme outil d'analyse sont limités[13]. Enfin on peut résumer les avantages de la CL en trois points :

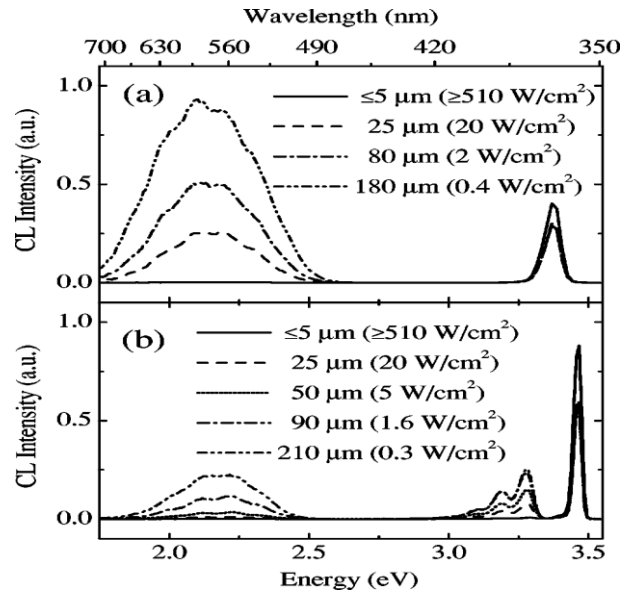
- La dynamique des conditions d'excitation est soit l'énergie d'accélération  $E_0$  soit l'intensité du faisceau électronique  $I_p$  (c'est à dire le nombre des électrons  $N_{el}$ ).
- Une bonne résolution spatiale.
- La facilité de préparation des échantillons.

Mais l'exploitation des informations rapportées par la CL nécessite la modélisation de cette dernière (qui fait une partie de notre travail). Il faudrait que cette modélisation soit aussi réaliste que possible pour une meilleure fiabilité des paramètres mesurés (notre but). Ceci prescrit en conséquence une bonne conception des phénomènes physiques mis en jeu au cours de l'étude par cette technique, c'est-à-dire l'analyse de l'interaction électron-matière.

Et l'analyse de cathodoluminescence (CL), l'émission de lumière à partir d'un matériau sous irradiation avec un faisceau d'électrons d'énergie, est bien établie comme un outil de caractérisation spectroscopique dans l'étude des semi-conducteurs luminescents. L'avantage principal de la cathodoluminescence par rapport aux techniques analogues comme la photoluminescence et l'électroluminescence réside dans sa capacité à la résolution spatiale.

### **II.2.3. L'excitation locale et la distribution de la profondeur**

Le principal avantage de la cathodoluminescence est l'excitation locale, ce qui la rend particulièrement adapté pour la caractérisation des nanostructures. Un contrôle précis de la taille et de la position du faisceau d'électrons dans le microscope électronique permet d'acquérir un spectre de CL à partir d'une région à l'échelle nanométrique. La cathodoluminescence a l'avantage de révélateur non seulement la présence de centres de luminescence mais également leur distribution spatiale. L'utilisation d'électrons en tant que source d'excitation permet une comparaison directe avec d'autres techniques à faisceau électronique. Ainsi, CL est une méthode puissante pour corrélérer luminescence avec la structure de l'échantillon et de préciser l'origine de la luminescence. Non seulement la distribution latérale de la luminescence mais également la distribution en profondeur est important pour la caractérisation de nanostructures. D'ailleurs, toutes les nanostructures peuvent être recouvertes par des couches. Il peut également y avoir un certain gradient de concentration de défauts, tels que les impuretés entre la surface et le noyau des nanostructures. En modifiant l'énergie des électrons, il est possible de faire varier la profondeur pénétration des électrons incidents et d'exciter les centres de luminescence à différentes profondeurs.



**Figure (II-8)** Spectres de CL obtenus à partir d'un échantillon de GaN (a) à 300 K et (b) à 77 K dans différentes conditions de faisceau d'électrons [14].

Sur la figure (II-8), et d'après Kucheyev *et al.* [14] la densité d'excitation dépend non seulement des paramètres de CL (tels que l'énergie et le courant faisceau), mais aussi de la taille du spot de faisceau (à savoir, sur la focalisation du faisceau d'électrons), qui est difficile à mesurer de manière quantitative.

**Tableau II.1.** Application de CL pour la caractérisation des matériaux semiconducteurs [15].

Nature des données	Informations Obtenues
Distribution spatiale de la luminescence	-Homogénéité -Composition chimique -Schéma de réaction à l'interface -Schéma de dislocation -Profil de diffusion
Intensité des luminescences	-Concentration des défauts -Longueur de diffusion -Vitesse de recombinaison en surface -Absorption de la lumière émise par le matériau
Spectre de distribution de la luminescence	-Composition -Structure de bande -Caractérisation
Energie d'excitation	-Densité des pièges -Effet de la température -Rendement des recombinaisons radiatives

### III. Les courants induits par un faisceau d'électrons (EBIC)

Des courants induits par un faisceau d'électrons est une technique de microscopie électronique qui peut être utilisée pour la caractérisation électrique de matériaux et dispositifs semi-conducteurs. SEM-EBIC peut fournir des informations sur les défauts électriquement actifs, diffusion des porteurs, mécanisme de recombinaison de surface, mécanisme de recombinaison en volume, les centres de piégeage, ... etc. [16]. Dans un matériau semi-conducteur, le faisceau d'électrons incident génère des paires électrons trous ou des porteurs de charge mobiles dans le volume d'interaction. Ces porteurs de charge se diffusent, en raison de leur haute concentration localisée, à travers le réseau jusqu'à ce qu'un événement de recombinaison ou de piégeage se produit. Si un champ électrique est appliqué extérieurement à l'échantillon, ou un champ électrique interne à l'intérieur de l'échantillon existant, les paires électrons- trous générés par le faisceau se déplacent en réponse au champ. Les électrons et les trous se déplacent dans des directions opposées, en raison du champ électrique, ce qui crée un courant qui peut être détecté dans un circuit externe. A cet égard, l'échantillon lui-même est utilisé comme un séparateur de charge. Un champ électrique interne est le plus souvent fourni par une jonction p-n ou une barrière Schottky, tandis qu'un champ électrique externe est fournie par une tension appliquée aux contacts électriques sur le dispositif. La technique impliquant le bombardement d'électrons, dans un MEB, sur un échantillon avec un champ électrique interne due à électrons barrière effets voltaïques est communément appelé faisceau d'électrons des courants induits dans la littérature [17]. Le premier exemple de la technique SEM-EBIC appliqué à un dispositif à semi-conducteur avec une jonction p-n a été rapporté par Lander et al [18] chez laboratoire Bell en 1963. Plusieurs montages expérimentaux de la technique EBIC sont décrits par Leamy [19] bien que le principe de fonctionnement de base reste le même.

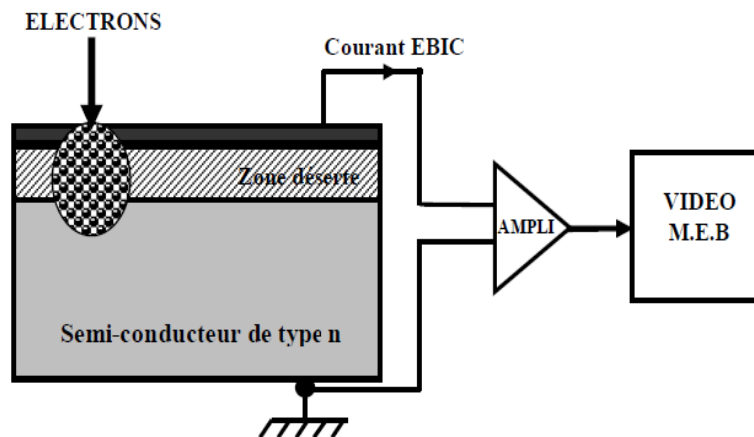


Figure (II-9) Schéma de principe de la technique EBIC [17]

Pour donner un exemple d'application pour la caractérisation de GaN par la technique EBIC, les profils EBIC dans LEDs à nanofils coeur-coquille InGaN/GaN pour différentes tensions sont montrés dans la Figure (II-10) [20]. D'après [20], le signal EBIC à faible tension d'accélération étant fortement sensible à l'état de surface de l'échantillon, et les changements des profils avec la tension appliquée ont lieu principalement dans la partie inférieure du fil : l'efficacité de transport augmente de façon significative dans cette région lorsque le dispositif est polarisé en inverse.

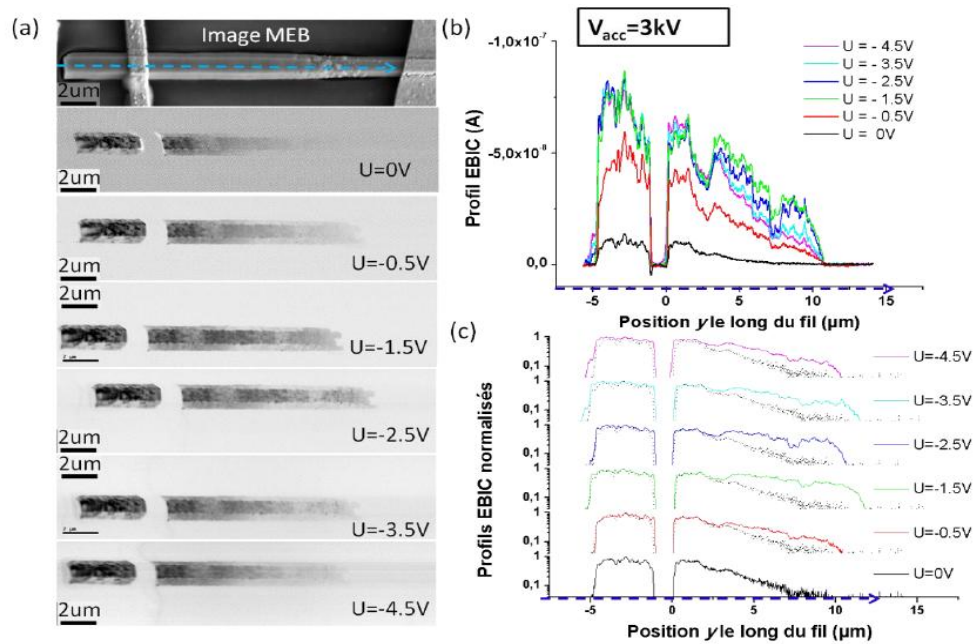


Figure 58 (a) Image MEB à 10 kV obtenue en imagerie par électrons secondaires et cartographie EBIC mesurées à 3 kV pour différentes tensions  $U$  appliquées entre les contacts du fil. (b) Profils EBIC mesurés le long de la flèche en pointillée en (a). (c) Profils EBIC normalisés. La courbe en pointillée correspond au profil mesuré à  $U = 0$  V qui est superposé pour pouvoir les comparer.

**Figure (II-10)** Image MEB à 10 kV obtenue en imagerie par électrons secondaires et cartographie EBIC mesurées à 3 kV pour différentes tensions  $U$  appliquées entre les contacts du fil [20].

#### IV. Microscopie à force atomique (AFM)

La Microscopie à Force Atomique ou AFM a été introduite en 1986 par G. Binnig, C.F. Quate et C. Gerber comme une application du concept de microscope à effet tunnel (STM : scanning tunneling microscope). Cette technique utilise les interactions entre les atomes. En effet, lorsque l'affinité des atomes est grande, ils se lient pour former une molécule ou un cristal, mais dans la plupart des cas, cette attraction est très faible et n'est perceptible qu'à très faible distance (il s'agit de force de Van der Waals). A l'inverse, lorsqu'ils sont très proches, les atomes se repoussent du fait de la soumission des électrons du cortège électronique au principe d'exclusion de Pauli. Il y a donc une sorte de (distance d'équilibre) : si les atomes s'éloignent, une force les rappelle, et s'ils se rapprochent, une force les repousse. On mesure la force qui s'établit entre l'atome de la pointe et

l'atome de la surface (entre  $10^{-7}$  et  $10^{-11}$  N), cette force entraîne un mouvement oscillant de la pointe grâce au bras de levier (cantilever) en fonction du relief de l'échantillon et qui est mesuré à l'aide d'un miroir fixé sur le cantilever et une double photodiode. Lorsque les atomes se rapprochent, une force attractive apparaît entre les noyaux et le nuage électronique de l'autre atome. Cette force croît jusqu'à une certaine distance où les effets de répulsions entre les parties de même charge électrique apparaissent. La force d'attraction diminue et devient répulsive lorsque les nuages s'interpénètrent. Il permet d'étudier à l'air libre les matériaux isolants tels que les molécules biologiques. Il possède une sonde très fine (2 à 3 nm à son extrémité) placée au contact direct de l'échantillon. Cette pointe suit les dénivellations de la surface où elle est promené. Son fonctionnement est basé sur la détection des forces inter-atomiques entre la pointe et l'échantillon. En mode topographique, trois forces s'équilibrent : force de Van der Waals attractive, force coulombienne répulsive, force exercée par la pointe. Les vibrations de la tête (dues aux forces de répulsion) sont transformées en vibrations lumineuses, par réflexion d'un rayon laser sur le bras de levier. L'analyse de ses mouvements verticaux, amplifiés par un ressort très sensible et détectés par un dispositif optique, dessine une carte du relief à l'échelle nanométrique. L'intérêt de la microscopie à force atomique réside dans son aptitude à mettre en évidence des cinétiques de croissance cristalline ou de dissolution, à mesurer les forces adhésives résultant des interactions entre deux surfaces en milieu aqueux. Elle rend les forces magnétiques, électrostatiques, adhésives et de friction, accessibles à une échelle non atteinte auparavant [21].

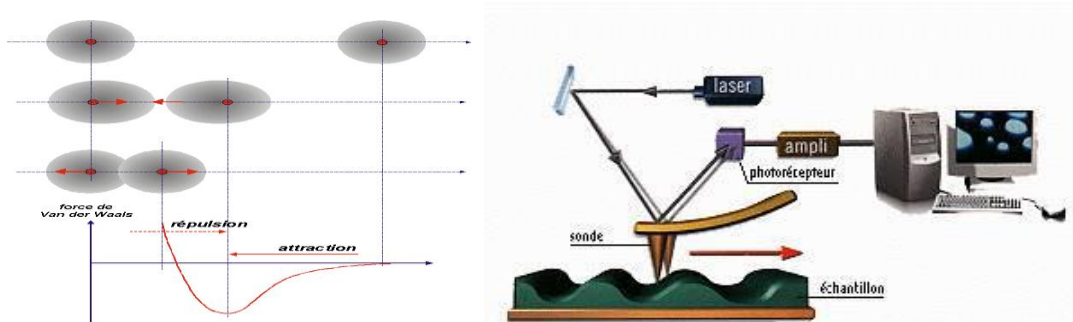


Figure (II-11) AFM en mode contact, morphologie de surface.

## V. Autres méthodes

Les techniques de caractérisation citée en dessous ne sont pas les seuls techniques qui découlent des phénomènes liés aux interactions électrons-matière. On peut citer également :

### **V.1. Microscope électronique à transmission (TEM)**

Les principales informations retirées du MET proviennent essentiellement des électrons transmis (voir interaction électrons-matière). Ils permettent d'obtenir à très fort grossissement des images (dites haute résolution) de l'enchaînement des atomes mais aussi des clichés de diffraction électronique fonction de la structure cristalline de l'échantillon étudié. La microscopie électronique en transmission (TEM) par rapport au SEM appartient à la deuxième classe d'instruments. Elle analyse des échantillons préparés de façon à pouvoir être transparents aux électrons. Le Microscope Electronique à Transmission permet d'accéder aussi bien à la topographie qu'à la structure ou à la composition chimique des phases étudiées, et ceci avec une résolution spatiale de l'ordre du nanomètre [22].

### **V.2. Microscope électronique à transmission et à balayage (STEM)**

En fait, cette technique correspond à l'incorporation d'un balayage dans la colonne du MET. Elle augmente considérablement les possibilités d'acquisition d'informations. Très souvent, cet ajout fait aujourd'hui partie intégrante des nouveaux MET [22].

### **V.3. Microscope à effet tunnel (STM)**

Ce microscope, inventé par les physiciens H. Rohrer et G. Binnig, au début des années 80, et qui leur valu le prix Nobel en 1986, appartient à une famille plus vaste de microscopes dits "de proximité" ou "à sonde locale" ou bien encore "microscopes en champ proche". Le principe de fonctionnement de ces microscopes est totalement différent du principe de fonctionnement des microscopes optiques conventionnels ou même des microscopes électroniques. Il est basé sur le déplacement d'une sonde de très petite taille (de l'ordre du nanomètre) très près de la surface à étudier. Le vif intérêt suscité par ce nouveau type de microscopes provient de leur capacité à réaliser une topographie de la surface d'un solide à différentes échelles, y compris celle de l'atome ! (c'est à dire à une échelle de l'ordre de 10 millièmes de mm). C'est donc le plus fort grossissement jamais atteint par un microscope. Dans ce type microscopie, On mesure le courant « tunnel » qui s'établit entre l'atome de la pointe et un atome de la surface. Ce courant varie très fortement avec la distance (variation d'une décade par Å). La pointe balaie la surface, soit en maintenant la distance fixe (et on mesure la variation de courant) soit en maintenant le courant constant (et en déplaçant en Z). La surface 3D est reconstruite par l'ordinateur [23].

### **V.4. Spectromètre Auger**

Cette technique est apparue dans les années 80 et s'est développée très rapidement. Comme son nom l'indique, elle correspond à la détection des électrons Auger émis par le matériau (voir interaction

électrons-matière). Elle constitue un outil puissant pour l'étude de couches minces et des contaminants de surface. En particulier, elle trouve une place très importante dans le domaine de la microélectronique. Cependant, elle nécessite la technique de l'ultravide ( $10^{-8}$  Pa) [24].

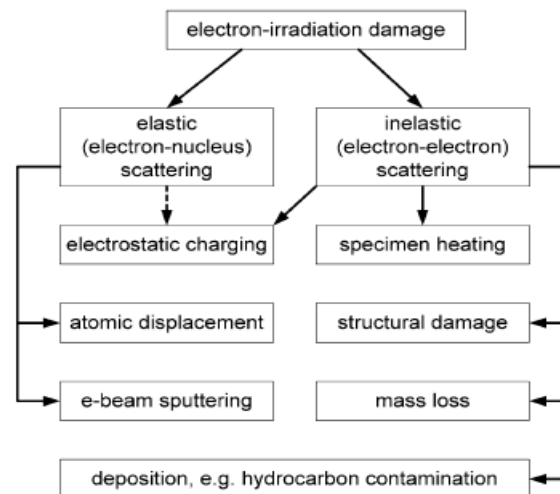
### **V.5.L'électroluminescence et la photoluminescence**

A. L'électroluminescence et la photoluminescence sont couramment utilisées pour caractériser les spectres d'émission et l'efficacité des échantillons semi-conducteurs. Ces techniques, cependant, ont des limites par rapport à la cathodoluminescence, en particulier pour fournir des informations concernant la résolution spatiale [25].

## **VI. Effets de l'irradiation par un faisceau d'électrons**

En fait, le problème de l'irradiation des semiconducteurs n'a pas présenté la simplicité attendue. Si tout d'abord l'accord a semblé bon entre les résultats expérimentaux et des modèles théoriques, des études plus détaillées n'ont pas permis de conserver un tel modèle simple, peut-être précisément en raison du nombre et de la sensibilité des méthodes employées. Actuellement, si l'on ne peut plus compter sur un modèle théorique simple, applicable à une variété de corps et de conditions d'étude, on peut chercher à dégager quelques grandes orientations qui guident les travaux dans ce domaine. Tout d'abord, L'irradiation d'un matériau par un faisceau d'électrons peut provoquer des modifications à travers plusieurs mécanismes impliquant une diffusion élastique et inélastique du faisceau d'électrons primaires qui induisent des changements dans les structures électroniques et de liaison de l'échantillon. En plus de fournir des informations utiles, le faisceau d'électrons utilisé dans un microscope électronique à transmission (MET) ou un microscope électronique à balayage (MEB) peut provoquer un changement temporaire ou permanent de la structure en surface ou en volume d'un matériau. Une façon de catégoriser cet endommagement est en fonction du type de diffusion d'électrons qui en résulte [26]. La diffusion élastique représente la déflexion électrostatique des électrons entrants par le champ de Coulomb de chaque noyau atomique. Il donne lieu à des diagrammes de diffraction d'électrons et à la diffraction et au contraste de phase dans les images MET, ainsi que le contraste d'électrons rétrodiffusés (BSE) dans les images MEB, mais dans certaines circonstances peut entraîner un déplacement atomique dans un échantillon cristallin ou une pulvérisation par faisceau électronique d'atomes de sa surface. Et la diffusion inélastique représente l'interaction coulombienne des électrons entrants avec les électrons atomiques qui entourent chaque noyau. Il donne lieu à la production d'électrons secondaires qui fournit des images MEB, à l'émission de rayons X (utilisés pour l'analyse élémentaire dans le MEB et MET) et au spectre de perte d'énergie d'électrons (EELS) dans le MET. Mais la diffusion inélastique peut également produire des

effets de radiolyse, qui modifient la structure d'un échantillon ou éliminent le matériau (perte de masse). Dans certaines conditions (la présence d'hydrocarbures ambiants), l'excitation électronique provoque également une contamination par les hydrocarbures, qui obscurcit ou déforme l'image MET ou MEB [27].



**Figure (II-12)** Classification des endommagements d'irradiation selon le type de diffusion d'électrons et selon les effets produits dans un matériau [26].

Les principaux mécanismes d'endommagement des faisceaux d'électrons sont:

- Le chauffage de l'échantillon (Les effets thermiques).
- Excitation électronique des atomes de surface provoquant ou adsorption des atomes de la phase gazeuse.
- Radiolyse - excitation électronique des atomes en vrac causant la rupture des liaisons.
- Formation de défauts ponctuels par déplacement des atomes à partir de leurs sites de réseau.
- Accumulation de charge provoquant des champs électriques qui conduisent à la diffusion stimulée de défauts chargés et d'impuretés.

### VI.1. Les effets thermiques

Au sens large, les effets thermiques sont ceux causés par une redistribution de l'énergie interne dans un système, et ils peuvent être regroupés en naturelles et artificielles [28]. Plus souvent, cependant, au lieu de considérer un système générique hors d'équilibre, on suppose un système à l'équilibre et on comprend les effets thermiques comme ceux causés par une variation de température forcée de l'extérieur ou due à des processus internes. La plupart du temps, les effets thermiques (c.-à-d. la réponse thermique) et les «causes» thermiques (c'est-à-dire la charge thermique) sont inclus dans 'l'étude le comportement thermique des matériaux' est un sujet plus large, plus directement lié à leurs propriétés thermiques générales qu'aux effets thermiques d'intérêt particulier; par exemple. Les processus de transfert de chaleur, ou le fait que lorsque l'énergie est ajoutée à un matériau, il devient

plus chaud, sont le comportement thermique général de la matière, habituellement pas inclus dans l'analyse des effets thermiques. Les effets thermiques sur les matériaux peuvent être utilisés de façon avantageuse (tout type de thermomètres relais aux eux), ou une nuisance (distorsions de forme et de dimension dues au chauffage ou au refroidissement, dysfonctionnement des équipements électroniques). La plupart du temps, les effets thermiques sont censés se concentrer uniquement sur les matériaux (compris comme matériaux solides), et de traiter les effets d'une température de travail non-confort (froid ou chaud) sur certaines propriétés (structurelles, électroniques, etc.), y compris les procédés thermiques utilisés pour produire, modifier ou éliminer ces matières. Parfois, il est également dit «l'effet de la chaleur sur les matériaux», ce qui signifie l'effet du chauffage afin d'augmenter l'énergie interne. Bien entendu, les effets du refroidissement sont également des effets thermiques pertinents.

#### **VI.1.1.L'échauffement de l'échantillon**

D'après R.F. Egerton *et al* [26], parce que la diffusion inélastique implique une «collision» entre les électrons entrants et les particules (électrons atomiques) de masse similaire, une énergie appréciable peut être transférée dans le processus. Donc, les expériences d'irradiation par un faisceau d'électrons est capable de déposer de grandes quantités d'énergie dans un petit volume d'échantillon.

Des méthodes analytiques pour déterminer l'échauffement des matériaux par un faisceau d'électrons ont été développées par plusieurs chercheurs [29, 30, 31]. Nous citons par exemple le modèle développée par Ludwig Reimer [26]. Dans ce modèle, l'augmentation de la température de surface d'un échantillon en volume peut être estimée en supposant que l'énergie calorifique fournie par un faisceau d'électrons de puissance  $P = f \cdot I_b \cdot V$  est dissipée uniformément dans un hémisphère de rayon  $R/2$ , où  $R$  est la gamme d'électrons dans l'échantillon et  $(1-f)$  est l'énergie perdue comme électrons secondaires et rétrodiffusés. De plus, dans la plupart des expériences d'irradiation par faisceau d'électrons, le faisceau d'électrons est soit balayé, soit défocalisé. Ceci agira pour diminuer davantage le chauffage de l'échantillon, en particulier avec de grandes zones de balayage à faible grossissement. Pour la plupart des semi-conducteurs et des métaux ayant une bonne conductivité thermique, le chauffage par faisceau électronique ne jouera pas un rôle significatif et n'influencera pas les mesures. Mais d'après toujours R.F. Egerton *et al*, si un film mince (sur une grille MET) est examiné dans le MEB et si l'énergie incidente est entre 500 eV et 2 keV, l'élévation de température dans un matériau organique peut atteindre quelques centaines de degrés pour une sonde stationnaire [26, 32]. Dans cette situation, la profondeur de pénétration d'électrons est inférieure à l'épaisseur du film, toute l'énergie du faisceau est déposée dans le film et le flux de chaleur est bidimensionnel. L'élévation de

température est typiquement réduite d'un facteur de dix si le faisceau est balayé à la vitesse de la vidéo [26].

### **Conclusion**

Le but de ce chapitre était de donner un aperçu sur les évolutions à la fois sur techniques d'élaboration et de caractérisation des semi-conducteurs notamment le nitrure de galium et ces alliages. Dans le chapitre suivant, nous présenterons la modélisation de l'interaction électrons-matière dans le GaN et ses alliages. Pour les effets indésirables des méthodes de caractérisation, au cours du bombardement électronique de l'échantillon à l'intérieur du microscope, il se produit une variété de changements structurels et chimiques du fait de l'effet combiné du chauffage, de l'irradiation, de la contamination de surface par le craquage des vapeurs d'hydrocarbures et l'adsorption des gaz résiduels.

## VII. Références bibliographiques du chapitre II

- [1] A. Gustafsson and E. Kapon, "Cathodoluminescence in the scanning electron microscope: Application to low dimensional semiconductor structures", *Scanning Microscopy* Vol. 12, No. 2, pp.285-299, (1998).
- [2] G. Salviati, "Cathodoluminescence investigation of optoelectronic heterostructures and devices", 2nd CEPHONA Workshop on Microscopic Characterisation of Materials and Structures for Photonics (2004).
- [3] J.P. Eberhart, "Analyse structurale et chimique des matériaux", ed Dunod (1997).
- [4] W. Zhou and Z.L. Wang, "Scanning Microscopy for Nanotechnology: Techniques and Applications", Springer (2006).
- [5] D. Mcmillan, "The early development of the scanning electron microscope, in Biological low-voltage scanning electron microscopy", Heide Schatten et James Pawley ed. Springer 2008, p.126.
- [6] J.I. Goldstein, D.E. Newbury, P. Echlin, D.C. Joy, C.E. Lyman, E. Lifshin, L. Sawyer, J.R. Michael, *Electron Guns, Scanning, Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis (Third Edition)*, Plenum Press, New York, pp.29-40, (2003).
- [7] Y. Elgmili "Etude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque", Thèse de doctorat, Université de Sidi Mohamed Ben Abdellah-Fès et de l'Université de Lorraine Metz (2013).
- [8] P.R. Edwards, L.K. Jagadamma, J. Bruckbauer, C. Liu, P. Shields, D. Allsopp, T. Wang and R. W. Martin "High-resolution cathodoluminescence hyperspectral imaging of nitride nanostructures", *Microscopy and Microanalysis* 18, 1212 (2012).
- [9] Y. Sayad, "Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière", Thèse de doctorat préparée en collaboration entre l'Université de Mentouri-Constantine et l'Institut National des Sciences appliquées de Lyon (2009).
- [10] M.H. Zaldivar, P. Fernández, and J. Piqueras, "Study of defects in GaN films by cross-sectional cathodoluminescence", *J. Appl. Phys.*, Vol. 83, No. 5, (1998).
- [11] B. Ryan, "Characterisation of GaN using cathodoluminescence and photoluminescence spectroscopy", Thèse de master de l'université de Dublin (2003).
- [12] N. Yamamoto, N. Yamamoto, H. Itoh, V. Grillo, S. F. Chichibu, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, and S. Nakamura and G. Salviati, "Cathodoluminescence characterization of dislocations in gallium nitride using a transmission electron microscope", *J. Appl. Phys.*, Vol. 94, No. 7, (2003).
- [13] M. Hadeif, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, (1999).
- [14] S. O. Kucheyev, M. Toth, M. R. Phillips, J. S. Williams, and C. Jagadish, "Effects of excitation density on cathodoluminescence from GaN", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 79, No. 14, (2001).
- [15] J.P. Smith, Paper N°38 presented at 3rd Nat'l, Conf. Electron Probe Analysis, Chicago, (1968).
- [16] A. Miri, "Mécanismes de recombinaisons des paires électron-trous associés aux dislocations dans les semiconducteurs III-V", Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille.
- [17] M. Ledra, "Simulation Monté Carlo du contraste de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs Thèse de doctorat, Université de Mentouri Constantine (2006).
- [18] J. J. Lander, G. W. Gobeli, and J. Morrison, "Structural properties of cleaved silicon and germanium surfaces", *J. Appl. Phys.* 34, 2298 (1963).

- [19] K. Bunker, "Development and application of electron beam induced current and cathodoluminescence analytical techniques for characterization of gallium nitrides-based devices", thèse de doctorat (PhD) de l'université de Raleigh (2004).
- [20] P. Lavenus, "Propriétés optoelectroniques de LEDs à nanofils cœur-coquille InGaNGaN", thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud - Paris XI, (2015).
- [21] R. Dianoux, "Injection et détection de charges dans des nanostructures semi-conductrices par Microscopie à Force Atomique", Thèse de doctorat de l'université de Joseph Fourier - Grenoble 1 (2004).
- [22] A. Bogner, P.-H. Jouneau, G. Thollet, D. Basset, C. Gauthier, "A history of scanning electron microscopy developments: Towards "wet-STEM" imaging", *Micron* 38, pp. 390-401 (2007).
- [23] C. J. Chen, "Introduction to Scanning Tunneling Microscopy", Oxford University Press (2008).
- [24] J. F. Bresse, "III-V compound thin layer characterization by a chemical bevel angle Auger technique" *J. Appl. Phys.* 59 (6), (1986).
- [25] J.T. Torvik, C.H. Qiu, R.J. Feuerstein, J.I. Pankove, and F. Namavar, "Photo-, cathodo-, and electroluminescence from erbium and oxygen co-implanted GaN", *J. Appl. Phys.*, Vol. 81, No. 9, (1997).
- [26] R. Egerton, P. Li and M. Malac, "Radiation damage in the TEM and SEM. *Micron* 35 : (2004), 399.
- [27] R.F. Egerton, "Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope", 2nd ed. (Plenum Press, New York, 1996).
- [28] F.P. Incropera, D.P. DeWitt, T.L. Bergman, and A.S. Lavine. "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", 5th Edition with IHT2.0/FEHT with Users Guides. Wiley, (2001).
- [29] J. Vine and P.A. Einstein, "Heating Effects of an Electron Beam -Impinging on a Solid Surface, Allowing for Penetration". *Proc. IEEE*, 111, n° 5, pp. 921-930 (1964).
- [30] L.G. Pittaway, "The Temperature Distribution in Thin Foil and Semi-Infinite Targets Bombarded by an Electron beam" *Brit. J. Appl. Phys.*, 15, pp. 967-982 (1964).
- [31] L. A. Bakaleinikov, E.V. Galaktionov, V.V. Tretyakov and E.A. Tropp, "Calculation of the thermal effect of an electron probe on a sample of GaN", *Physics of the Solid State*, Vol 43, 5, pp. 779-785 (2001).
- [32] R.F. Egerton, F. Wang and P. A. Crozier, "Beam-induced damage to thin specimens in an intense electron probe", *Microsc. Microanal.* 12, pp. 65-71 (2006).

## **Chapitre III**

# **Modélisation de l'interaction électrons-matière (GaN et ses alliages)**

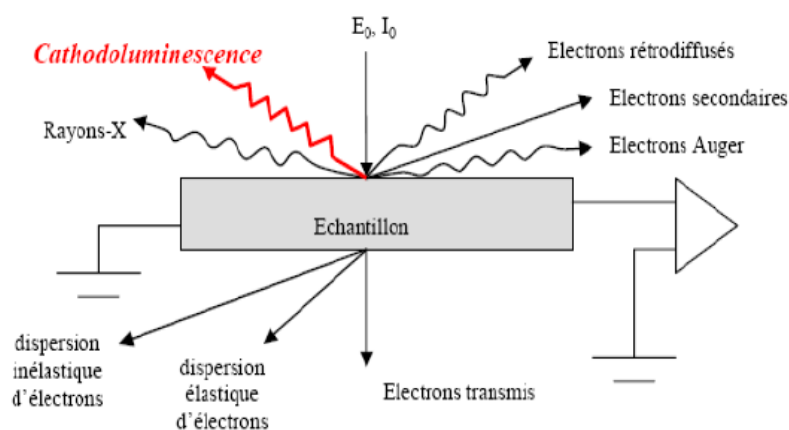
Comprendre le comportement d'un semiconducteur soumis à une irradiation demeure encore aujourd'hui un souci majeur pour la communauté scientifique. Qu'il soit de nature électromagnétique, électronique ou ionique, un rayonnement induit dans la matière des dépôts d'énergie parfois très importants et extrêmement localisés. De plus, l'interaction d'un rayonnement avec le milieu étant par nature non déterministe (stochastique), les prévisions peuvent devenir très délicates. L'objectif principal lors de la modélisation de processus l'interaction electron-matière est le calcul de la répartition spatiale de l'énergie absorbée. Il existe deux types de méthode pour calculer l'énergie déposée dans la matière: méthodes analytiques et des méthodes numériques [1, 2, 3, 4, 5]. La méthode d'analyse est basée sur des approximations particulières qui simplifient la nature du processus réel (petite-angle et la diffusion des particules de diffusion, les objectifs à composant unique, source de source ponctuelle ou de section homogène, etc). Ces hypothèses ne correspondent pas au processus réel de la diffusion du faisceau à l'intérieur de la cible. Néanmoins, la simulation du dépôt d'énergie dans l'échantillon motifs sur des substrats revêtus à l'aide de méthodes d'analyse est très difficile.

La simulation numérique s'avère un outil incontournable pour prédire le comportement de ces matériaux localement, globalement et sur de courtes ou très longues périodes. Pour couvrir ces échelles de temps et d'espace, les outils de modélisation des matériaux se classent en quatre catégories qui concernent : la modélisation de la liaison chimique (modèles de cohésion), la modélisation à l'échelle atomique des événements rapides (dynamique moléculaire), la modélisation des cinétiques lentes de vieillissement (méthodes déterministes ou de Monte-Carlo) et le passage de la microstructure aux propriétés d'emploi. Pour expliquer et éclaircir les résultats expérimentaux l'hors de caractérisation de GaN, nous allons procéder dans ce chapitre à une étude de modélisation basée sur des processus stochastique pour décrire les conséquences de l'interaction electron-matière, pour déterminer la profondeur pénétration, simuler le phénomène de l'émission de la lumière (la cathodoluminescence) et aussi pour déterminer l'élévation de la temperature (Les effets secondaires du faisceau électronique) . La simulation à laquelle nous procédons ne donnera qu'une « image » approximative des observations expérimentales. D'ailleurs, il faudra tenir compte du fait que la procédure de simulation est faite sur quelques hypothèses simplificatrices.

## **I. Rappels sur les interactions électrons-matière**

Nous revenons encore une fois au processus de l'interaction electron-matière, cette fois pour le model physique traité dans ce travail, ce qu'est basé essentiellement sur ce processus. La prédiction du comportement des matériaux sous irradiation, qu'ils soient isolants ou semiconducteurs, constitue un véritable défi. L'étude de l'interaction des électrons avec la matière solide a débuté vers la fin de

l'avant dernier siècle (Lenard en 1895). Les premières théories Bothe (1933) et (1949), Bethe (1933) et (1938) s'intéressaient au domaine des hautes énergies [6]. Dans un microscope électronique ou une microsonde électronique, un faisceau incident d'électrons, appelés aussi électrons primaires, interagit avec l'échantillon. Il en résulte des modifications internes de la cible (agitation thermique, absorption d'électrons, création de paires électron - trou, ...) et diverses émissions d'électrons (secondaires, rétrodiffusés, transmis et Auger) et de photons sur un spectre large de longueur d'onde (rayons X, ultra-violet, visible, infrarouge, ...). La variété des signaux qui sont produites au cours des interactions electron-matière (figure (III.1)) dans un SEM peut fournir des informations sur l'échantillon : sa morphologie, sa topographie, la nature et le nombre des éléments le composant, sa structure cristalline, sa structure électronique, ...etc. Certains électrons sont diffusés de manière élastique, c'est-à-dire en conservant leur énergie cinétique ; se sont les électrons dits "rétrodiffusés" (back-scattered electrons). Au cours du choc, certains électrons primaires cèdent une partie de leur énergie cinétique aux atomes, provoquant l'ionisation de l'atome par éjection d'un électron dit "secondaire". L'énergie des électrons secondaires étant faible (typiquement quelques dizaines d'eV), seuls les électrons venant des couches superficielles ressortent de la matière. L'atome ainsi ionisé se désexcite ; un électron d'une couche supérieure descend occuper la place laissée vide, ce qui provoque soit l'émission d'un photon X (émission secondaire), soit d'un électron Auger. Il est commode de diviser la collision en deux catégories: élastique et inélastiques. Les interactions entre les électrons et les matières solides ont été étudiés dans la littérature à la fois théoriquement et expérimentalement [7,8]. Les interactions d'un rayonnement avec la matière peuvent modifier l'état du rayonnement et aussi l'état de la matière.



**Figure (III.1)** Mécanismes de dispersion des électrons incidents, (d'après A. Nouri 2000) [9]

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

atomes constituant la matière. L'importance de ces deux catégories d'interactions dépend essentiellement de la distance d'interaction  $r$  entre l'électron primaire et le centre de l'atome visé de rayon  $r_0$  (Figure (III.2)).

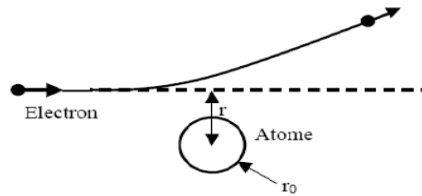
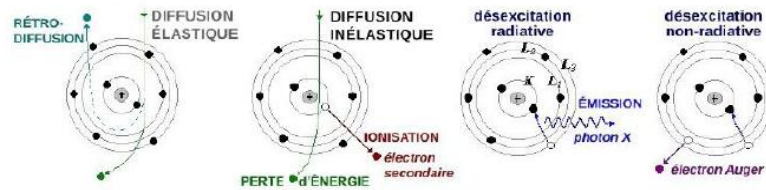


Figure 2.1 : distance d'interaction entre un électron incident et un atome



**Figure (III.2)** Interaction électrons/matière : rayonnements émis par les atomes sous un faisceau d'électrons.

### I.1. Les collisions élastiques

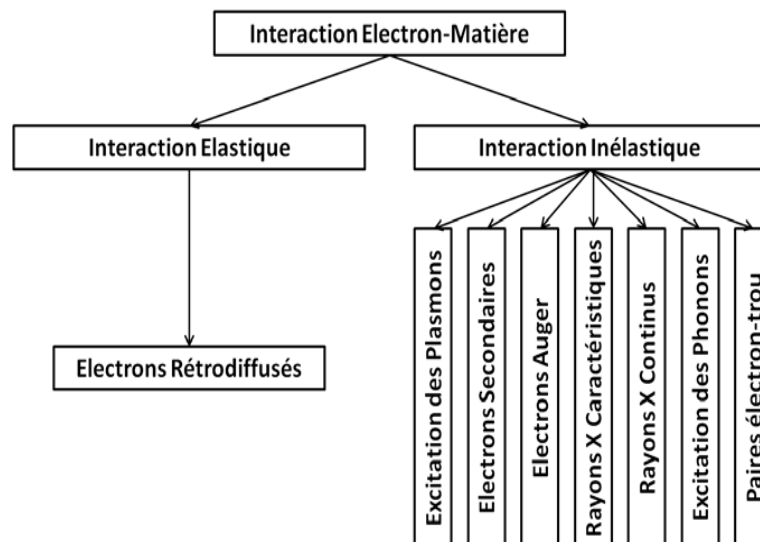
Un électron primaire du faisceau incident entre en collision avec l'échantillon. Il ressort sans perte d'énergie, en gardant son énergie cinétique et sa quantité de mouvement. Il n'a pas échangé d'énergie avec les atomes de l'échantillon. Il a subi une interaction coulombienne avec les atomes "diffuseurs". C'est le processus d'interaction ou diffusion élastique. L'électron incident est rétrodiffusé élastiquement (figure 4). En outre, la diffusion élastique qui se passe si l'électron est dévié de sa trajectoire par l'interaction de Coulomb avec le potentiel positif à l'intérieur du nuage d'électrons. Avec ça, l'électron primaire ne perd pas d'énergie ou - pour être précis - seulement une quantité négligeable d'énergie. Ces signaux sont principalement exploités dans les méthodes de TEM et diffraction d'électrons [10].

### I.2. La collision inélastique

Les électrons pénètrent dans le matériau et perdent leur énergie lors de collisions successives avec les atomes du matériau. Les événements inélastiques impliquent un transfert d'énergie des électrons primaires à des électrons d'une couche atomique interne ou externe des atomes de l'échantillon.

Ce type de collision ne modifie pas considérablement la trajectoire des électrons, mais il est responsable de toutes les pertes énergétiques des électrons primaires. L'excitation de phonons (oscillation des atomes) est le mécanisme de perte d'énergie le plus fréquent. Ce procédé implique une perte d'une petite quantité d'énergie habituellement inférieure 1 eV. Ce type de transfert

énergétique se manifeste par un chauffage de l'échantillon [11]. (Ce phénomène fait l'objet de notre travail). Au cours de la diffusion inélastique il existe une perte d'énergie en cas de diffusion par lequel l'énergie est transférée à partir du faisceau d'électrons incident à l'échantillon tel que mentionné précédemment. Les plus importantes de ces pertes est l'excitation d'un plasma d'électrons, ou la production de plasmon. Dans ce mécanisme, l'électron entrant amène les électrons dans la bande de valence du matériau de cible à osciller ensemble (à comprendre !!!). La production d'électrons dispersés de manière inélastique peut être réduite en augmentant l'énergie du faisceau d'électrons ou bien nous utilisons des échantillons plus minces [12]. L'énergie transférée à l'échantillon peut provoquer des signaux différents tels que les rayons X, électrons Auger ou secondaires, plasmons, phonons, les quanta UV ou cathodoluminescence. Les signaux provoqués par des interactions électrons-matière inélastiques sont principalement utilisés dans les procédés de microscopie électronique analytique.



**Figure (III.3)** Organigramme des différentes interactions possibles et des signaux émis lors de la pénétration d'un électron primaire dans la matière [13].

### I.3. Conséquences d'interaction élastique

L'interaction élastique produit tout de même certains effets sur le matériau car une toute petite partie de l'énergie de l'électron est transférée [10]:

- **Effets thermiques** Si l'énergie transférée est de l'ordre de  $10^{-2}$  à  $10^{-1}$  eV, les atomes sont soumis à des oscillations autour de leur position d'équilibre. Ces oscillations peuvent se faire individuellement (effet Debye) ou collectivement, pour des états d'énergie quantifiés appelés phonons. La vibration des atomes (phonons) se traduit par un dégagement de chaleur. Cet effet est utilisé industriellement dans les fours à bombardement électronique. Ceci représente

un phénomène parasite pour les appareils à faisceau intense d'électrons comme les microscopes électroniques et les tubes à rayons X.

- **Effets chimiques** (3 à 5 eV) : une liaison faible se rompt à cause de l'apport d'énergie. Cet effet a peu de conséquence.
- **Effet de déplacement atomique** (10 à 30 eV) : l'atome reçoit une énergie suffisante pour être déplacé ; la structure du matériau s'en trouve modifiée. C'est un problème en microscopie.

#### I.4. Conséquences d'interaction inélastique

- **Excitation d'un électron** L'électron acquiert une énergie suffisante pour aller dans une orbitale plus haute en énergie. Pour revenir à sa position d'origine, l'électron émet un photon, le plus souvent un photon X. L'énergie de ce photon ne prend alors que des valeurs précises, caractéristiques de l'élément des atomes du matériau. On peut alors faire une analyse qualitative et semi-quantitative en détectant ces photons [10].
- **Éjection d'un électron secondaire** Lorsqu'un électron est peu lié, celui-ci peut acquérir une énergie cinétique suffisante pour être éjecté. On l'appelle alors électron secondaire. Il a une énergie plus faible que les électrons primaires. Ces électrons subissent des interactions inélastiques dans le matériau. Si leur énergie est suffisante, certains peuvent être éjectés de la surface du matériau. Ces électrons permettent d'observer le relief en microscopie électronique à balayage [10].
- **Ionisation** Lorsqu'un électron est éjecté de son cortège, l'atome est sous forme ionisée. Pour revenir à son état normal, un électron peut récupérer sa place par émission d'un photon X. Celui-ci peut aussi être utilisé à des fins analytiques. L'atome peut aussi récupérer son état en éjectant un électron peu lié, appelé électron Auger. Dans certaines spectroscopies, on détecte ces électrons pour identifier les éléments du matériau [10].

#### I.5. La cathodoluminescence et le signal EBIC

Pour un semi-conducteur bombardé par un faisceau d'électrons, des paires électron-trou sont générées par l'énergie obtenue à partir de l'électron incident, un électron dans la bande de valence peut être favorisé à la bande de conduction (figure 2&8). Le résultat est une un paire électron-trou. Cet état excité du semi-conducteur est énergétiquement instable, et le matériau peut se relaxer en remplissant ce trou d'électrons par un électron descendre de la bande de conduction. Ce procédé, désigné par la recombinaison, conduit à l'émission d'un photon portant la différence d'énergie  $E = h\nu$ . Cette énergie correspond à celle de la bande interdite [9].

Pour les semi-conducteurs, l'énergie de la bande interdite est dans la plage de quelques eV, généralement autour de 1 eV, et, par suite, la longueur d'onde du photon émis est dans la plage de la

lumière blanche [14]. Ceci d'une importance pratique pour la recherche et le développement de semi-conducteur, en tant que la mesure de la longueur d'onde de la cathodoluminescence est un moyen pour déterminer des bandes interdites [15]. Il convient de noter que le paire électron-trou peut être stabilisée par l'application d'une polarisation à la sorti de semi-conducteur. De plus, dans une diode comprenant une jonction p-n ou une barrière de Schottky, la recombinaison des électrons et des trous peut être inhibée. En mesurant le courant appelé courant induit par faisceau d'électrons (EBIC) après mise à la masse de l'échantillon, le nombre générés de paires électron-trou peut être déterminée [16].

## **I.6. La section efficace de l'interaction et le libre parcours moyen**

### **I.6.1. La section efficace**

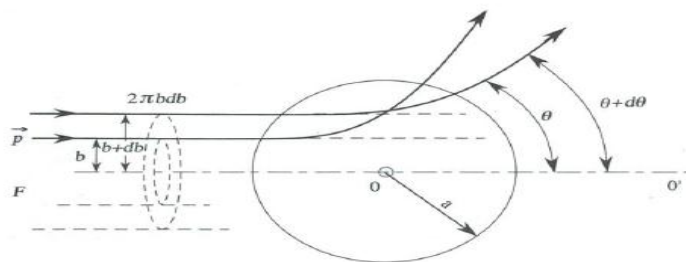
La section efficace est une surface équivalente telle que toute particule la traversant "interagit" (est absorbée, diffusée). Si l'une des particules se déplace dans n'importe quel morceau de matériau, il aura une certaine probabilité d'interagir avec les noyaux ou avec les électrons présents dans ce matériau. Le concept de la section efficace d'interaction est basé sur le modèle simple d'une surface effective. Si un électron passe dans cette zone, une interaction va certainement se produire. Si la section efficace d'un atome est divisée par la superficie réelle, alors la probabilité d'un événement d'interaction est obtenue. Par conséquent, la probabilité d'une interaction déterminée augmente avec l'augmentation de section transversale. La probabilité qu'un certain électron interagit avec un atome de quelque façon que possible dépend de la section efficace  $\sigma$ . Dans le cas le plus général la section efficace de diffusion comprend les processus élastiques (particule diffusée défléchie, mais cible et particule gardant leur nature), inélastiques (la cible peut être dans un état excité) et d'absorption de la particule. Bien que la diffusion des électrons se produit probablement dans la direction vers l'avant, il ya même une petite chance pour rétrodiffusion [13].

$$\sigma_T = \sigma_{elast} + \sigma_{inelast} \quad (III. 1)$$

### **I.6.2. La section efficace différentielle**

La distribution angulaire des particules diffusées peut apporter des informations sur l'interaction qui a eu lieu entre le faisceau et le noyau cible (par exemple sur la forme du potentiel d'interaction). De plus, en général, les détecteurs ont une certaine granularité et sont donc capables de mesurer le nombre de particules diffusées dans une direction définie par  $(\theta, \varphi)$  dans un angle solide élémentaire  $d\Omega$  (coordonnées sphériques). Nous revenons maintenant aux notions statistiques qui doivent nous permettre de prévoir la probabilité d'observer une déviation angulaire  $\theta$  donnée - après diffusion coulombienne sur un noyau. L'angle de diffusion  $\theta$  est déterminé par la valeur du paramètre

d'impact et  $d\Omega$  représente l'angle solide de diffusion sur le disque de surface  $dS=2\pi r^2 \sin\theta d\theta$  situé à la distance  $r$  du centre diffuseur (figure). La valeur de la déviation  $\theta$  est liée à celle du paramètre d'impact  $b$  (ceci reste d'ailleurs vrai même pour un potentiel non coulombien). A une variation  $db$  de  $b$  correspond une variation  $d\theta$  de  $\theta$ . A cause de la symétrie cylindrique du problème, toute particule passant à l'intérieur de la couronne comprise entre les cercles de rayons  $b$  et  $b+db$  sera déviée d'un angle compris entre  $\theta$  et  $\theta+d\theta$  (avec  $d\theta < 0$  pour  $db > 0$  dans le cas coulombien, mais les signes importent peu ici) [17].



**Figure (III.4)** Diffusion des électrons incidents par le noyau atomique.

Cette déviation correspond aussi à des particules incidentes qui sont passées à l'intérieur de la couronne de surface. L'angle solide est déterminé par  $d\Omega=dS/r^2$  de sorte que la section efficace est reliée au rapport des surfaces  $ds$  et  $dS$ , On a :

$$ds = 2\pi b db \text{ et } ds = d\sigma \tag{III. 2a}$$

$$\sigma = \pi b^2 \Rightarrow d\sigma = 2\pi b db \tag{III. 2b}$$

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta \tag{III. 2c}$$

Et

$$dS = 2\pi r^2 \sin\theta d\theta \tag{III. 2d}$$

Donc on a le rapport :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{ds}{dS}\right) r^2 \tag{III. 2e}$$

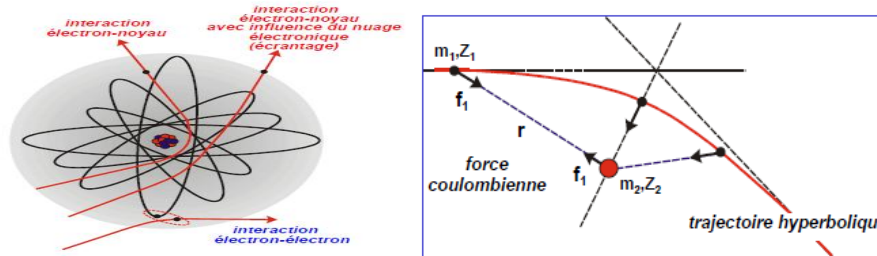
Le rapport  $ds/dS$  défini la probabilité d'observer une particule à une distance  $r$  dans une direction  $\theta$  et on appelle section efficace différentielle angulaire le rapport :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{2\pi r^2 \sin\theta d\theta} \tag{III. 2f}$$

La valeur d'une section efficace ne dépend pas seulement des particules incidentes et cibles et de leur vitesse relative mais aussi du type d'effet physique étudié. Des sections efficaces de diffusion, d'absorption, d'ionisation, d'excitation.

Ces phénomènes résultent de l'interaction de l'électron incident (primaire) avec les constituants de l'atome. Ces interactions sont de natures Coulombienne :

$$f = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (\text{III. 3})$$



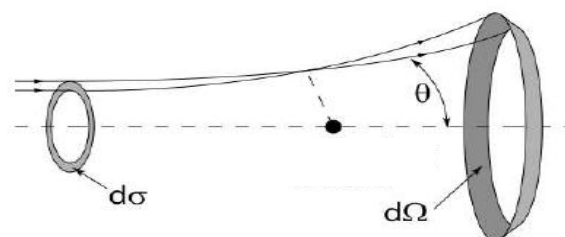
**Figure (III.5)** l'interaction de l'électron incident (primaire) avec les constituants de l'atome.

Les paramètres caractéristiques de l'interaction :

- le paramètre d'impact
- la distance minimale d'approche
- les angles de diffusion

### I.6.3. Formule de Rutherford

En mécanique classique, il suffit, pour calculer cette section efficace différentielle, de calculer, en résolvant les équations de mouvement, l'angle de déviation  $\theta(E,b)$  et d'inverser cette relation pour trouver  $b(E,\theta)$ . En effet, les particules détectées après la collision dans l'anneau d'angle solide  $2\pi\sin\theta d\theta$  sont celles qui sont passées par l'anneau de surface  $2\pi b(E,\theta)db(E,\theta)$  avant la collision. On a donc [17] :



**Figure (III.6)** Diffusion Rutherford sur une cible ponctuelle.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \frac{2\pi b(E, \theta)db(E, \theta)}{2\pi\sin\theta d\theta} = \frac{b(E, \theta)}{\sin\theta} \frac{\partial b(E, \theta)}{\partial\theta} \quad (\text{III. 4})$$

Appliquons cette formule au cas du potentiel coulombien électrostatique entre deux charges ponctuelles  $e Z_1$  et  $e Z_2$ , ou  $e$  est la charge élémentaire :

$$V_C(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{III. 5})$$

Où  $\epsilon_0$  est la permittivité électrique du vide.

$$\tan\left(\frac{\theta_R(E, b)}{2}\right) = |Z_1 Z_2| \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 E b} \quad (\text{III. 6})$$

Dont on remarque qu'il ne dépend pas des signes relatifs des charges électriques. Ce résultat fut en fait obtenu pour la première fois par Rutherford en 1911. Cet angle de déviation mène à la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) \frac{1}{16E^2 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (\text{III. 7})$$

Qui est elle aussi indépendante du signe relatif des charges. Cette section efficace différentielle est représentée en fonction de l'angle pour différentes valeurs de l'énergie à la figure 1 ; on remarque qu'elle diverge lorsque  $\theta$  tend vers 0, ce qui est dû à la longue portée de l'interaction.

Selon (III.7), la dépendance de la section efficace différentielle en  $1/(\sin^4(\theta/2))$  indique quelles déviations de trajectoire les plus probables sont les petites déviations. De même, la dépendance en  $(1/E^2)$  montre que le nombre de diffusions élastiques augmente quand l'énergie diminue, la charge prise en compte est la charge totale du noyau. Cette équation ne tient donc pas compte de l'écrantage électronique du nuage d'électrons liés au noyau. Une adaptation de cette équation avec effet d'écrantage est donnée dans [18]. La section efficace différentielle élastique est ici exprimée en  $\text{cm}^2 \cdot \text{sr}^{-1}$ .

#### 1.6.4. Le libre parcours moyen

Eu égard à la diversité des interactions et des caractéristiques des particules, on pourrait penser à priori que la question traitée dans ce chapitre est complexe et requiert un exposé long. En réalité, un examen rapide des libres parcours moyens dans la matière caractérisant chaque type d'interaction, va permettre de simplifier grandement la suite.

La probabilité de diffusion élastique est généralement beaucoup plus grande que celle d'un événement inélastique. La probabilité qu'un électron est dispersé peut être décrite soit par la probabilité d'un événement de diffusion, tel que déterminé par l'interaction de section efficace, ou par la distance moyenne un électron se déplace entre deux interactions, La distance moyenne entre deux collisions élastiques est le libre parcours moyen élastique est défini par Bauer [19], tel que :

$$\lambda = \frac{1}{\sigma \cdot n} \quad (\text{III. 8})$$

Où  $\sigma$  est la section efficace du (ou des) processus considérés ;  $n$  est le nombre de centres diffuseurs (atomes, noyaux...) par unité de volume de matière. Exemple :  $n = \rho N/M$  représente le nombre d'atomes ou de noyaux par unité de volume pour un corps monoatomique ;  $N$  étant le nombre d'Avogadro et  $M$  la masse molaire.

## II. Transfert de la chaleur et les vibrations de réseau

En effet, la génération de chaleur est souvent une source indésirable d'énergie en industrie, notamment associée à l'effet Joule et a une diminution du rendement énergétique. Il reste cependant délicat de contrôler efficacement les transferts de chaleur notamment par conduction causé, par exemple (comme le problème traité dans ce travail) par une irradiation électronique (utilisé souvent en microscopie électroniques à balayage). La chaleur se propage dans l'ensemble des matériaux du système et nous ne pouvons tenter que de limiter sa progression dans certaines parties des matériaux. En effet, comme nous le verrons dans la section suivante, les phonons contribuent significativement à la capacité thermique. De plus, lorsque les dimensions sont petites, la conductivité thermique n'est plus une caractéristique intrinsèque du matériau mais dépend fortement de sa géométrie. En effet, les phonons subissent très peu de collisions dans ce régime et se propagent directement de la source chaude vers la source froide [20]. Plusieurs paramètres sont affectés par un changement de la température de semiconducteur: la densité, les coefficients de diffusion, les constantes de.

### II.1. Transfert de la chaleur dans les solides

La chaleur est l'énergie cinétique désordonnée totale (rotationnelle, translationnelle et vibratoire) associée à un groupe de particules (habituellement des atomes, des ions et des électrons) à l'intérieur du corps. Les porteurs de chaleur dans les solides sont de trois types : photons, phonons et électrons. Les photons transportent la chaleur dans les milieux semi-transparents, comme le verre, par rayonnement ; les électrons sont majoritairement responsables de la conduction dans les métaux et les phonons permettent d'expliquer la plupart des comportements thermiques des semi-conducteurs et isolants [22]. Considérons par exemple un système chauffé, la réaction directe du système est d'augmenter sa température de manière à ce que la chaleur soit ensuite évacuée. Au niveau microscopique, la température est une mesure de l'énergie cinétique, ou la vitesse moyenne de mouvement, d'une molécule. Dans le cas de deux substances ou corps à des températures différentes, la chaleur ira du plus chaud au plus froid jusqu'à ce que leurs températures soient identiques et l'équilibre thermique est atteint. Quand la chaleur va d'un objet chaud à un plus froid, la température

du premier diminue tandis que la température du dernier augmente. Quand l'équilibre thermique est atteint, la température des deux objets sera identique [21].

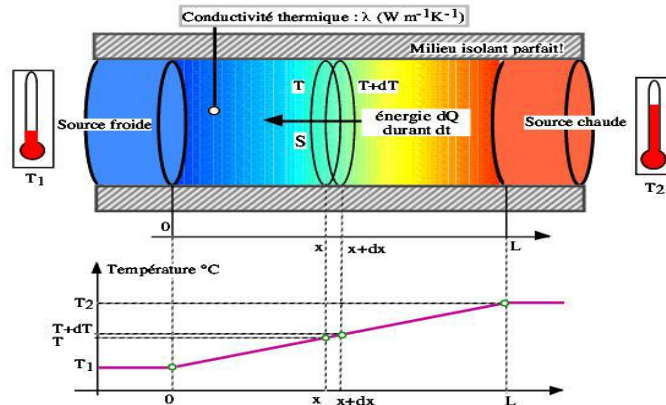


Figure (III.7) Principe de la conduction thermique [23].

Un transfert d'énergie par chaleur peut se manifester par :

- Une variation de température des systèmes concernés.
- Un changement d'état physique (liquide , solide et gaz).

Les différents modes de transfert de la chaleur sont : la conduction thermique, la convection thermique, et le rayonnement thermique .Dans la pratique, on a en général une combinaison de ces trois modes, mais lorsque l'un des modes est dominant, on néglige les deux autres.

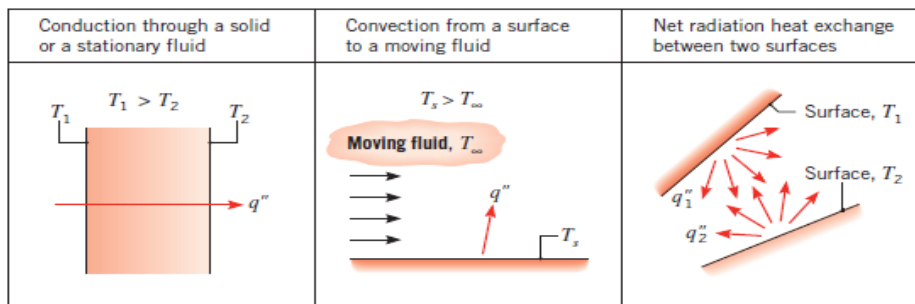


Figure (III.8) Les modes de transfert de chaleur par conduction, convection et rayonnement.

### II.1.1. Transfert de chaleur par convection

Ce mode de transfert a lieu dans les fluides. Des qu'un liquide ou un gaz s'échauffe, il se dilate, devient moins dense et, tout naturellement, se déplace en altitude vers les zones plus froides. La chaleur est ainsi transférée dans un autre par mouvement macroscopique de matière [21].

### II.1.2. Transfert de chaleur par rayonnement

Ce transfert a lieu par ondes électromagnétiques dans le domaine de l'infrarouge. On ressent cet apport de chaleur devant un radiateur électrique ou en été au soleil. Ce transfert d'énergie ne nécessite pas de support pour se propager (la chaleur solaire traverse le vide pour nous atteindre) [21].

### **II.1.3. Transfert par conduction**

L'étude de ce mode de transfert à l'échelle microscopique a permis de comprendre comment la chaleur se transmettait dans les milieux conducteurs comme les métaux. La conduction implique le transfert d'énergie thermique par une combinaison de diffusion des électrons et des vibrations de phonons (applicables aux matières solides). Ce mode de transfert thermique tend à uniformiser la répartition d'énergie cinétique des particules qui constituent le corps. L'énergie interne d'un corps solide, liquide ou gazeux correspond à l'énergie cinétique de ses éléments constituants qui sont en mouvement permanent (atomes, molécules, électrons libres) [21]. La conduction [24], représente le processus de propagation de la chaleur par contact direct entre les particules d'un corps ou entre des corps ayant des niveaux d'énergie (donc des températures) différents en raison du mouvement de ces particules élémentaires (les différentes parties ne sont pas isothermes). Quand il existe un gradient de température dans un corps, un transfert d'énergie de la région à plus haute température à la région ayant la plus basse température s'établit afin de réduire l'entropie du système [25].

### **II.2. Vibrations de réseau**

Le transport de chaleur dans les matériaux solides généralement est assuré par les vibrations élastiques du réseau cristallin dont l'amplitude augmente avec la température [26]. Le confinement modifie aussi la propagation de la chaleur. Les phonons sont des oscillations collectives des atomes dans un réseau cristallin et peuvent être engendrés par l'énergie du faisceau d'électrons. Si un électron incident frappe un atome et transfère une partie de son énergie à, cet atome se met à vibrer. Les vibrations du réseau peuvent jouer un rôle dans la réponse d'un solide en présence d'une radiation (X, visible, électrons, neutrons...). Étant donné que tous les atomes sont liés ensemble dans un cristal, la vibration d'un atome est ressentie par d'autres qui commencent également à vibrer. Par cela, l'énergie absorbée est répartie sur un grand volume. Les vibrations collectives sont équivalentes à l'échauffement de l'échantillon [13]. Une propriété clé de phonons est celle de la dualité onde-particule; les modes normaux ont des phénomènes comme les ondes dans la mécanique classique, mais gagnent le comportement des particules comme dans la mécanique quantique. La chaleur peut être considérée comme une mesure de l'énergie des vibrations des atomes dans un matériau. Dans les systèmes macroscopiques, les seuls modes de phonons sont des modes de propagation, parce que la

taille du système est très supérieure à celle de la longueur d'onde des porteurs d'énergie majoritaires. Lorsqu'une ou plusieurs des dimensions de l'objet devient proche des longueurs d'onde des phonons thermiques, les densités d'états et la vitesse de groupe des phonons peuvent être modifiées. Par ailleurs, la conductivité thermique de réseau dépend de la densité d'états des phonons et celle-ci décroît lorsque la dimensionnalité diminue [27], d'où une réduction supplémentaire du transfert thermique dans des nanostructures. L'étude des phonons est une partie importante dans la physique du solide, parce qu'ils contribuent à plusieurs des propriétés physiques des matériaux, tels que :

- la capacité calorifique, ou capacité à magasier la chaleur.
- la conductivité thermique, ou capacité à conduire la chaleur.
- la conductivité électrique, ou capacité à conduire le courant électrique.
- la capacité à propager le son.

De façon générale on peut dire que :

Les vibrations des ions sont essentielles dans la détermination des propriétés d'un solide qui ne sont pas dominées par la contribution des électrons (chaleur spécifique, dilatation thermique des solides, fusion).

### **II.2.1. Modèle classique de vibrations**

Etant donné que cet atome est relié aux autres par les forces électrostatiques qui agissent entre eux, les autres atomes du cristal se mettront eux aussi à vibrer, d'où le nom de vibration cristalline; Il y aura alors propagation d'une onde de déformation dans un solide. L'étude des différents modes de propagation de ces ondes est un sujet complexe qui fait partie de la "physique de l'état solide". L'origine de ces vibrations peut être thermique (l'effet de la température) ou encore sous forme d'excitation électromagnétique (rayonnement infrarouge par exemple). Sous l'effet de la température ou d'une excitation électromagnétique, ils oscillent par rapport à une position d'équilibre (stable). Si un noyau se déplace, il en résulte une modification du nuage électronique qui est due à un effet d'écran (force de rappel de la part des atomes voisins pour le ramener à cette position). Si les amplitudes d'oscillation sont faibles, on dit qu'elles sont harmoniques c'est-à-dire que les forces sont proportionnelles aux déplacements (loi de Hooke) [28].

Nous avons supposé que les atomes étaient au repos à leur position d'équilibre, cela ne peut pas être tout à fait correct; les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre. Ces forces interatomiques jouent les mêmes rôles que les ressorts dans un système "masse- ressort". Par conséquent, si on déplace légèrement un atome de sa position initiale et qu'on le relâche, il se mettra à osciller, comme un pendule. Nous étudierons les modes de vibration  $\omega(k)$  d'un cristal et l'énergie de ces modes. On parle d'onde polarisée longitudinalement lorsque le mouvement des atomes est parallèle à la

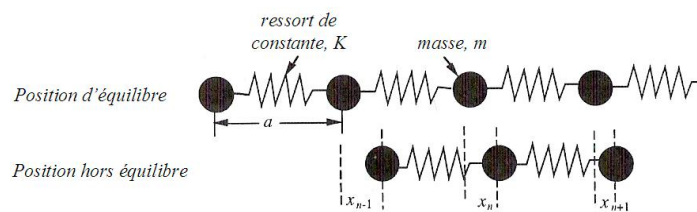
direction de propagation de l'onde. Mais lorsque les mouvements des atomes est perpendiculairement à la direction de propagation, l'onde est dite polarisée transversalement.

Cas d'un atome par maille élémentaire (Chaîne monoatomique).

- Le cristal le plus simple est une chaîne unidimensionnelle d'atomes identiques (un seul atome par la maille élémentaire).
- La chaîne se compose d'un très grand nombre d'atomes identiques de masses identiques  $m$ .
- Les atomes sont séparés par une distance "a" : distance inter-atomique entre les plus proches voisins.

**a) Chaîne linéaire monoatomique**

On considère donc une chaîne d'atomes avec, au repos, une distance entre atomes  $a$ . A l'équilibre, les positions des atomes sont donc données par  $na$  ( $n = 0, 1, \dots, N-1$ ). C'est la configuration qui minimise l'énergie potentielle totale des atomes. Lorsque la température  $T > 0$ , les atomes peuvent se déplacer, au prix d'une augmentation de leur énergie potentielle. On cherche à établir l'équation du mouvement des atomes. Considérons d'abord une paire d'atomes proches voisins. Nous appelons  $u_n$  et  $u_{n+1}$  les déplacements du  $n$ ème atome et de son voisin par rapport à leurs positions d'équilibre [28].



**Figure (III.9)** Modèle monodimensionnel du système masse-ressort [28].

La distance entre les deux est changée de  $(u_{n+1}-u_n)$ . En supposant que l'énergie potentielle a une forme de puits harmonique (ce qui est généralement le cas pour des déplacements très petits), on peut en déduire une force de rappel, On appliquant le principe fondamental de la dynamique sur l'atome n on aura:

$$F = m \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} \tag{III. 9a}$$

$$F = K(u_{n+1}-u_n) + K(u_{n-1}-u_n) = K(u_{n+1}-2u_n + u_{n-1}) \tag{III. 9b}$$

La constante de raideur  $K$ , qui est la dérivée seconde de l'énergie potentielle, a une valeur plus ou moins importante selon la composition chimique, la structure du composé, etc. L'équation de mouvement du  $n$ ème atome sera (en tenant compte des mouvements de ses deux voisins) :

$$m \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = K(u_{n+1}-2u_n + u_{n-1}) \tag{III. 10}$$

Ou  $m$  est la masse d'un atome. L'équation (III.10) est une version discrète de l'équation des ondes (équation de d'Alembert). Tous les atomes oscillent avec même amplitude et fréquence  $\omega$ . On peut donc écrire des solutions de la forme :

$$u_n = Ae^{i(kna - \omega t)} \quad (\text{III. 11})$$

Ou  $A$  est l'amplitude de l'onde,  $k$  le vecteur d'onde ( $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  ou  $\lambda$  est la longueur d'onde, et  $\omega_k$  est la pulsation de l'onde. Les valeurs de  $k$  permises sont déterminées à partir des conditions aux limites. Pour une chaîne de longueur  $L = Na$  répétée de façon périodique, on doit avoir  $u_{n+N} = u_n$ , ce qui donne :

$$k_n = \frac{2n\pi}{L}, n = 0, \pm 1, \dots, \quad (\text{III. 12})$$

Etant donné la périodicité de la solution 1&1, il y a exactement  $N$  solutions distinctes possibles, c'est-à-dire, autant de valeurs distinctes de  $k_n$  que d'atomes. Noter aussi que lorsque  $N$  tend vers  $\infty$ ,  $k$  devient une variable continue dans l'intervalle  $[-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}]$  (la première zone de Brillouin).

On peut déterminer la valeur de  $\omega_k$ :

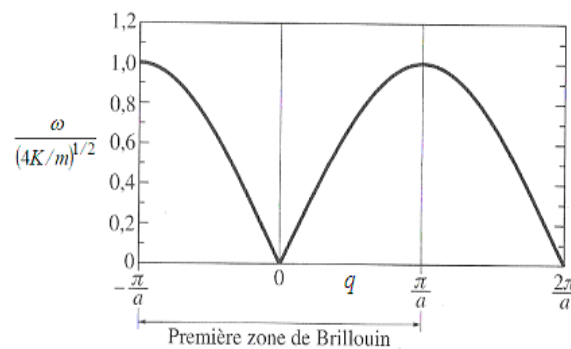
$$\omega = \sqrt{\frac{K(2 - 2 \cos(k_n a))}{m}} = 2 \left| \sin\left(\frac{1}{2} k_n a\right) \right| \sqrt{\frac{K}{m}} \quad (\text{III. 13a})$$

La valeur maximale est :

$$\left| \sin\left(\frac{1}{2} k_n a\right) \right| = 1 \quad (\text{III. 13b})$$

Et

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{m}} \quad (\text{III. 13c})$$



**Figure (III.10)** Courbe de dispersion du réseau linéaire avec un atome par maille élémentaire [28].

### a) Chaîne linéaire diatomique

Considérons une chaîne diatomique, de paramètre de réseau  $a$ , avec deux atomes de masses respectives  $M_1$  et  $M_2$  ( $M_1 > M_2$ ). On suppose que chaque atome interagit avec ses proches voisins avec la même constante de rappel  $K$ , on note  $u$  le déplacement de l'atome de masse  $M_1$  et  $v$  le déplacement de l'atome de masse  $M_2$ . On suppose qu'une onde élastique de vecteur d'onde  $k$  se propage dans la chaîne. Le paramètre de maille  $a$  de la chaîne passe ainsi à deux fois la distance entre voisins. Les équations de mouvement pour tous les atomes de la chaîne [28]:

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = K(V_s(t) + V_{s-1}(t) - 2u_s(t)) \quad (\text{III. 14a})$$

$$M_2 \frac{d^2 V_s}{dt^2} = K(u_{s+1}(t) + u_s(t) - 2V_s(t)) \quad (\text{III. 14b})$$

Les solutions sont de types :

$$u_s(t) = u \cdot e^{i(ksa - \omega t)} \quad \text{et} \quad V_s(t) = V \cdot e^{i(ksa - \omega t)} \quad (\text{III. 14c})$$

$$-\omega^2 M_1 u = K \cdot V (1 + e^{-ika}) - 2K \cdot u \quad (\text{III. 14d})$$

$$-\omega^2 M_2 u = K \cdot u (1 + e^{ika}) - 2K \cdot V \quad (\text{III. 14e})$$

$$\Rightarrow \omega^4 M_1 M_2 - 2K(M_1 + M_2)\omega^2 = -2K^2(1 - \cos ka) \quad (\text{III. 14f})$$

Comme il existe deux valeurs de  $\omega(k)$  pour chaque valeur de  $k$ , la relation de dispersion est dite à deux branches distinctes avec une bande interdite en fréquence. La relation de dispersion  $\omega(k)$  donne deux branches. L'une se nomme "branche optique" et l'autre se nomme "branche acoustique". Le nombre de ces branches va dépendre du nombre d'atomes présents dans la maille élémentaire. Si la maille contient  $N$  atomes, alors le nombre de branches sera  $3N$ , avec 3 branches acoustiques et  $3N-3$  branches optiques.

➤ L'expression  $\omega^2$  avec le signe (-) traduit la relation de dispersion pour la branche acoustique.

Au voisinage de 0, la vitesse de groupe est constante et égale à la vitesse du son.

➤ L'expression de  $\omega^2$  avec le signe (+) traduit la relation de dispersion pour la branche optique.

$$\omega_+^2 = 2K \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{III. 14g})$$

$$\omega_-^2 = \frac{K}{2} \left( \frac{a^2 q^2}{M_1 + M_2} \right) \quad (\text{III. 14h})$$

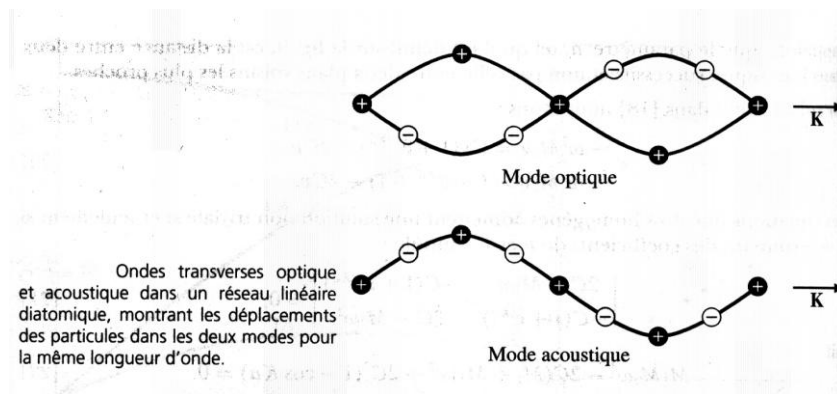


Figure (III.11) Branches optique et acoustique pour une chaîne linéaire diatomique [29].

### b) Vibrations collectives et modes normaux

Les vibrations des divers atomes d'un cristal sont évidemment couplées : lorsque l'un des atomes s'écarte de sa position d'équilibre, il exerce des forces sur ses voisins, repoussant ceux dont il s'approche et attirant ceux dont il s'éloigne ; ceux-ci agissent à leur tour sur leurs proches voisins, et ainsi de suite de proche en proche. Les vibrations du cristal sont donc collectives : elles intéressent non pas chaque atome indépendamment des autres, mais l'ensemble des atomes constituant le réseau. En outre, elles se propagent sous forme d'ondes, puisque chaque atome transmet le mouvement à ses voisins [28].

#### II.2.2. Chaleur spécifique des solides

La notion de température est d'abord une notion subjective. Par le sens du toucher, nous constatons que certains corps sont plus ou moins chauds, c'est-à-dire que leur température est plus ou moins élevée. Historiquement, ce n'est qu'au XIXe siècle que les notions de température et de chaleur ont été progressivement expliquées de manière satisfaisante au niveau microscopique<sup>1</sup>. En fait, la chaleur d'un corps matériel s'interprète comme étant la somme des énergies d'agitation désordonnée des molécules (ou atomes) qui le composent. La température, elle, mesure le niveau d'agitation : plus l'agitation moléculaire croît, plus la température est élevée [30]. *La température d'un objet n'est pas équivalente à son énergie! La chaleur est l'autre nom de l'énergie thermique.*

##### II.2.2.1. Quantification de l'énergie

Pour calculer l'énergie associée aux modes de vibration il faut faire le traitement quantique du réseau d'oscillateurs harmoniques couplés que constitue le réseau cristallin. L'énergie de chaque mode de vibration est donc quantifiée ; le quantum d'énergie  $\hbar\omega$  qui sépare deux niveaux consécutifs est appelé phonon par analogie avec le photon qui désigne le quantum d'énergie lumineuse. Les

phonons sont des particules (bosons) indiscernables auxquelles il faut appliquer une statistique quantique (la statistique de Bose-Einstein). La fonction d'occupation du niveau  $\hbar\omega$  est donc [28]:

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (\text{III. 15})$$

### II.2.2.2. Conservation de l'énergie

L'énergie thermique est l'énergie à l'échelle atomique ou moléculaire. Cette énergie peut être une énergie cinétique ou énergie potentielle. Parce qu'il ya des forces entre les atomes et les molécules dans une substance, le mouvement contre ces forces peut stocker de l'énergie sous forme d'énergie potentielle. La connaissance de la température implique la connaissance de l'énergie contenue dans le volume de cristal. Réciproquement, la connaissance de l'énergie permet d'accéder à la température. Ainsi l'énergie reçue par le corps se retrouve dans l'énergie cinétique de déplacement d'électrons et dans l'énergie d'oscillation des ions placés aux nœuds du réseau. Le premier principe de la thermodynamique est donc essentiellement l'expression du principe de la conservation d'énergie. Comme tel, il peut être exprimé en posant que la variation de l'énergie interne d'un système au cours d'une transformation quelconque, est égale à la quantité d'énergie que le système a reçu de l'extérieur sous forme de chaleur  $\delta Q$  ou de travail  $\delta W$ . Conformément au premier principe de la thermodynamique nous avons [21]:

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (\text{III. 16a})$$

Si les objets sont indéformables donc on a :

$$\delta W = 0 \quad (\text{III. 16b})$$

Et le système isolé donc :

$$dU = 0 \quad (\text{III. 16c})$$

La chaleur absorbée par un corps, qu'il soit solide, liquide ou gaz, verra sa température augmenter. Cette énergie d'origine microscopique, que l'on appelle énergie interne  $U$ , s'ajoutera à son énergie cinétique ou (et) potentielle d'origine macroscopique. L'énergie totale d'un système est donc la somme de ses énergies microscopique et macroscopique :

$$E = U + E_C + E_P \quad (\text{III. 16d})$$

On constate que certains corps absorbent plus la chaleur que d'autres. On caractérise cette aptitude à emmagasiner l'énergie calorifique par la capacité thermique de ce corps, notée  $C$ . Pour une variation de température  $\Delta T$ , l'énergie interne d'un corps de capacité thermique  $C$  augmentera de  $\Delta U$  selon la relation :

$$\Delta U = C \Delta T \quad (\text{III. 16e})$$

### II.2.2.3. La capacité de la chaleur

La capacité thermique est une propriété qui est indicatif de la capacité d'un matériau à absorber de la chaleur à partir de l'environnement extérieur; elle représente la quantité d'énergie nécessaire pour provoquer l'élévation de température locale. Lorsqu'un solide absorbe une quantité de chaleur  $\Delta Q$ , par exemple a volume constant, l'élévation de temperature associée à  $\Delta Q$  dépend d'une grandeur thermodynamique  $C_v$  appelée capacité thermique. La chaleur s'écoule sous l'influence d'un gradient (hausse ou baisse) de température par conduction des hautes vers les basses températures. La quantité de chaleur d'un corps dégagée ou absorbée lors d'une variation de température  $\Delta T$  est reliée à la chaleur spécifique  $c$  par [21]:

$$\Delta Q = m c \Delta T \quad (\text{III. 17})$$

Où  $m$  est la masse du corps et  $c$  la capacité thermique.

Il ya vraiment deux façons dont cette propriété peut être mesurée, selon les conditions environnementales qui accompagnent le transfert de la chaleur. La première est la capacité de chaleur tout en maintenant le volume de l'échantillon constant, l'autre est pour la pression externe constante, qui est désignée  $C_p$ . Il existe également d'autres mécanismes d'absorption d'énergie qui peut ajouter à la capacité totale de la chaleur d'un solide. Dans la plupart des cas, cependant, ceux-ci sont mineures par rapport à l'amplitude de la contribution de vibration. Il est une contribution électronique, ou les électrons absorbent l'énergie en augmentant leur énergie cinétique. D'après la théorie cinétique de la chaleur: La chaleur est l'énergie cinétique du mouvement des atomes dans la matière. La variation totale de l'énergie interne et de l'enthalpie :

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV \quad (\text{III. 18a})$$

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T dP \quad (\text{III. 18b})$$

On distingue en général la capacité calorifique à volume constant  $C_v$  et la capacité calorifique à pression constante  $C_p$  :

- La capacité thermique à volume constant d'un corps est la grandeur définie à partir de son énergie interne  $U$ , i.e. son énergie totale lorsque le corps est macroscopiquement au repos et soumis à aucune action extérieure :

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \quad (\text{III. 19a})$$

- La capacité thermique à pression constante va se définir à l'identique et :

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P \quad (\text{III. 19b})$$

La thermodynamique classique, qui permet de traiter des matériaux massifs à la température ambiante, n'est pas capable de décrire le comportement de phonons [29] à l'échelle nanométrique. Dans un modèle classique la chaleur spécifique d'un solide est une constante, l'expérience montre cependant qu'elle décroît à basse température. Ce comportement ne peut être compris que si l'on introduit la quantification des vibrations se propageant dans un solide. Ce problème est très proche de celui de la quantification des niveaux d'énergie et des amplitudes de vibration d'un oscillateur harmonique. La mécanique statistique classique permet d'expliquer la loi que Dulong et Petit ont décrite empiriquement, à partir du théorème d'équipartition de l'énergie. Mais la décroissance de la chaleur spécifique vers les basses températures est un phénomène d'origine quantique. C'est ce qu'a montré Einstein, dans le cadre d'un modèle très simple, dès 1907, alors que les idées quantiques en étaient à leurs tout premiers développements. Il faut cependant une théorie plus précise, développée par Debye en 1912, pour prédire correctement le comportement à basse température de la chaleur spécifique des solides.

A  $T > 0$ , le mouvement des atomes est le résultant des différents modes de vibration qui sont excités, correspondant à des longueurs d'onde et fréquences différentes, Dans la théorie harmonique, valable à basse température, ces ondes se propagent indépendamment les unes des autres. La chaleur se transmet de proche en proche dans la direction du gradient de température par propagation des vibrations du réseau [31]. On peut associer cette propagation à un transfert de phonons par paquets d'énergie se déplaçant à travers le matériau. Chaque atome du réseau cristallin est un oscillateur harmonique dont les vibrations peuvent être décrites comme celles d'une onde plane progressive transportant de l'énergie.

#### *a) Le modèle de Dulong et Petit*

Dulong et Petit ont considéré chaque atome comme un oscillateur isolé auquel on appliquait le principe de l'équipartition de l'énergie. Un solide est composé d'atomes arrangés en un réseau cristallin. La chaleur  $Q$  emmagasinée dans un réseau cristallin correspond à l'énergie d'agitation des atomes du réseau autour de leur position d'équilibre. L'énergie d'un atome comprend six termes (3 de translation, 3 de rotation). Pour chaque atome, à chaque degré de liberté correspond  $(k_B T)/2$  joules (ou  $k_B$  est la constante de Boltzmann ; donc, l'énergie interne d'un solide contenant  $N$  atomes s'écrit [28]:

$$U = 6N \left( \frac{k_B T}{2} \right) = 3Nk_B T \quad (\text{III. 20a})$$

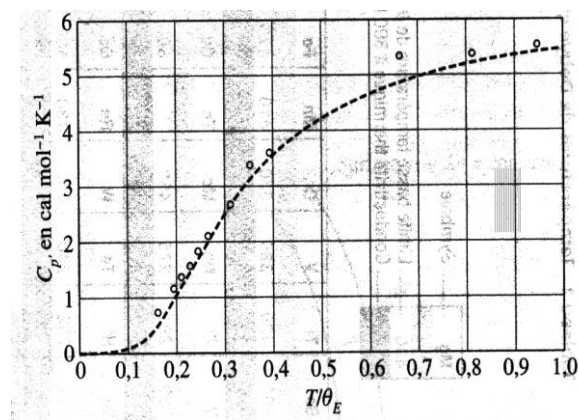
D'où la chaleur spécifique :

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \quad (\text{III. 20b})$$

Cette loi, d'origine empirique, est assez vérifiée à la température ordinaire, mais elle est complètement fautive à très basse température ; c'est ce qui a amené Einstein en 1907 à corriger ce modèle classique.

**b) Le modèle d'Einstein**

En 1907, Einstein a proposé un modèle du solide capable d'expliquer le comportement de la capacité calorifique aux basses températures où les données expérimentales montraient un désaccord important avec la loi empirique de Dulong et Petit. Dans le modèle d'Einstein le solide est considéré comme une collection d'oscillateurs indépendants (ce qui revient à négliger les interactions entre particules !) ayant tous la même pulsation naturelle et dont l'énergie est quantifiée. Dans un solide, les interactions entre particules ne sont jamais négligeables. Le principal intérêt du modèle d'Einstein réside dans sa très grande simplicité mais, de façon plus précise, la possibilité de ramener l'étude d'un solide à celle d'un système de particules indépendantes découle de ce que l'on nomme approximation de champ moyen [28].



**Figure (III.12)** Vibrations de réseau : capacité thermique [29].

L'hypothèse de départ est la suivante : les mouvements de chacun des atomes d'un solide sont complètement indépendants de ceux de ses voisins et les mouvements selon  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont indépendants les uns des autres. Chaque atome se comporte comme un oscillateur harmonique à trois dimensions. Le solide est ainsi constitué de  $N$  oscillateurs à une dimension (ou de  $N/3$  atomes), que l'on suppose être tous identiques. Comme l'atome s'en écarte peu, on peut développer le potentiel moyen  $U(x)$  au voisinage de  $x = 0$ , ce point correspondant à un minimum du champ moyen, de sorte que :

$$U(x) = U(x) + U'(0).x + U''(0).\frac{x^2}{2} + U'''(0).\frac{x^3}{6} + \dots \quad (\text{III. 21a})$$

Dans l'approximation de l'oscillateur harmonique, on ne conserve que le premier terme non nul:

$$U(x) \approx \frac{m\omega^2}{2}x^2 \text{ avec } \omega = \sqrt{\frac{U''(0)}{m}} \quad (\text{III. 21b})$$

A cette approximation, chaque atome ou ion du réseau constitue un oscillateur harmonique à trois dimensions, puisque son énergie s'écrit,  $m$  étant sa masse.

$$E = \frac{p^2}{2m} - u_0 + \frac{K}{2}r^2 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - u_0 + \frac{K}{2}(x^2 + y^2 + z^2) \quad (\text{III. 22})$$

En conséquence, ils vibrent tous à la même fréquence indépendamment les uns des autres. Cette fréquence sera notée  $\omega_E$  :

$$\omega_E = \sqrt{\frac{K}{m}} \quad (\text{III. 23a})$$

La loi de variation de  $\omega_E$  en fonction de  $V$  sera supposée telle que :

$$\frac{d\omega_E}{\omega_E} = -\frac{dV}{3V} \quad (\text{III. 23b})$$

Considérons à une dimension  $N$  oscillateurs de même fréquence  $\omega_0$ . La densité d'états d'Einstein est :

$$D(\omega) = N \langle n \rangle \hbar\omega = \frac{N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (\text{III. 24})$$

La capacité calorifique de ces oscillateurs est :

$$U = 3Nn(\omega)\hbar\omega = \frac{3N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (\text{III. 25})$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} \quad (\text{III. 26a})$$

A basse température, la capacité thermique s'écrit :

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}} \quad (\text{III. 26b})$$

L'importance du modèle d'Einstein est considérable du point de vue historique : il a montré que la décroissance de la chaleur spécifique des solides vers les basses températures, inexplicable dans le cadre des considérations classiques, est un phénomène d'origine quantique. En outre, la courbe représentant  $C_V$  en fonction de la température est semblable à celle de la figure donnée à titre d'exemple (pour l'argent), qui donne l'allure des résultats expérimentaux : en ajustant pour chaque

corps la température d'Einstein  $T_E$ , on reproduit approximativement la variation de sa chaleur spécifique avec la température.

*c) Le modèle de Debye*

En 1912, Debye a proposé une amélioration du modèle d'Einstein qui tient compte du fait que les atomes ne sont pas indépendants car chacun est influencé par le mouvement des autres. En revanche, les modes normaux sont indépendants à l'approximation harmonique. Dans le modèle de Debye on considère le solide comme une collection d'oscillateurs indépendants dont les pulsations caractéristiques sont celles des modes normaux. Le nombre d'oscillateurs étant très grand ces pulsations sont très nombreuses et remplissent pratiquement un continuum. Pour prendre en compte le couplage, Debye a proposé en 1921 de modéliser le cristal par  $N$  atomes reliés à leurs plus proches voisins par des ressorts identiques de raideur  $k$  et de longueur au repos,  $a$  est la distance interatomique. Pour calculer la chaleur spécifique à volume constant  $c_v$  on cherche tout d'abord la densité de modes  $D(\omega)$  qui correspond au nombre de modes (d'états) qu'il y a entre  $\omega$  et  $\omega+d\omega$ . Dit autrement, il s'agit de compter le nombre de valeurs de  $\kappa$  différentes que l'on a pour des valeurs de  $\omega$  comprises entre  $\omega$  et  $\omega+d\omega$ . Dans ce modèle, la relation de dispersion  $\omega(k)$  est supposée linéaire  $\omega = vk$ , où  $v$  correspond à la vitesse du son dans le cristal, dans l'approximation classique des milieux continus. La relation donnant la densité de modes (1&.7) devient alors [28]:

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} k^2 = \left(\frac{V}{2\pi^2 v^3}\right) \omega^2 \quad (\text{III. 27})$$

Ensuite on cherche l'énergie thermique  $U$  du système définit par :

$$U = \int \hbar\omega f(\omega)D(\omega)d\omega \quad (\text{III. 28})$$

Et

$$n = \frac{k_D^3}{6\pi^2} \quad (\text{III. 29})$$

Pour évaluer l'intégrale (III28), il est pratique de définir une fréquence de Debye par :

$$\omega_D = k_D \cdot c \quad (\text{III. 30})$$

Et une température de Debye par :

$$\theta_D = \frac{\omega_D \cdot \hbar}{k_B} = \frac{v \cdot \hbar}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{III. 31})$$

Où  $k_D$  est une mesure de l'inverse de la distance entre particules,  $\omega_D$  une mesure du maximum de la fréquence des phonons, et  $\theta_D$  une mesure de la température au-dessus de laquelle tous les modes commencent à être excités, et au-dessous de laquelle certains modes commencent à geler. En

supposant que la vitesse des phonons est indépendante de la polarisation, et tenant compte des 3 types de polarisation (2 transversales et 1 longitudinale) on obtient :

$$U = 3 \int \hbar\omega f(\omega)D(\omega)d\omega = 3 \int_0^{\omega_D} \left(\frac{V}{2\pi^2v^3}\right) \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (\text{III. 32a})$$

$$= 3\hbar \left(\frac{V}{2\pi^2v^3}\right) \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (\text{III. 32b})$$

On pose :

$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \quad \text{et} \quad x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} = \frac{\theta_D}{T} \quad (\text{III. 32c})$$

$$U = \left(\frac{3\hbar V}{2\pi^2v^3}\right) \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega = \left(\frac{3k_B^2 T^4}{2\hbar^2 \pi^2 v^3}\right) \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (\text{III. 32d})$$

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (\text{III. 32e})$$

La capacité calorifique en est tirée en dérivant  $U$  par rapport à  $T$  :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (\text{III. 32f})$$

L'approximation de Debye donne des résultats en bon accord avec les données expérimentales.

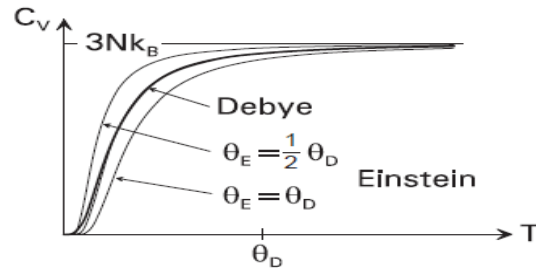


Figure (III.13) Vibrations de réseau : capacité thermique.

#### II.2.2.4. Contribution des phonons à la chaleur spécifique et la conductivité thermique

Avec la miniaturisation des composants, et à l'échelle du nanomètre, l'élasticité, l'extensibilité, la température de Debye, et la capacité thermique spécifique du solide ne sont plus constante, elles se changent avec la variation de la taille [32]. Pour des échantillons nanométriques, lorsque les dimensions caractéristiques avoisinent ou deviennent inférieurs à longueur de d'onde dominante des phonons, de profondes perturbations du transport d'énergie apparaissent par rapport au model standard adapté a l'échelle macroscopique [33].

Dans la théorie des vibrations du réseau, l'expression de l'énergie potentielle a été limitée aux termes quadratiques par rapport au déplacement relatif des atomes. Ceci constitue la théorie harmonique, dont les principales conséquences sont les suivantes [29] :

- il n'y a pas de dilatation thermique.
- les constantes d'élasticité adiabatiques et isothermes sont égales.
- les constantes élastiques sont indépendantes de la pression et de la température.
- la capacité calorifique devient constante aux températures élevées.
- deux ondes élastiques n'interagissent pas ; une onde unique ne s'amortit pas et ne change pas de forme au cours du temps.

Mais, nous avons mentionné le fait que, lorsque la température augmente, l'amplitude des vibrations augmente. A partir d'une certaine température, l'approximation harmonique ne sera plus bonne, et les forces de rappel seront, en général, non-linéaires en fonction des déplacements. Il faut alors prendre en compte des interactions anharmoniques entre atomes. Lorsque ces interactions sont petites, on peut considérer que les modes restent proches des phonons que nous avons déjà décrits. Cependant, les phonons ne sont plus indépendants les uns des autres, et il y a des collisions entre phonons (interactions phonon-phonon), qui ont pour effet de détruire le phonon au bout d'un temps  $\tau$  caractéristique [34].

#### *a) Contribution à la chaleur spécifique*

Un matériau gagne ou perd de la chaleur en gagnant ou perdant des phonons. L'énergie ou le nombre de phonon requis pour augmenter la température du matériau de 1 degré est exprimé par la capacité thermique ou la chaleur spécifique. Ces dernières sont moins influencées par les défauts du matériau (densité de dislocation, taille des grains ou proportion de lacunes) mais dépendent fortement de la vibration interatomique. La capacité calorifique volumique étant la dérivée de l'énergie thermique volumique par la température, d'après la relation (III.33d) de modèle de Debye on a la capacité des phonons :

$$C_{\text{ph}} = \left( \frac{3k_B^2 T^3}{2\hbar^2 \pi^2 v^3} \right) \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x x^3}{(e^x - 1)^2} dx \quad (\text{III. 33})$$

Cette loi en  $T^3$  pour la chaleur spécifique à basse température peut cependant ne plus s'appliquer pour des échantillons de basse dimensionnalité, lorsque la longueur d'onde démontante des phonons devient du même ordre de grandeur qu'une dimension caractéristique de l'objet [35].

#### *b) Contribution à La conductivité thermique*

La conductivité thermique est une mesure de la capacité qu'a un matériau à conduire la chaleur lorsqu'il est soumis à une différence de température. Une conductivité nulle correspond à un matériau qui ne conduit pas du tout la chaleur. Dans les solides, la conductivité thermique des solides

est due tant aux électrons et aux phonons (par analogie avec les photons correspondant aux ondes élastiques de vibration des ions). Les matériaux à faible conductivité thermique sont appelés isolants (thermique).

$$k_{\text{ph}} = \frac{1}{3} C_{\text{ph}} v_{\text{ph}} \Lambda \quad (\text{III. 34})$$

Où  $C_{\text{ph}}$  est la chaleur spécifique,  $\Lambda$  désigne le libre parcours moyen élastique et  $v_{\text{ph}}$  la vitesse des phonons.

Ce le libre parcours moyen dans les structures nanométriques va dépendre des dimensions de l'échantillon, et av donc influer sur la conductance thermique. Aux échelles nanométriques, le transport des phonons va dépendre de la géométrie des échantillons et rendre caduque cette notion de conductivité thermique intrinsèque u matériau, il sera préférable de parler de conductance [33].

### III. La méthode de Monte Carlo

La nature de ce processus est utile lorsqu'on étudie les systèmes qui ont un grand nombre de variables, en particulier les systèmes complexes impliquant des variables interdépendantes qui sont très difficiles à résoudre analytiquement.

Les méthodes numériques, basés sur la technique de Monte Carlo (MC) pour la modélisation statistique [36] des trajectoires des électrons et le calcul de la perte d'énergie, ont été largement développés et ont devenu les méthodes les plus reconnus dans ce domaine. La simulation de ce processus est un outil clé pour l'optimisation des résultats de l'interaction electron-matière obtenus. L'objectif de la simulation par ordinateur des processus de l'interaction electron-matière est la prédiction de profil de la profondeur de pénétration. La précision des profils de la profondeur de pénétration dépendent fortement de la connaissance des processus physiques ainsi que de la précision des paramètres du procédé. Pour réaliser un modèle informatique qui puisse simuler le processus de l'interaction electron-matière c'est-à-dire de simuler les trajectoires des électrons dans la matière, il est nécessaire de bien connaître les phénomènes physiques mis en jeu. Certains électrons sont diffusés de manière élastique, c'est-à-dire en conservant leur énergie cinétique ; se sont les électrons dits "rétrodiffusés" (back-scattered electrons). Au cours du choc, certains électrons primaires cèdent une partie de leur énergie cinétique aux atomes, provoquant l'ionisation de l'atome par éjection d'un électron dit "secondaire". L'énergie des électrons secondaires étant faible (typiquement quelques dizaines d'eV), seuls les électrons venant des couches superficielles ressortent de la matière. L'atome ainsi ionisé se désexcite ; un électron d'une couche supérieure descend occuper la place laissée vide, ce qui provoque soit l'émission d'un photon X (émission secondaire), soit d'un électron Auger. Les

interactions electron-matière sont liées au transfert d'énergie de la particule vers les atomes de la matière[35] :

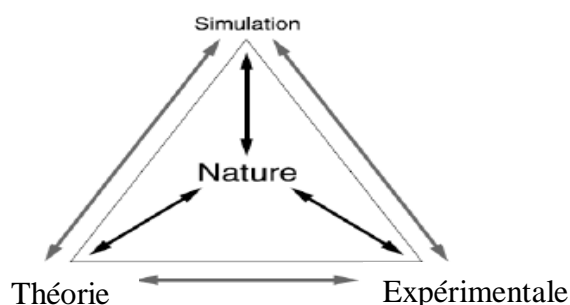
- pour une particule massive, par la perte d'énergie cinétique et éventuellement l'absorption ou l'annihilation.
- Pour les photons, par la diffusion ou l'absorption.
- Pour la matière, par l'absorption d'énergie qui conduit à l'excitation ou l'ionisation des atomes.

Les méthodes de Monte Carlo ont été utilisées pour modéliser ces interactions depuis les ordinateurs personnels sont devenus disponibles pour le grand public. Les lois régissant les interactions élémentaires des électrons et des photons avec la matière sont bien connues. Cependant il est difficile d'évaluer les résultats d'un grand nombre d'interactions successives. Généralement Il existe 2 catégories de méthode :

Les méthodes déterministes et les méthodes Statistiques. Les trajectoires des particules sont simulées individuellement à partir d'une série de nombre aléatoire et de sections efficaces.

Pour simuler les interactions électrons-matière, il est nécessaire de posséder un modèle de diffusion constitué principalement d'un ensemble de sections efficaces différentielles qui déterminent les distributions de probabilité des variables aléatoires représentant une trajectoire (§paragraphe : la section efficace de l'interaction et le libre parcours moyen) [35].

Une des premières analyses des interactions electron-matière utilisant la méthode de Monte Carlo a été par M. Green à [37]. Depuis lors, les algorithmes ont été constamment améliorés par plusieurs auteurs [38,39,40,41,42,43]. La méthode de Monte Carlo permet de simuler tout phénomène pouvant être modélisé par des probabilités d'événements. Cette méthode consiste à déterminer la probabilité d'un événement à l'aide de nombres aléatoires.



**Figure (III.14)** Vue schématique de la relation entre la théorie, l'expérience et la simulation par l'ordinateur [44].

Aujourd'hui, Dans le monde et avec la grande prévalence (!!!) de nouveaux langages et outils de programmation, la croissance rapide de la puissance de calcul et la disponibilité du matériel de plus

en plus avancé et puissant, le besoin aux solutions de calcul complexe tels que la simulation Monte Carlo est en croissance de façon exponentielle. L'utilisation de la méthode Monte Carlo, simulations et applications, se trouve dans des domaines d'application très vaste tels que la physique nucléaire, la fiabilité, des réseaux, de la finance, ingénierie, économie, analyse des risques, l'étude du transfert de chaleur, analyse dynamique moléculaire, sciences de l'environnement, la chimie, les télécommunications, l'ingénierie, des jeux et ainsi de suite.

### III.1. Génération de nombre aléatoire

Pour effectuer les simulations, il faut générer des nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1. Un générateur de nombres aléatoires est un dispositif capable de produire une séquence de nombres dont on ne peut pas «facilement» tirer des propriétés déterministes, de façon à ce que cette séquence puisse être appelée: suite de nombres aléatoires [44].

#### III.1.1. Générateurs pseudo-aléatoires

$$X_{i+1} = (aX_i + c) \bmod m \quad (\text{III. 35})$$

La plupart des algorithmes pseudo-aléatoires essaient de produire des sorties qui sont uniformément distribuées. Une classe très répandue de générateurs utilise une congruence linéaire. D'autres s'inspirent de la suite de Fibonacci en additionnant deux valeurs précédentes ou font appel à des registres à décalage dans lesquels le résultat précédent est injecté après une transformation intermédiaire. Certains générateurs pseudo-aléatoires sont dits *cryptographiques* quand certaines contraintes sont satisfaites. Citons entre autres Fortuna, Yarrow ou Blum et Blum Shub [36,44]. La plupart des méthodes Monte Carlo utilisent des générateurs de nombre pseudo aléatoires. La séquence des nombres aléatoires générée est toujours la même si le 1<sup>er</sup> nombre aléatoire est imposé.

### III.2. La marche aléatoire

Plusieurs processus physiques tel que le mouvement Brownien, le transport des électrons à travers un solide, et les erreurs de calcul dans un ordinateur sont modélisées comme une marche aléatoire. Plusieurs processus physiques tel que le mouvement Brownien, le transport des électrons à travers un solide, et les erreurs de calcul dans un ordinateur sont modélisés comme une marche aléatoire. Dans ce modèle, plusieurs marches sont prises avec l'indépendance de la direction de chaque marche avec celle qui précède. On part de l'origine et on prend des marches de longueur (non coordonnées) dans les directions x et y comme suit [44]:

$$(\Delta x_1, \Delta y_1), (\Delta x_2, \Delta y_2), \dots, (\Delta x_N, \Delta y_N) \quad (\text{III. 36a})$$

Où il y a un total de N marches. La distance du point de départ R est reliée à ces marches par :

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \dots + \Delta y_N)^2 \quad (\text{III. 36b})$$

Maintenant tandis que cette dernière relation est tout à fait générale pour n'importe quelle marche prise, si elle est marche aléatoire lors c'est équivalent à un déplacement en avant ou en arrière, ou bien à droite ou à gauche. Ainsi pour la moyenne, pour un grand nombre de marches, la majorité des termes mixtes dans l'équation vont s'annulés et on a :

$$R^2 \approx (\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2 + \dots + (\Delta x_N)^2 + (\Delta y_1)^2 + (\Delta y_2)^2 + \dots + (\Delta y_N)^2 \quad (\text{III. 36c})$$

$$R^2 \approx \sqrt{N} \langle v^2 \rangle \quad (\text{III. 36d})$$

$$R^2 \approx \sqrt{N} r_{rmc} \quad (\text{III. 36e})$$

Où  $r_{rmc}$  est la racine carrée de la moyenne carrée de la grandeur de marche ou, la racine moyenne carrée de la grandeur de marche.

Noté, qu'on obtient les mêmes résultats pour des marches à trois dimensions. D'après la relation bien que la distance totale marchée soit  $N_{rmc}$  dans la moyenne, la distance de départ est seulement  $\sqrt{N} r_{rmc}$ .

### III.3. Exemple d'application de la méthode de monte Carlo

Soit  $M(x,y)$  avec  $0 < x < 1$  et  $0 < y < 1$ . On tire aléatoirement les valeurs de  $x$  et  $y$ .  $M$  appartient au disque de centre  $(0,0)$  de rayon 1 si :

$$x_i^2 + y_i^2 \leq 1 \quad (\text{III. 37a})$$

La probabilité que  $M$  appartienne au disque est :

En faisant le rapport du nombre de points dans le disque au nombre de tirages, on obtient une approximation du nombre si le nombre de tirage est grand.

#### *Calcul de la valeur de nombre $\pi$*

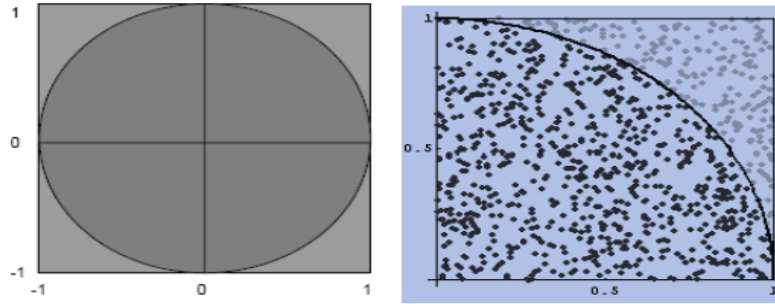
Nous considérons un rectangle (ou un carrée) qu'englobe un cercle. Soit un rectangle.

La surface de cercle =  $\pi(1)^2 = \pi$  et la surface of the square =  $2 \times 2 = 4$ . On a la valeur approximative de  $\pi$  est :

$$\pi = 4 \frac{(\text{la surace de cercle})}{(\text{la surace de carré})} = \frac{\pi \cdot (1)^2}{2 \cdot 2} = \frac{\pi}{4} \quad (\text{III. 37b})$$

Une simulation Monte Carlo simple pour approximer la valeur de  $\pi$  implique la sélection aléatoire de  $n$  points  $(x_i, y_i)$  à la place de l'unité de (carrée) et la détermination du rapport  $\rho = m / n$ , où  $m$  est le nombre de points satisfait :

$$x_i^2 + y_i^2 \leq 1 \quad \dots \quad (\text{III. 37c})$$



**Figure (III.15)** simulation Monte Carlo simple pour approximer la valeur de  $\pi$ .

Dans une simulation typique de taille de l'échantillon  $n = 1000$  il y avait 787 points satisfaisant :

$$x_i^2 + y_i^2 \leq 1 \quad (\text{III.37d})$$

Montré dans la figure (III.15) et grâce à ces données, on peut obtenir :

$$\rho = 4 \frac{787}{1000} = 0.787 \text{ donc } \pi = 4 \cdot (0.787) = 3.148 \quad (\text{III.37e})$$

#### IV. La méthode de Monte Carlo pour l'interaction electron-matière

Plusieurs modèles de simulation Monte Carlo sont alors proposées et utilisés pour simuler l'interaction electron-matière, basées sur différentes approches de traitement des diffusions (élastiques et inélastiques) des électrons. La dissipation d'énergie d'un faisceau d'électrons dans un échantillon est le premier paramètre responsable de la génération des signaux utilisés pour la caractérisation de l'échantillon étudié. Les descriptions semi-empiriques du profil de dissipation d'énergie communément utilisées, mais il y a des limitations dans le cas de conditions expérimentales particulières telles que les échantillons multicouches ou une variation de l'angle d'incidence du faisceau rendent nécessaires l'évaluation des paramètres d'interaction faisceau-matière par des méthodes telles que la simulation Monte-Carlo [45]. En utilisant un modèle de simulation basé sur la méthode de Monte Carlo et la dynamique moléculaire [11], nous simulons des interactions d'électrons avec des nanostructures de GaN, et calculer l'élévation de la température locale des systèmes irradiés.

##### IV.1. La profondeur de pénétration, volume de génération et distribution de charges générées

###### IV.1.1. La profondeur de pénétration

Par définition la trajectoire d'un électron dans un milieu donné peut être très sinueuse, puisque les électrons peuvent subir des déviations de  $180^\circ$  dans le cas de la rétrodiffusion. En conséquence, la

profondeur maximale atteinte par un électron dans la direction incidente initiale est inférieure à la longueur de sa trajectoire. Il existe plusieurs modèles permettant de décrire le trajet des électrons dans le matériau jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique. Ces modèles prennent en compte les interactions de type élastiques et inélastiques. En 1961, Archard proposa un modèle basé sur la théorie de perte d'énergie de Bethe (1940) [46] et la théorie des collisions élastique d'Everhart (1960) [47]. Wittry et Kyser [48], ont proposé dans une étude sur l'émission X dans le cuivre une expression de la profondeur de pénétration. Par la suite, Everhart et Hoff ont proposé une expression de profondeur de pénétration obtenue à partir d'une étude de la génération des paires électron-trou dans le silicium [49]. En 1972, Kanaya et Okayama démontrèrent les Limitations du modèle d'Archard en proposant leur modèle semi-empirique qui avait un domaine de validité assez large (10 à 1000 KeV) et qui pouvait être affiné afin d'apporter une approche globale du problème de l'interaction électron-matière [50]. Les formes les plus courantes dans la littérature sont (avec E, est exprimée en keV) :

**a) Modèle de Wittry-Kyser**

$$R_e (\mu\text{m}) = 25.6\rho \cdot E_0^{1.7} \quad (\text{III. 38a})$$

**b) Modèle d'Everhart et Hoff**

$$R_e (\mu\text{m}) = 0.398 \rho \cdot E^{1.7} \quad (\text{III. 38b})$$

**c) Modèle de Kanaya et Okayama**

$$R_e (\mu\text{m}) = 0.276 \cdot A\rho \cdot Z^{0.889} E_0^{1.75} \quad (\text{III. 38c})$$

Avec A le poids atomique en g /mol.

Comme il est énoncé ci-dessus, le but de la méthode de Monte Carlo est de simuler plusieurs trajectoires afin de réduire les fluctuations statistiques et l'effet des nombres aléatoires provenant de chacune des trajectoires. Il est ensuite possible d'analyser les trajectoires d'électrons pour en retirer les informations pertinentes. La profondeur de pénétration augmente avec l'énergie et diminue avec le poids atomique. (Résultats, interprétation) coïncidence avec la littérature. D'après les simulations de Monte-Carlo, un électron peut subir de nombreuses diffusions élastiques/inélastique avant de ressortir sous forme rétrodiffusée et les informations apportées par l'électron rétrodiffusé peuvent provenir de toute une zone de profondeur (figure (III.16)) [13].

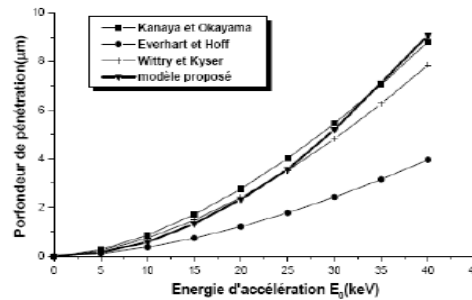
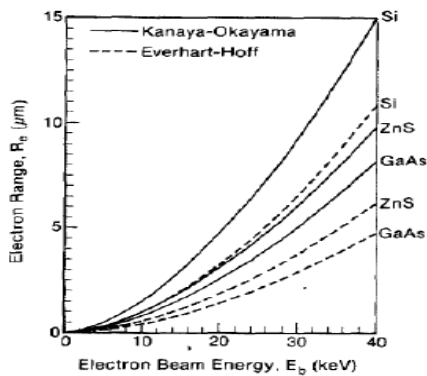
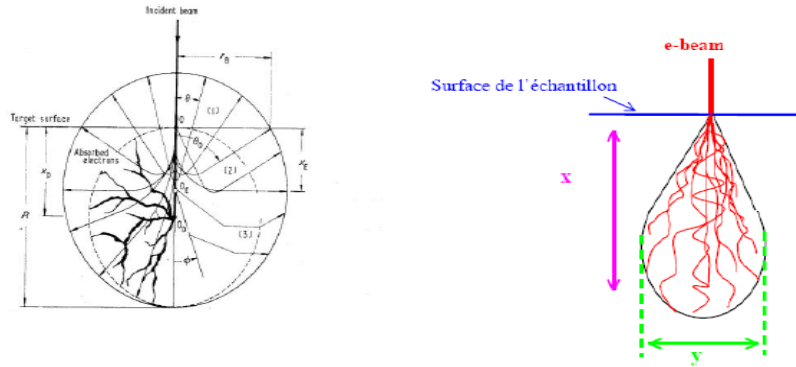


Fig.III. 4. Profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$  pour le GaAs.

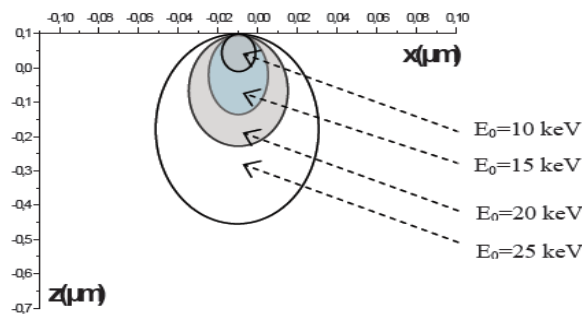
**Figure (III.16)** Profondeur de pénétration  $R_p$  dans divers semi-conducteurs en fonction de l'énergie du faisceau d'électrons  $E_0$  calculé à partir des modèles Kanaya-Okayama et Everhart-Hoff, b) Profondeur de pénétration en fonction de  $E_0$  pour le GaAs [13].

#### IV.1.2. Le volume de génération

Généralement, deux manières permettent d'estimer le volume de génération ou d'une autre façon le volume de dissipation d'énergie du faisceau d'électrons dans le matériau, soit de manière semi-empirique [49,50], soit de manière statistique en utilisant les simulations Monte-Carlo [51,18] ; cette dernière se révèle être plus précise et a été adoptée. Pour avoir une idée sur la façon dont la dispersion prend part à un certain solide, la simulation de Monte Carlo peut être performée. Comme son nom l'indique, c'est une méthode statistique utilisant des nombres aléatoires pour calculer les trajectoires des électrons. Cependant, la probabilité de diffusion est prise en compte dans les programmes de calcul comme un paramètre très importants tels que la tension, le nombre atomique, l'épaisseur et la densité du matériau. La pénétration des électrons primaires dans la matière s'accompagne d'un élargissement du faisceau en même temps qu'une perte progressive d'énergie. Le volume affecté est appelé familièrement "poire d'interaction" (figure III.17). Sa forme et sa taille sont commandés par les deux interactions élastiques et inélastiques. Les dimensions de cette poire (Figure 2) dépendent de l'angle d'incidence, de l'intensité du courant reçu par l'échantillon, de l'énergie du faisceau ainsi que du nombre atomique moyen de la cible. Sous incidence oblique, la forme de la poire tend à s'allonger dans la direction du faisceau primaire.



**Figure (III.17)** Maximum de dissipation de l'énergie (model de Kanaya-Okayama) [50] b) Volume de génération.



**Figure (III.18)** La poire de génération de 50 électrons pénétrants dans le  $\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{GaAs}$  pour :  $E_0 = 10, 15, 20$  et  $25$  keV [13].

#### IV.1.3. Distribution des porteurs générés et le taux d'injection

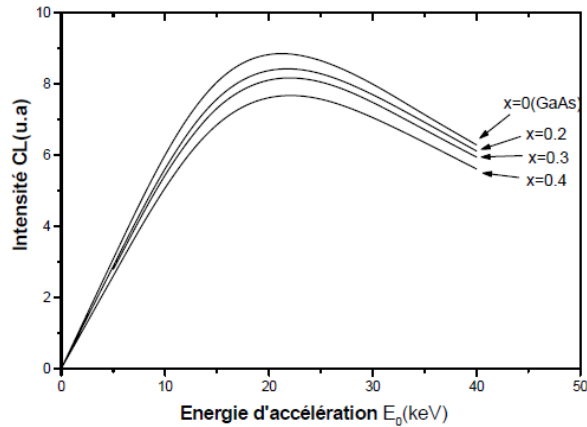
La modélisation de l'intensité de cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération nécessite de connaître la concentration de porteurs minoritaires créés lors du bombardement de l'échantillon par le faisceau électronique. L'électron incident excite (en perdant une partie de son énergie) un électron de la cible. Généralement les électrons excités sont ceux des couches externes des atomes de la cible qui sont faiblement liés. La génération d'électrons secondaires se fait le long du parcours des électrons primaires dans le volume d'interaction. La totalité de l'énergie de l'électron incident a été utilisée dans les collisions successives pour créer des paires électron-trou. Dans ce cas, le nombre de charges  $n_{e-h}$  créées lors d'une collision est donc déterminé comme étant le rapport entre l'énergie perdue entre deux collisions successives  $\Delta E_i$  et l'énergie d'ionisation (ou de création d'une paire électron-trou)  $E_{e-h}$ .

En effet, dans la technique d'analyse MEB, le problème de la baisse de la résolution latérale est très important (Causé par la distribution radiale des électrons Auger émises par les électrons rétrodiffusés), nécessitant des outils théoriques rigoureux décrivant le phénomène de transport des électrons [9].

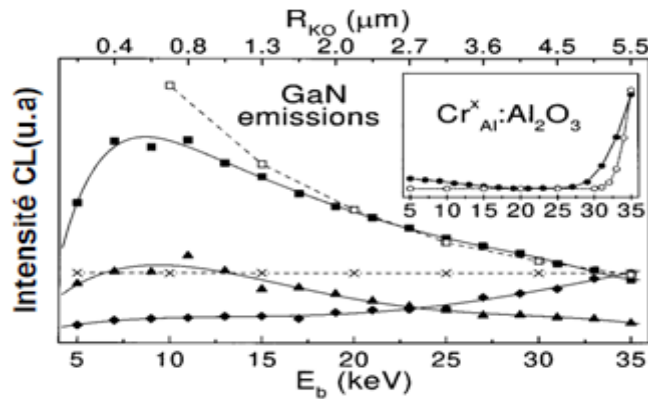
Pour l'injection, l'injection est dite " faible " lorsque le nombre de paires électron – trou créées dans le semiconducteur est inférieur à la densité de porteurs majoritaires à l'équilibre. La durée de vie d'une paire électron-trou est alors déterminée par celle des porteurs minoritaires. Dans le cas contraire, l'injection est dite " forte " et il faut alors tenir compte, dans l'expression de la recombinaison, des deux types de porteurs. Le taux d'injection est donc un paramètre déterminant dans l'interprétation des résultats obtenus en EBIC ou en cathodoluminescence. Il s'exprime, dans le cas d'une génération homogène, par la relation [9].

#### **IV.2. La cathodoluminescence**

La cathodoluminescence (CL) dans un microscope électronique à balayage (MEB) est une technique de caractérisation non destructive qui utilise l'émission de photons d'un échantillon (solide organique, isolant ou semiconducteur) soumis au bombardement d'un faisceau électronique. Elle permet l'observation de défauts présents dans les matériaux et composants de l'optoélectronique. Plus qu'une simple technique d'observation, c'est un outil analytique très utile pour la compréhension des effets de ces défauts sur les propriétés électriques et luminescentes du matériau. Pour cela, la méthode Monte Carlo est très utile pour comprendre le phénomène de CL et pour reproduire un spectre de CL de façon précise. Son utilisation permet d'obtenir les positions et largeurs à mi-hauteur des différentes bandes de luminescence. Cette méthode consiste à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, et dans notre cas pour calculer l'interaction d'un faisceau d'électrons d'énergie de l'ordre de keV avec le matériau, et en déduire l'angle de diffusion (trajectoire des électrons donnée par l'expression de Rutherford. L'idée est de déduire un nombre de photons émis après chaque collision. Ce nombre dépend de la perte d'énergie et de la probabilité de recombinaison non radiative. La somme sur l'ensemble des trajectoires des différents électrons incidents, des photons générés par l'ensemble des collisions devrait permettre de reproduire un spectre de CL en allouant des nombres de photons à chaque bande de luminescence. L'analyse de la simulation de spectres de CL obtenus pour plusieurs  $V_{acc}$  devrait pouvoir fournir une information physique() [52].

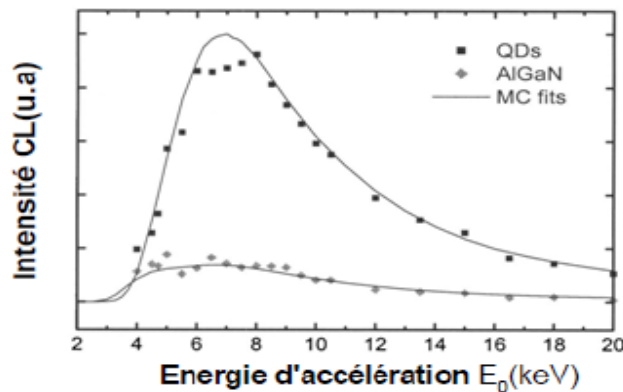


**Figure (III.19)** Signale cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pour différentes valeurs de la fraction molaire  $x$  [13].



**Figure (III.20)** Profils simulés et mesurés de signal de cathodoluminescence de GaN [52].

Comme cela est illustré sur la figure (III.20), pour une tension d'accélération  $E_b=5\text{kV}$ , les profondeurs maximales de pénétration d'électrons pour le GaN et AlN sont 250 et 350 nm, respectivement. Par conséquent, l'épaisseur de la région active doit être  $> 350\text{ nm}$ , afin de couvrir toute la profondeur de pénétration des électrons, et donc de maximiser l'émission de photons [52].



**Figure (III.21)** Rendements de cathodoluminescence (échelle linéaire) du GaN QDs (carrés noirs), les couches de AlGaN (gris) et des courbes fitées par la méthode de Monte Carlo (lignes droites) pour  $e_{\text{QD}}=56.5\text{AlGaN}$  [53].

Pour 4 keV d'énergie d'accélération, les intensités de luminescence de QD et des couches AlGaIn sont comparables, mais pour une énergie de 5 keV, la luminescence de QD devient dominante parce que les électrons pénètrent plus profondément dans la structure. Le rendement de CL, qui est le rapport de l'intensité CL à la puissance d'excitation, a été trouvé pour un maximum de 7-8 électrons keV (figure III.21) [53].

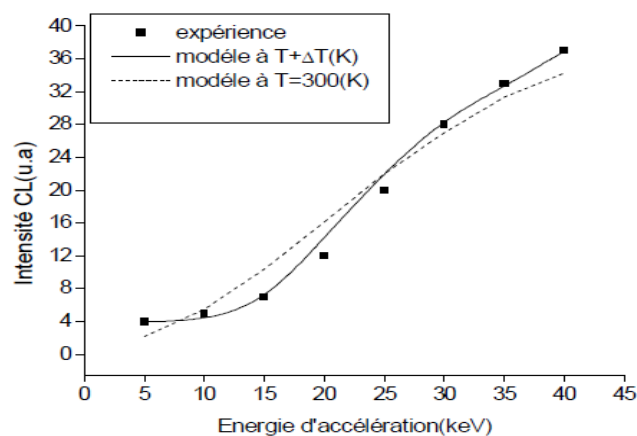
#### IV.2.1.Dépendance en température de la cathodoluminescence

La luminescence est dépendante de la température comme toutes les autres propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. En général, il existe deux modèles: le modèle thermique et le modèle non thermique [54]. Dans le modèle thermique [55], l'énergie du photon ou électron incident est transformée directement en chaleur. Le modèle non thermique considère qu'une grande densité de plasma d'électron-trou a été formée, et à cause de cette densité les semi-conducteurs covalents, deviennent instables [56]. L'intensité de cathodoluminescence  $I_{CL}$  peut être affectée par la température  $T$  de l'échantillon [57] qui fait varier  $I_{CL}$  suivant la relation :

$$I_{CL} \approx \left(\frac{1}{T^3}\right) \exp\left(\frac{E_{gap}(T)}{k_B T}\right) \quad (III. 39a)$$

Avec

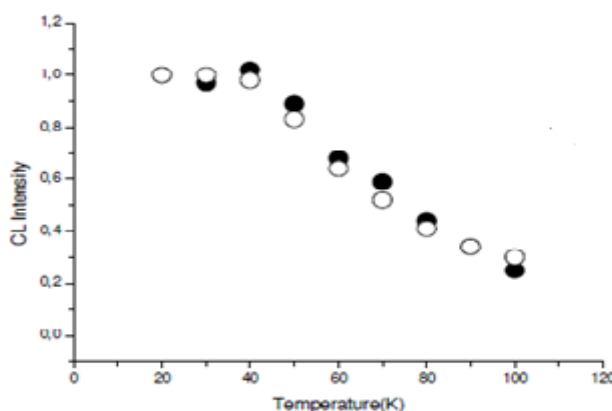
$$E_{gap}(T) = E_{gap}(T = 0) - \frac{\alpha_g T^2}{T + \beta_g} \quad (III. 39b)$$



**Figure (III.22)** Signal de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$ , (Comparaison des résultats obtenus par simulation avec ceux de l'expérience [59]).

La chaleur induite par le faisceau d'électrons a montré une dépendance linéaire entre l'élévation de la température ( $T$ ) sous le bombardement d'électrons et les niveaux d'excitation. Pour l'état typique d' $I_p = 10^{-8}$  A,  $E_0 = 40$ KeV et  $d_0$  le rayon du faisceau égal à 0,1 m, l'élévation de la température ( $T$ ) est

d'environ 20 K. L'objectif de la comparaison (figure (III.23)) entre les résultats théoriques et les données expérimentales n'est pas seulement d'enquêter sur les la validité des études théoriques, mais aussi d'estimer certains paramètres quantitatifs des porteurs excédentaires et des centre de recombinaison [59].



**Figure (III.23)** Signal de la cathodoluminescence  $I_{CL}$  en fonction de la température [60].

La variation de l'intensité CL, qui dépend des conditions d'injection ( $I_p$ ,  $E_0$ ), est importante si la température est inférieure à 200K (figure (III.23)) et surtout à basse température. Dans la plage de température, la température de montée  $\Delta T$  doit ne pas être négligé. Le but de la comparaison entre les résultats théoriques et les données expérimentales est non seulement d'étudier la validité des études théoriques mais aussi d'estimer certains paramètres quantitatifs des excédents de porteurs et du centre de recombinaison.

#### IV.3. Synthèse sur les effets secondaires du faisceau électronique (l'augmentation de la température pendant le bombardement)

Les mécanismes de perte d'énergie des électrons qui ont lieu dans la région de diffusion peuvent produire un échauffement local de l'échantillon (élévation de la température locale), cet effet se produit en particulier sur les semi-conducteurs et des isolants, métaux, avec une conductivité thermique élevée, subissent rarement effet de chauffage [61], ce dans le cas des échantillons massifs, mais dans les nanostructures ce n'est pas le cas. Qui rend la modélisation du transfert de chaleur dans les nanostructures indispensable, car d'un côté la mesure expérimentale de certaines grandeurs s'avèrent coûteuses, difficiles, voire même impossible, et d'autres côtés le phénomène de l'échauffement d'un échantillon bombardé par des électrons affecte plusieurs processus.

Étant donné que les faisceaux d'électrons utilisés dans les SEM sont finement concentrés, l'énergie est concentrée sur une très petite zone. Si l'échantillon est incapable de mener loin cette chaleur supplémentaire, il peut localement fondre, bouillir ou cuire (dans le cas des échantillons

biologiques). Lorsque électrons incidents pénètrent dans un matériau à l'énergie utilisée pour le SEM, leurs interactions avec les électrons atomiques dans le matériau provoquent l'excitation et l'ionisation des atomes de la cible, la conversion d'une partie de la perte d'énergie incidente en énergie thermique [62]. D'après Nouri *et al* [63], au cours des interactions électrons-échantillon (les collisions inélastiques) une partie importante de l'énergie de faisceau d'électrons reconvertira en chaleur à l'intérieur de l'échantillon, à travers l'excitation des oscillations de réseau et la quantité de la chaleur produite dans le volume d'interaction augmente avec l'augmentation de puissance du faisceau, et avec une décroissance de la conductivité thermique.

#### IV.3.1. Quelques modèles existent concernent l'augmentation de la température locale pendant l'irradiation électronique

Des modèles relatifs à l'augmentation de la température locale (réelle) d'un échantillon soumis aux radiations d'un faisceau d'électron ont été proposés par plusieurs auteurs :

R.Castaing, présenta le 1<sup>er</sup> microanalyseur X par sonde électronique appelée ensuite microsonde de Castaing. Il permet d'effectuer l'analyse du spectre de rayons X généré dans une cible par un faisceau d'électrons finement focalisé.

**Castaing [64]**, a calculé l'augmentation de température locale  $\Delta T$ , d'un matériau massif soumis à un faisceau d'électrons de puissance  $W$  est gouvernée par la formule suivante :

$$\Delta T = \left( \frac{W}{2\pi \cdot J \cdot C} \right) \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) \quad (\text{III. 40a})$$

Avec

$$W = E_0 \cdot I_0 \quad (\text{III. 40b})$$

Avec  $J$  le coefficient de conversion ( $4,18 \text{ J} \cdot \text{cal}^{-1}$ ),  $C$  la conductivité thermique de l'échantillon ( $\text{cal} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ ),  $R$  la dimension de l'échantillon (cm) et  $r$  la dimension de la zone interagissant avec le faisceau d'électrons (cm). Comme  $R$  est typiquement de l'ordre du centimètre et  $r$  de l'ordre du micromètre, le terme  $(1/R)$  peut être négligé. On obtient, dans le système international :

$$\Delta T = \frac{W}{2\pi \cdot J \cdot C \cdot r} \quad (\text{III. 40c})$$

Ou bien

$$\Delta T = \frac{W}{2\pi \cdot k \cdot r} \quad (\text{III. 40d})$$

Avec  $k$  la conductivité thermique du matériau ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ).

**Vigne et Einstein [65]**, ont calculé l'augmentation de température  $\Delta T$  dans le centre de spot, avec un profil gaussien de la densité électronique du faisceau. Si la puissance injectée  $W$  est dissipée seulement sur la surface la l'élévation de la temperature  $\Delta T$  est donné par:

$$\Delta T = \left( \frac{0.099W}{\sqrt{\pi} \cdot \beta^2 a^2} \right) \quad (\text{III. 41})$$

Avec  $a$  est le diamètre du faisceau (cm),  $\beta$  est la conductivité thermique ( $\text{cal.cm}^{-1}.\text{C}^{-1}$ ) et  $W$  est la puissance injectée (Watt). Si la rétrodiffusion d'électrons est considéré, l'équation (III.41a) doit être corrigé d'un facteur  $p$ ; caractéristique du rapport de puissance non rétrodiffusé. La montée en température est alors donnée par:

$$\Delta T = P \cdot \left( \frac{0.099W}{\pi^{1/2} \cdot \beta \cdot a_1} \right) \quad (\text{III. 42})$$

Un modèle a été proposé par Archard pour le calcul de la  $p$ .

Cette correction est nécessaire uniquement pour les énergies primaires  $E_p$  supérieurs à 10 keV et pour des épaisseurs au dessous de 1  $\mu\text{m}$ .

**Pittaway [66]** A suggéré que la relation de température comprend un paramètre de temps:

$$\Delta T = \frac{\left( \frac{V \cdot I}{D \cdot K_1} \right) \log(1 + 4\lambda)}{4\pi} \quad (\text{III. 43})$$

Où  $V$  et  $I$  représentent la tension d'accélération et le courant,  $K_1$  et  $D$  sont la conductivité thermique et l'épaisseur de l'échantillon, respectivement, et  $\lambda$  est une variable dépendant du temps.

**Vassamillet et Caldwell [67]**, ont établie une méthode empirique pour estimer la quantité de chaleur provoquée par un faisceau électronique :

$$T_{VC} - T_0 \cong \frac{W_0}{2\pi K r_0} \quad (\text{III. 44})$$

Où  $W_0$  est la puissance du faisceau (watts);  $K$  est la conductivité thermique de la matrice ( $\text{W.cm}^{-1}.\text{C}^{-1}$ );  $r_0$  (m) est le rayon de l'hémisphère (qui a un volume équivalent à celui du disque irradié, dans le cas où le diamètre du faisceau est supérieure à la plage d'électrons);  $T_0$  est la température initiale et la  $T_{VC}$  est la température à la surface de l'hémisphère équivalent.

**Baker et Sexton [68]**, ont déterminé la température dans une plaque infinie (d'une épaisseur  $L$ ) exposés à un faisceau d'électrons homogène (de diamètre égale a  $2r_0$ ). Dans la limite  $r \ll L$ , la température maximale dans le centre du spot est donné par la relation :

$$T = \frac{P \cdot r_0}{\beta} \quad (\text{III. 45})$$

Où  $P$  est la puissance injectée (Watt),  $r_0$  est le diamètre du faisceau (cm), et  $\beta$  est la conductivité thermique. Mais, la situation peut être tout à fait différente si l'échantillon est un film mince

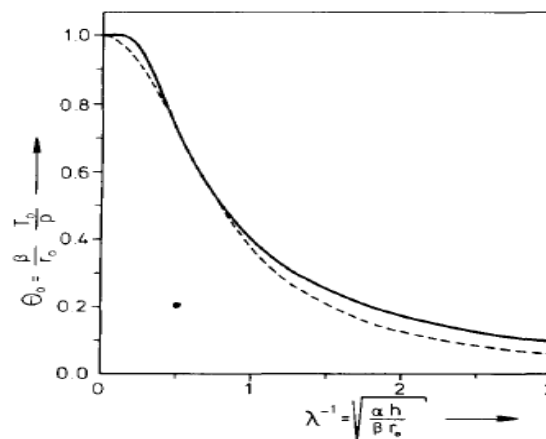
(épaisseur  $h \ll 2a$ ) avec une haute conductivité thermique  $\alpha$  déposé sur un substrat épais avec une faible conductivité thermique ( $\beta$ ).

Cette situation a été considérée par **K. Roll [69]** qui a proposé : La distribution de température dans un film métallique mince exposée à un faisceau d'électrons est calculée à partir du bilan du transport de chaleur à travers le film et le substrat. La dissipation radiale de la chaleur à l'intérieur de la surface de film donne un apport important qui varie avec l'épaisseur du film. En conséquence, la température dépend de l'épaisseur du film et devient élevé lorsque les films sont très minces.

$$\Delta T = \frac{\left(\frac{P \cdot r_0}{\beta}\right)}{\left[1 + 1.67 \left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \left(\frac{h}{r_0}\right)\right]} \quad (\text{III. 46})$$

Avec  $h$  est l'épaisseur de film,  $P$  est la puissance injectée (Watt),  $r_0$  est le diamètre du faisceau (cm), et  $(\text{cal.cm}^{-1}.\text{C}^{-1})$  est la conductivité thermique.

Les résultats sont présentés en termes de variables normalisées qui couvrent une large gamme de paramètres du faisceau et des échantillons. En outre, une formule simple est donnée pour le calcul approximatif de la température au centre du faisceau. Il peut être utilisé pour déterminer la température au cours d'électrons Auger, la profondeur du profil, où la température augmente progressivement au cours de l'expérience, en raison de la réduction de l'épaisseur du film. Les résultats sont comparés à des estimations expérimentales de la température (Figure (III.24)).



**Figure (III.24)** La variation de la température au centre du faisceau ; courbe pleine: solution correcte selon l'équation [69].

**Y.Talmon and et E.L. Thomas [70]**, ont proposé un modèle mathématique pour traiter le problème l'effet d'échauffement d'un échantillon épais irradiée par un faisceau d'électrons dans la phase froide dans SEM/STEM, une solution analytique de ce problème a été fournie.

**C. Roussel et al. [71]** dans leurs étude concernant le calcul de l'énergie déposée et l'analyse de la cinétique d'échauffement dans le ZnTe et le MgZnTe, ont utilisé une méthode d'analyse permet de

séparer dans l'excitation, la contribution de l'énergie et celle de la densité de courant. Pour déterminer les profils de densité d'énergie déposée et les profondeurs de pénétration des électrons, ils ont simulé les trajectoires électroniques par une méthode de Monte-Carlo pour des énergies de faisceau d'électrons de 15 keV à 60 keV. Concernant l'échauffement, leurs résultats obtenus mettent en évidence un confinement thermique et montrent en particulier que l'échauffement superficiel est plus élevé à basse température en dépit d'une forte diffusion ( $\Delta T = 40$  K en 10 ns) et qu'à haute température cet échauffement peut s'avérer plus important pour 15 keV que pour 60 keV (figure (III.25)).

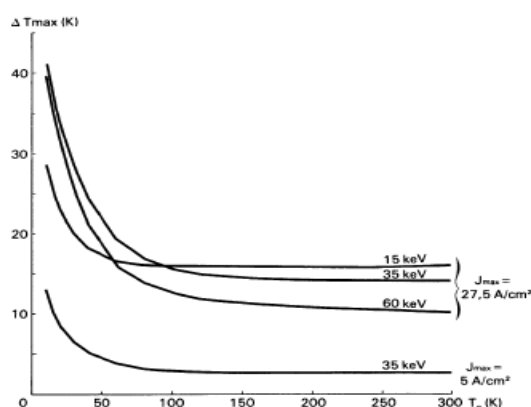


Fig. 9. — Echauffement maximum dans ZnTe ( $\Delta T_{\max} = T_{\max} - T_0$ ) en fonction de  $T_0$  pour 3 énergies différentes et 2 densités de courant échantillon.

**Figure (III.25)** La variation de la température dans le ZnTe en fonction  $T_0$  [71].

**Meldrum et al** [72], utilisent le modèle de Fisher pour étudier les phases de ségrégation dans l'apatite cristalline et amorphe (une étude avec le MET). Selon ce modèle (modèle de Fisher), l'élévation de température,  $\Delta T$ , peut être calculé selon l'équation suivante:

$$\Delta T = \left( \frac{I}{4\pi \cdot k \cdot e} \right) \left( \frac{\Delta E}{d} \right) \left( \gamma + 2 \frac{b}{a} \right) \quad (\text{III. 47})$$

où  $e$  est la charge de l'électron,  $\gamma$  est la constante d'Euler,  $a$  est la largeur du profil de faisceau gaussien,  $b$  est le rayon du puits de chaleur (heat sink),  $k$  est la conductivité thermique de l'échantillon,  $I$  est le courant du faisceau et  $\Delta E$  est la perte d'énergie par électron dans un échantillon ayant une épaisseur  $d$ . Jencic *et al.* (1995) [86] ont démontré que l'équation (III.47) peut être résolue pour un profil de faisceau non gaussiens et un échantillon contenant un trou:

$$\Delta T = \left( \frac{I}{\pi \cdot k \cdot e} \right) \left( \frac{\Delta E}{d} \right) \ln \left( \frac{b}{r_0} \right) \quad (\text{III. 48})$$

Où  $r_0$  est le diamètre du faisceau.

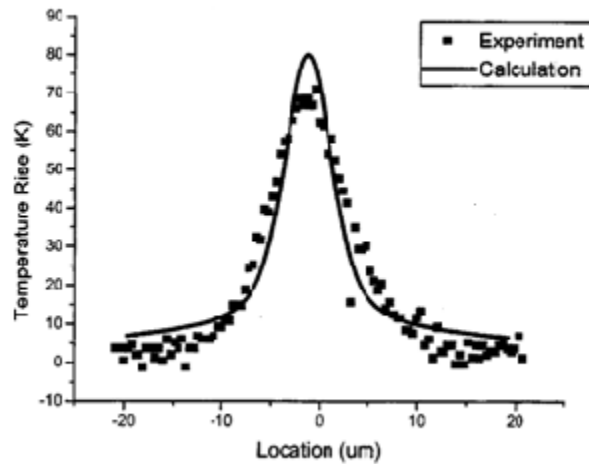
D'après **R.F. Egerton et al [7]**, dans le cas de MEB, un échantillon en volume est utilisé et le flux de chaleur est radial en trois dimensions, ce qui conduit à une augmentation relativement faible de la température. Lorsque le diamètre de la sonde est inférieure à la profondeur d'électrons  $R$ ; l'élévation de température est stationnaire:

$$\Delta T_R = \frac{\left(\frac{1.5}{\pi}\right) (I \cdot V_0)}{(k \cdot R)} \quad (\text{III. 49})$$

Où  $I$  est le courant de sonde et  $V_0$  la tension d'accélération. Pour  $V_0 = 20$  kV et  $I = 1$  nA,  $R < 1$  mm et  $\Delta T < 0.1$  K pour les métaux ou de quelques degrés pour un polymère typique ( $k < 1$  W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>). Avec une sonde de balayage, dont le temps par pixel est typiquement inférieur au temps d'équilibration thermique,  $\Delta T$  est encore plus faible. Mais si un film mince (sur une grille de TEM) est examiné dans le SEM et si l'énergie incidente est comprise entre 500 eV et 2 keV, l'élévation de température dans un échantillon biologique peut atteindre quelques centaines de degrés pour une sonde stationnaire. Dans ce cas, la plage d'électrons est inférieure à l'épaisseur du film, toute l'énergie du faisceau est déposée dans le film et le flux de chaleur est à deux dimensions. La montée en température est généralement réduite d'un facteur de dix lorsque le faisceau est balayé au débit de vidéo.

**Mirkarimi et al. [73]**, utilisent un modèle d'éléments finis pour étudier le chauffage par faisceau d'électrons induite sur un film plane multicouche Mo/Si. L'augmentation de température calculée est maximale (~15 °K) au centre du faisceau d'électrons, et diminue de façon continue en fonction de la distance radiale à partir de la profondeur ou de la surface d'échantillon.

Des thermocouples en couche mince d'or et de nickel ayant une résolution spatiale de 400 nm ont été fabriqués, étalonnés et utilisés pour mesurer le profil de température à la surface inférieure d'un film de réserve pendant l'exposition aux faisceaux d'électrons **Dachen Chu et al. [74]**. Une élévation de la température à l'état stationnaire de 70 °K a été observée sous l'irradiation d'un faisceau de forme gaussienne de tension de 15 kV, courant de faisceau de 600 nA (figure (III.26)). Cette élévation de température peut provoquer un changement de 36% de la sensibilité PMMA. Les températures maximales calculées sont environ de 15% plus élevées que les mesures, mais cette différence n'est pas significative. Des mesures transitoires sont prévues; La résolution temporelle attendue est de l'ordre de 1 ms.



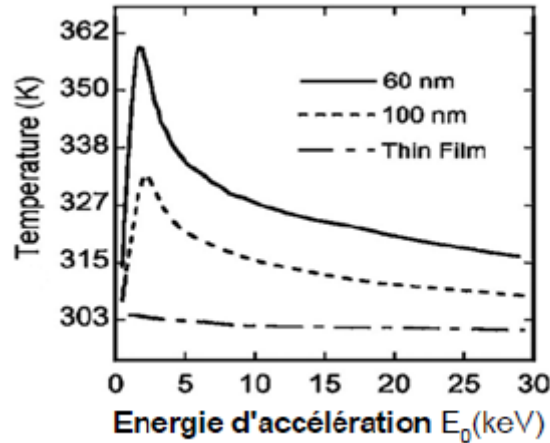
**Figure (III.26)** Profil de la température (expérimental et calcul) à la surface de PMMA, irradié par un faisceau gaussien de 15 kV [74].

**S. J. b. Reed [75]**, a déterminé la temperature locale et développer un modèle semi-empirique :

$$\Delta T = 4.8 \frac{E_0 \cdot I_0}{k \cdot d} \quad (\text{III. 50})$$

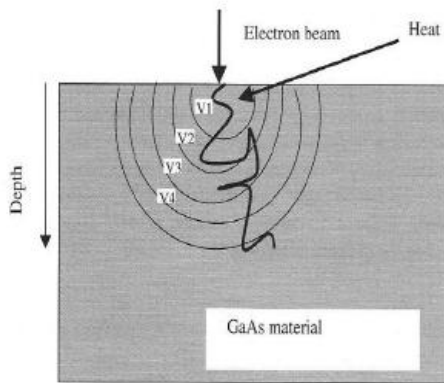
Avec :  $E_0$  est l'énergie d'accélération des électrons incidents exprimée en keV,  $I_0$  est l'intensité du courant des électrons incidents exprimée en  $\mu\text{A}$ ,  $d$  est le diamètre du faisceau électronique exprimé en  $\mu\text{m}$  et  $K$  est la conductivité thermique du matériau exprimée en  $\text{W} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .

Le modèle d'interaction électrons-solide de Monte-Carlo a été intégré à un modèle éléments finis par **Randolph et al [76]** ont déterminé la hausse en temperature par un faisceau d'électrons (EBIH) sur un nano-fibres et un film mince de  $\text{SiO}_2$  (épaisseur 500 nm) en fonction de l'énergie du faisceau et de la géométrie de l'échantillon. Dans la figure (III.27), pour un courant constant de la sonde, la température de surface diminue graduellement avec l'énergie du faisceau (maximum de 30 KeV) à partir d'une température maximale de 304 K initial à la température ambiante. Il apparait claire aussi, que la variation de la temperature dans un nano-fiber est plus grande que dans un film. En fonction de l'énergie de, l'élévation de température peut être arrivée jusqu'à 50 ° C, comme il ressort d'un modèle par **Randolph et al. [76]** sur la base de l'effet suggéré par **Weber et al. [77]**.

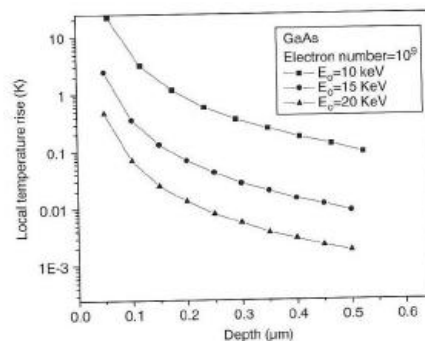


**Figure (III.27)** Température calculé dans un nano-fibres de 60 et 100 nm de longueurs respectivement (par rapport à un film mince) [76].

**Nouiri et al. [63]**, ont proposé une nouvelle approche Monte Carlo basée sur le modèle d'interaction électrons-matière, et calculé la hausse de la température dans les semi-conducteurs lors de l'analyse SEM. La montée en température est proportionnelle au niveau du courant absorbé et inversement proportionnelle à l'énergie d'accélération, ce qui donne 0,3 à 20 K pour une plage de courant absorbé de 0,1 à 1 nA à l'énergie du faisceau utilisé fréquemment de 20 KeV (figure (III.28)). Cependant, Nouiri *et al* démontrent que de petits changements dans le courant du faisceau primaire peuvent considérablement augmenter le degré de chauffage de surface, en particulier à basses tensions d'accélération. Nous considérons donc qu'il est possible que les cristaux dans cette étude peuvent éprouver une augmentation de  $> 200$  K de la température près de la surface de l'échantillon.



**Figure 1.** Schematic representation of Monte Carlo method used in this model calculation.



**Figure 5.** Local temperature rise as a function of depth for different accelerating energies. Solid points are results of the Monte Carlo calculation.

**Figure (III.28)** variation de température locale dans GaAs en fonction de la profondeur de pénétration [63].

Ce modèle a été amélioré [11], il a utilisé la dynamique moléculaire dans les calculs pour faire apparaître l'effet de la durée de balayage sur l'augmentation de la température locale ; voici quelques

résultats de calculs de l'augmentation de la température locale de model de Nouiri [11] (voir figure (III.29) et figure (III.30)).

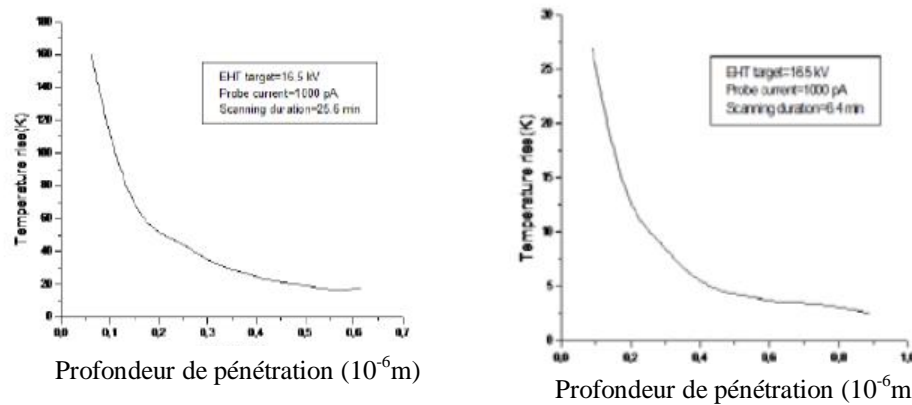


Figure (III.29) la température locale dans l'apatite en fonction de la profondeur de pénétration : a) pour une durée de  $t=26.6$ min, b) pour une durée de  $t=6.4$  min [11].

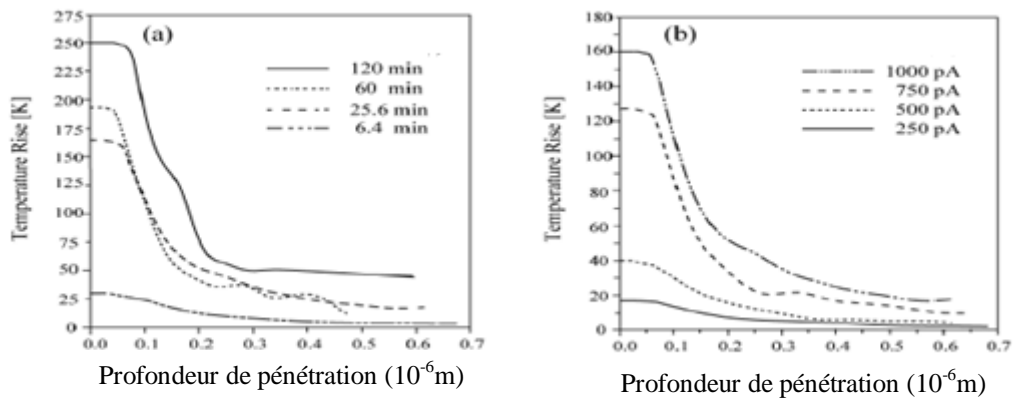
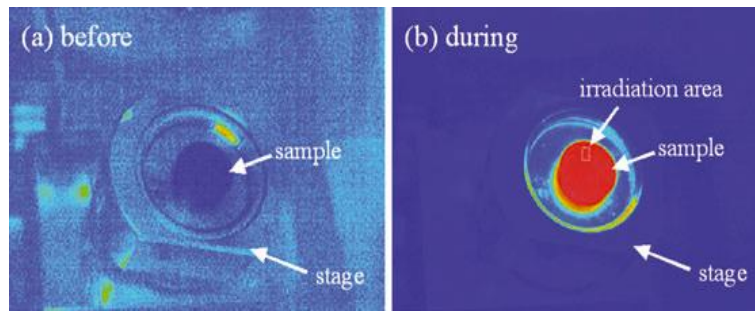
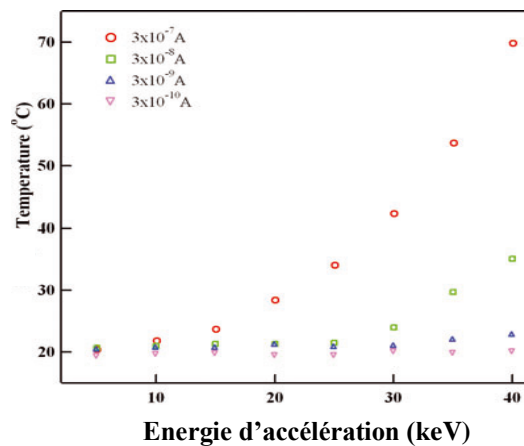


Figure (III.30) la température locale dans l'apatite en fonction de la : a) pour une durée de  $t=26.6$ , b) pour une durée variée [78].

Tokunaga et al. [78], dans des travaux sur le graphite, ont utilisé un faisceau d'électrons produit par un microscope électronique à balayage pour irradier deux échantillons ayant des conductivités thermiques différentes, les températures résultantes des zones irradiés, ainsi que les distributions de température dans les échantillons ont été ensuite mesurées par une caméra thermique (figure (III. 31)). Ces mesures ont montré des augmentations globales des températures d'échantillons, ainsi que la température dans les zones irradiées qui avaient peu de différence avec l'une des prédictions théoriques. Les différences entre la valeur réelle et les mesures de température prévues ont été analysées en fonction de la précision avec laquelle les paramètres peuvent être estimés. Les distributions de température des échantillons ont été mesurées et, sur la base des résultats obtenus, il a été émis l'hypothèse que l'écart de température sur un échantillon irradié est inversement proportionnel à sa conductivité thermique.



**Figure (III. 31)** Images de distribution de la température d'un échantillon de graphite, (a) avant l'irradiation et (b) au cours de l'irradiation [78].



**Figure (III. 32)** Les relations entre les températures dans la zone irradiée sur un échantillon de graphite et la tension d'accélération pour différents valeurs de courant [78].

La relation entre les températures dans la zone irradiée et la tension d'accélération dans diverses conditions d'irradiation est représentée sur la figure (III. 32), à partir de laquelle on peut voir que la température de la zone irradiée augmente avec une augmentation de la tension d'accélération et de courant de faisceau. La température dans la zone irradiée atteint environ de  $70^{\circ}\text{C}$  sous une irradiation de  $3 \cdot 10^{-7} \text{ A}$  à 40 kV. Pour des courants inférieurs à  $3 \cdot 10^{-9} \text{ A}$ , les effets de la tension d'accélération sur les températures dans la zone irradiée étaient très faibles, et la montée en température est de quelques degrés de moins. Lorsqu'à la fois la tension d'accélération et le courant de faisceau sont faibles, il n'y a pas d'élévation de la température de l'échantillon dans ou autour de la zone irradiée. Inversement, lorsque les tensions d'accélération et les courants d'irradiation ont été appliqués pour l'analyse élémentaire en utilisant des rayons X de haute énergie produite par dispersion d'électrons spectroscopie (EDS), les températures de l'échantillon dans la zone irradiée directement et ses environs sont devenues élevées [78].

**J. Shan et al. [79]**, ont étudié les effets thermiques de microscopie électronique à balayage sur la diffusion de l'hélium dans l'apatite. Sur la base du profil simulé de la température  $\Delta T$  associé à la disposition des paramètres de diffusion l'hélium (He), la perte de l'hélium a été calculée pour les différentes dimensions de grains de l'apatite. Comme les analyses par le MEB peuvent provoquer

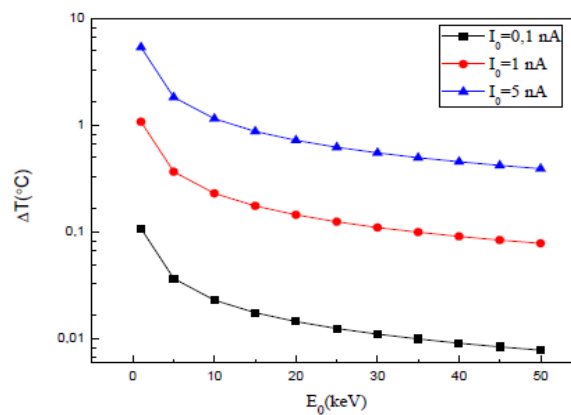
des températures  $\Delta T$  considérables près de la surface du grain, le profil de l'hélium injecté dans les grains peut être modifié de façon significative (figure III.30).

**M.J.Stock et al. [80]**, ont étudié la migration de l'halogène causé par la combinaison de chauffage de l'échantillon et le champ électrique induit par le faisceau d'électrons. Les résultats de cette étude suggèrent que le faisceau induit une redistribution des halogènes, étant donné suffisamment de temps ou de chauffage de l'échantillon, mais cela est susceptible de nécessiter de très longues échelles de temps dans des conditions ambiantes.

**Kenieche [81]**, pour un semiconducteur CdTe, a utilisé l'expression de Reimer pour déterminer l'élévation de la température (figure (III. 33)), due à l'échauffement produite par le faisceau d'électrons.

$$\Delta T_R = (1 - \eta) \frac{3P_0}{2\pi \cdot k \cdot R_e} \quad (\text{III. 51})$$

Avec :  $\eta$  est le coefficient des électrons rétrodiffusés,  $P_0$  est la puissance du faisceau des électrons incidents ( $P_0 = E_0 \cdot I_0$ ) exprimée en watts,  $K$  est la conductivité thermique du matériau exprimée en  $\text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$  et  $R_e$  est la profondeur de pénétration des électrons exprimée en cm (modèle de Kanaya et Okayama). Cette dernière relation (III.51) est la même présente ci-dessus (III.49), mais avec un facteur pré  $(1-\eta)$  pour les électrons rétrodiffusés.

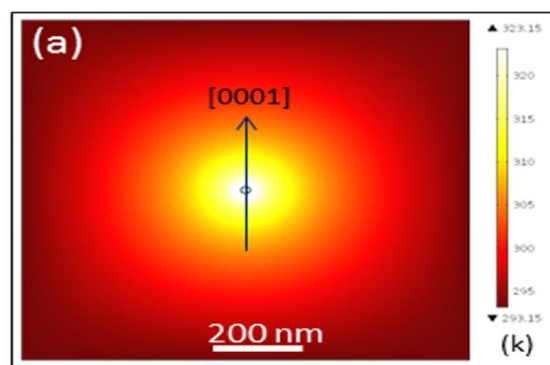


**Figure (III. 33)** Variation de la température en fonction de l'énergie d'accélération des électrons incidents calculée pour un matériau de CdTe [81].

La figure (III. 33) montre, la variation de la température en fonction de l'énergie d'accélération et de l'intensité du courant du faisceau des électrons incidents calculée pour un matériau de CdTe ( $\eta=0.43$ ,  $K=0.075 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) et  $R_e$  est calculée d'après le modèle de Kanaya-Okayama [81].

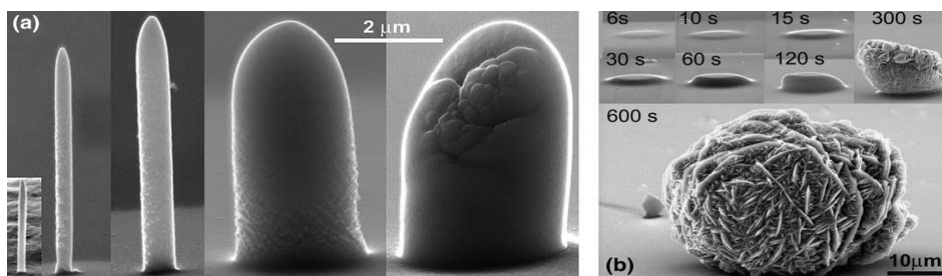
**Ding et al. [82]**, ont étudié l'effet d'un faisceau d'électron de haute énergie sur une nano-ceinture de ZnO. Ils ont arrivés à estimer l'élévation de la température pendant l'irradiation (Figure (III. 34)).

La figure (III. 34) (a) donne la distribution de température locale calculée de nano-ceinture due à un faisceau d'électrons focalisé sur le petit cercle. L'axe c positif est défini comme pointant vers le haut. Une augmentation de 30 ° C de la température a été supposée dans le calcul. Un faisceau d'électrons en forme rond avec un rayon de 10 nm est placé au centre de la surface 1µm.1µm ZnO et configurée comme une source de chaleur à température fixe. Quand un faisceau d'électrons à haute énergie irradiée sur les nano-ceintures ZnO, l'augmentation de la température locale génère un champ pyroélectrique. Dans la littérature, l'augmentation de la température calculée de composés II-V sous un faisceau d'électrons de 100 keV varie de 16,3 à 123 °C [20]. Le ZnO a une structure plus proche par rapport à ZnS. Il devrait y avoir une élévation de température similaire à celle de ZnS, qui est prédite comme 123 ° C et mesuré <210 ° C [83].



**Figure (III. 34)** Distribution de la température Calculée dans une nano-ceinture de ZnO, le cercle central correspond à la zone dans laquelle le faisceau d'électrons est focalisé [82].

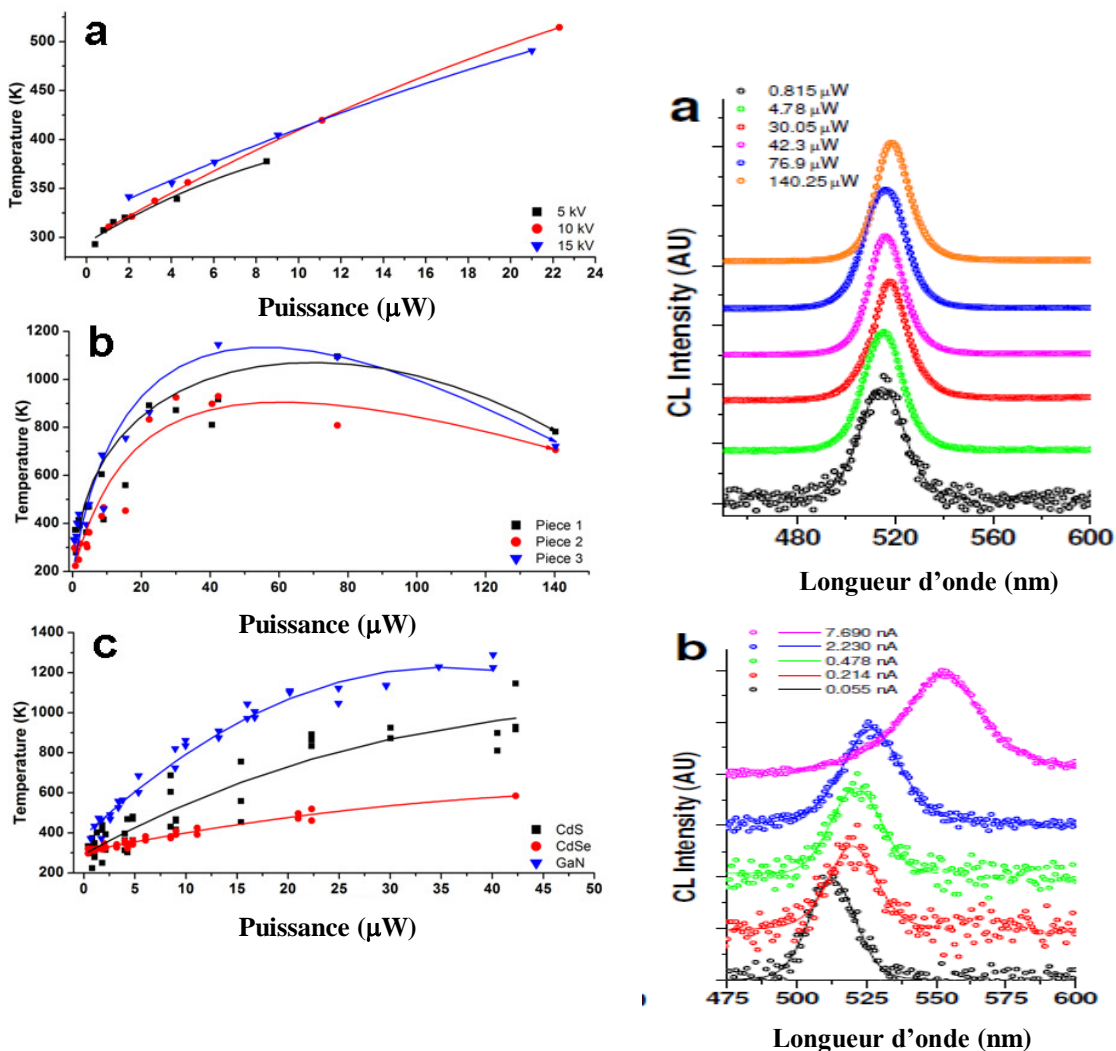
**I. Utke et al. [84]**, travaillent sur les effets thermique pendant le bombardement électronique de nano-composite de magnétique-cobalt. D'après Utke *et al*, des changements de la morphologie de surface avec la longueur de tip ou le courant de faisceau sont observés dans les figures (III. 35) (a) et (b). Ils ont arrivés même à déterminer la valeur numérique de la conductivité thermique de nano-composite de Co/C, utilisant la relation semi-empirique de la température de L. Reimer.



**Figure (III. 35)** images MEB des changements de morphologie de surface: (a) des pointes avec une longueur d'environ 4 µm déposés avec des courants 20 pA, 100 pA, 1 nA et 10 nA et 100 nA de gauche à droite ; (B) de pointes déposés à courant de faisceau fixe de 3 µA avec l'augmentation des temps d'exposition comme indiqué [84].

**M. A. Caldwell et al. [85]** dans sont travaille sur les nanofils de GaN, CdS et CdSe (Preuve spectroscopique pour une contribution thermique exceptionnelle à la fragmentation induite par un

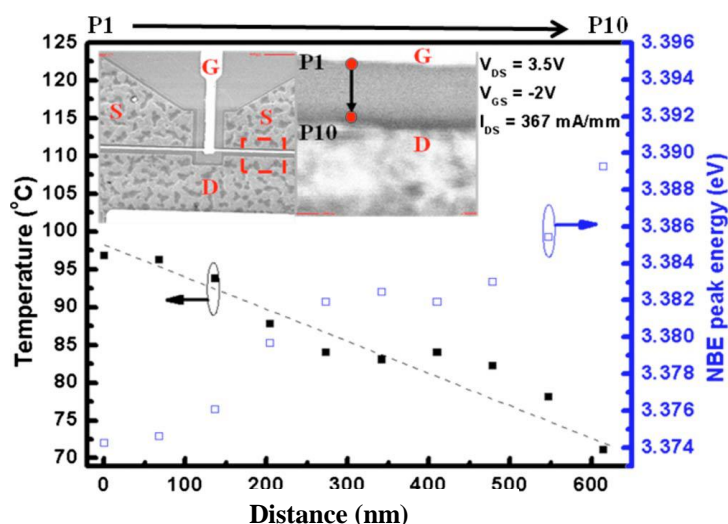
faisceau d'électrons). D'après M.A. Caldwell et al. [85], dans un MEB, et dans des conditions d'imagerie normales,  $V_{acc} \sim 5$  kV, la puissance du faisceau résultante est typiquement inférieure à  $10 \mu\text{W}$  (la puissance est :  $P = E_0 \cdot I_b$ ). Ceci est inférieur à la puissance nécessaire pour un chauffage extrême et le potentiel associé pour des dommages graves, mais toujours suffisant pour induire des charges thermiques de 100 K ou plus ; ont utilisé la dépendance à la température de la bande interdite de CdS (connue précédemment), puis la température du réseau local peut être déduite de la position du pic de CL et suivie en fonction du courant du faisceau. L'équation de O'Donnell et Chen est utilisée pour dériver le changement de température. Les résultantes pour l'élévation de la température locale, atteinte dans les conditions d'imagerie conventionnelles, des centaines de degré 1000 °K (figure (III. 36)).



**Figure (III. 36)** (a) Température locale dans le CdS dérivée des spectres CL en fonction de la puissance du faisceau d'électrons à différentes tensions d'accélération. (b) Température dérivée de trois morceaux de CdS à l'échelle du micron distincts en fonction de la puissance du faisceau. (c) Comparaison de la température dérivée de GaN, CdS et CdSe en fonction de la puissance du faisceau (à gauche), Spectre CL de microfils de GaN sur une plage de courants de faisceaux incidents. Les spectres proviennent d'un micro-fil de GaN supporté (a) sur du cuivre et (b) sur un film de carbone (à droite).

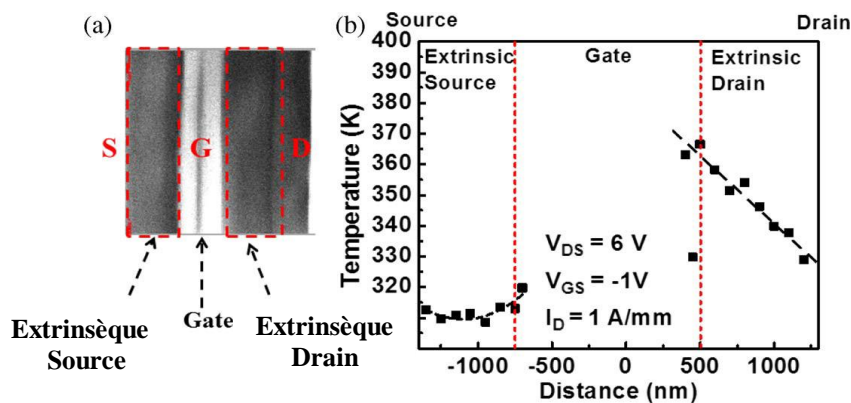
Les données de trois morceaux de CdS, deux morceaux de CdSe et deux microfils de GaN sont tracés ensemble. Dans tous les cas, l'élévation de température dérivée a été ajoutée à 293 K (température ambiante approximative) pour donner la température absolue approximative [85,86].

En raison de prédire les mécanismes physiques responsables de la dégradation de HEMT AlGaN/GaN, Ch-H Lin et al. [87,88], ont démontré l'utilité de la spectroscopie de CL à base de microscope électronique pour sonder les distributions de température à l'échelle nanométrique à l'intérieur des HEMT pendant le fonctionnement du dispositif (figure (III. 37)).



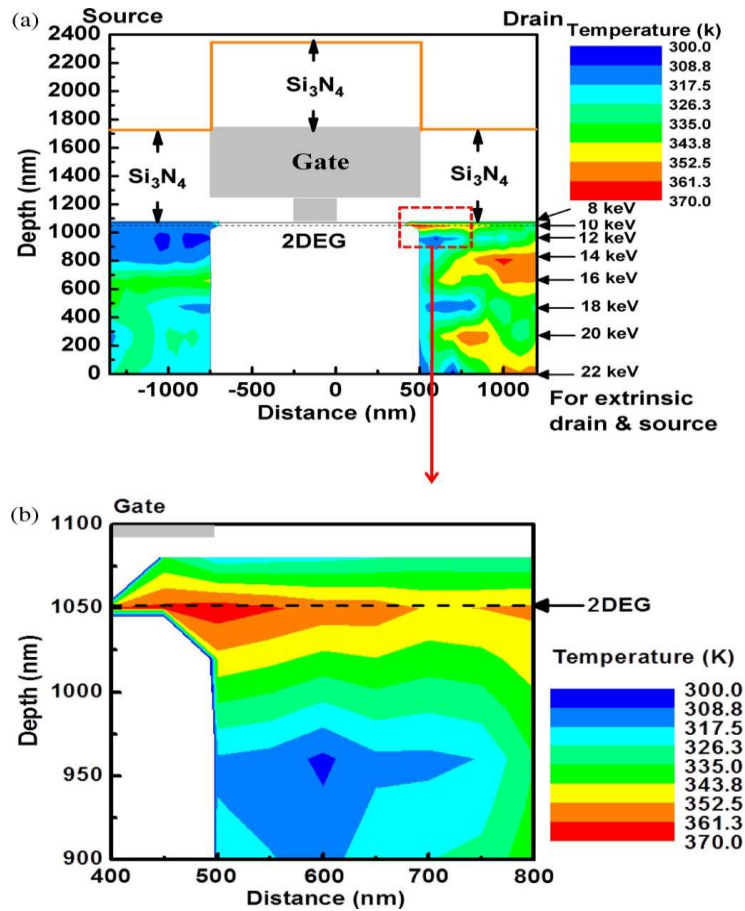
**Figure (III. 37)** (Couleur en ligne) La distribution de la température de U-08 fonctionnant à  $V_{DS} = 3,5$  V et  $V_{GS} = -2$  V. P1 est la plus proche de la grille tandis que P10 est la plus éloignée. La photo en médiane montre l'image MEB de la région source-drain mesurée [87].

Les résultats obtenus sont présentés sur la figure (III.38), la température augmente du bord du drain au bord de la grille dans la zone extrinsèque de drain. La distribution de température dans la région source extrinsèque présente une tendance similaire. En outre, la température est plus élevée dans la région de drain extrinsèque par rapport à la région de source extrinsèque.

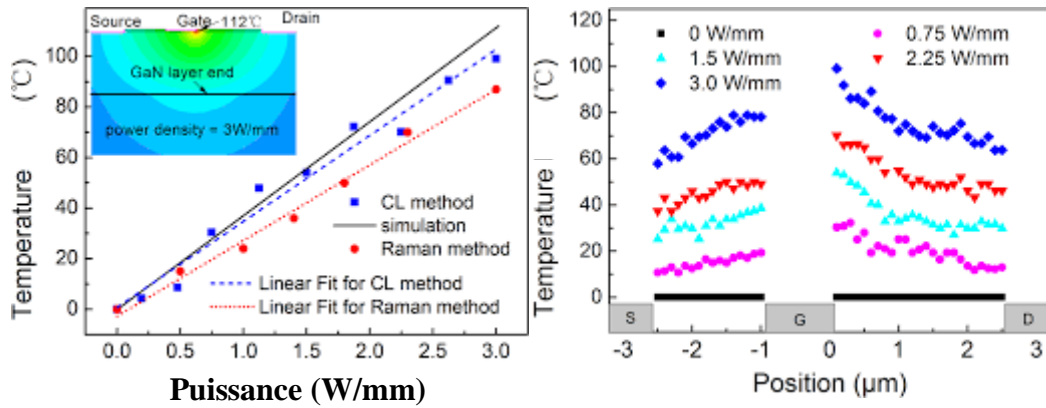


**Figure (III. 38)** Image MEB de zones de source-grille-drain de l'échantillon vierge M 01 à travers lesquelles les températures ont été mesurées. Les rectangles rouges pointillés marquent les zones de drain et de source

extrinsèques. (b) Distribution de la température à travers la zone de drain et de source extrinsèque à  $V_{DS} = 6$  V,  $V_{GS} = -1$  V, et  $I_D = 1$  A / mm avec  $E_0 = 10$  keV. Les lignes noires pointillées sont des guides pour les yeux. La température augmente de façon monotone depuis le drain jusqu'au bord de la grille [88].

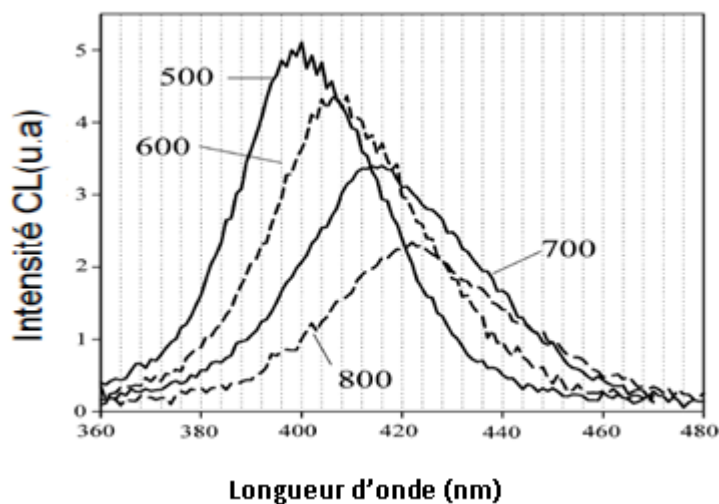


**Figure (III. 39)** Distribution transversale de la température de l'échantillon (DRCLS) ( $8 < E_b < 22$  keV) [88]. Y. Zhang et al. [89], (Measuring temperature in GaN-based high electron mobility transistors by cathodoluminescence spectroscopy), ont effectué une mesure à haute résolution de l'élévation de la température du canal dans les transistors à haute mobilité d'électrons à base de GaN (HEMT). La spectroscopie de cathodoluminescence dans le microscope électronique à balayage a été utilisée pour sonder l'élévation de température avec une résolution spatiale et une précision de plusieurs dizaines de nanomètres supérieures à  $\pm 8^\circ\text{C}$ . Ils ont également déterminé la distribution de la température et le changement de température de pointe avec la densité de puissance dans les HEMT actifs AlGaN / GaN dans les ouvertures de la source et de la grille. Les résultats mesurés concordent assez bien avec les simulations électrothermiques 2D physiques et avec la thermographie Raman (figure (III. 40)).



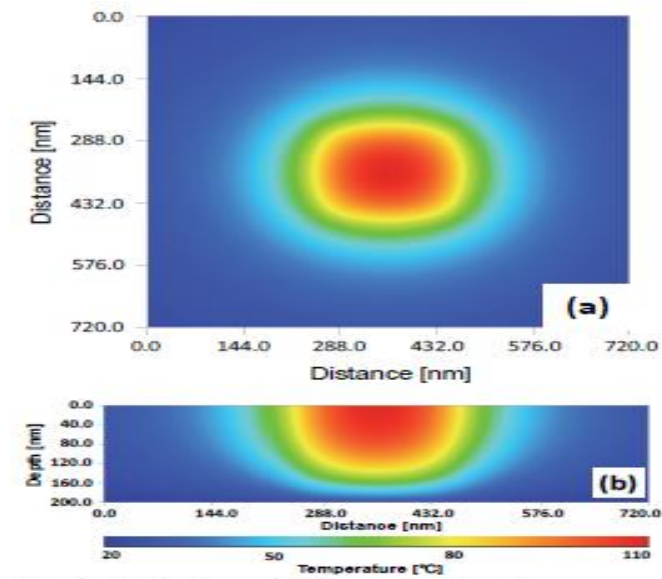
**Figure (III. 40)** Distributions de la température en fonction de la puissance. Trait noire simulation, points bleus fit de signal de la cathodoluminescence, points rouges avec la méthode de Raman [89].

Pour déterminer la température du substrat au cours de la croissance d'épitaxie par un faisceau moléculaire de nitrure de gallium, **Lee et Myers [90]** ont utilisé le microscope à cathodoluminescence (figure III.41). La détermination de l'énergie maximale du spectre CL permet une détermination non ambiguë de la température du substrat. Des problèmes de dérive et de reproductibilité de la température pendant la croissance du GaN ont été observés à l'aide de la mesure in situ du CL. La figure (III.41) montre les spectres CL recueillis à partir d'un échantillon pour les températures allant de 500°C à 800°C. La longueur d'onde centrale de chaque pic a été décalée vers une plus grande longueur d'onde lorsque la température augmente. De plus, l'intensité du CL diminue lorsque la température augmente. La longueur d'onde centrale de chaque pic a été déterminée par la méthode des moindres carrés non linéaires correspondant à la fonction Gausse-Lorentz.



**Figure (III. 41)** Spectres CL in situ à diverses températures de substrat: 500 ° C, 600 ° C, 700 ° C et 800 ° C.

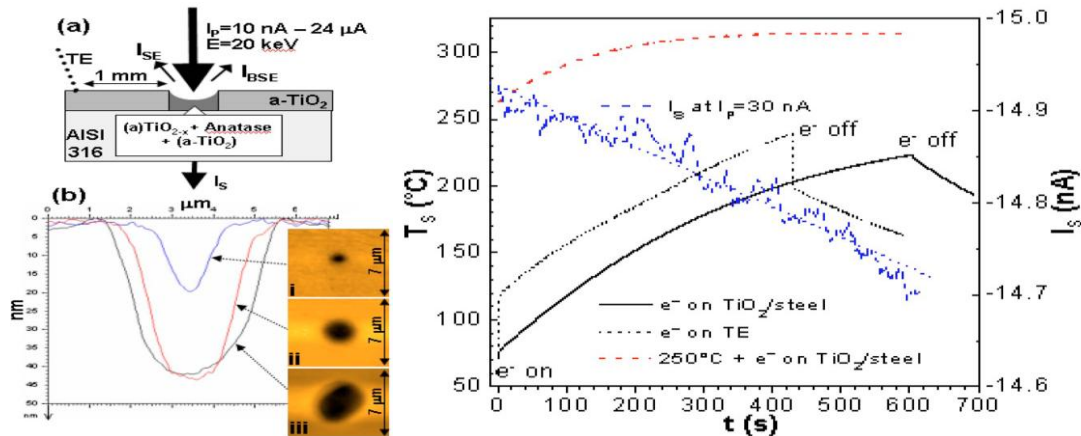
D'après **Yasuda et al. [91]**, dans un polymère, lorsque la densité de courant du faisceau devient importante dans la lithographie par faisceau d'électrons, la température du PMMA (Polyméthylmethacrylate) augmente pendant l'exposition. La distribution spatiale de la température pendant l'exposition peut être estimée en résolvant l'équation de diffusion thermique tridimensionnelle [16]. La distribution d'énergie absorbée obtenue par la simulation de Monte Carlo a été utilisée comme terme de génération de chaleur. La figure (III. 42) montre les distributions de température dans le PMMA pendant l'exposition d'électrons à une énergie d'accélération de 10 kV et l'élévation de la température résultante autour du bord du motif de PMMA est d'environ 75 ° C.



**Figure (III. 42)** Distributions de la température (a) en surface et (b) en transversale du PMMA pendant l'exposition à un bombardement électronique (la taille du motif est de 200 × 200 nm) [91].

**Kern et al. [92]**, travaillent sur la réduction et la cristallisation locales induites par faisceau d'électrons des films amorphes d'oxyde de titane. La température globale du film/substrat  $T_S$  mesurée lors de l'irradiation présentée sur la figure (III. 43), sans préchauffage du substrat la température  $T_S$  augmente régulièrement de 70 à environ 220 ° C pendant l'irradiation à 24  $\mu$ A / 600 s avec une énergie d'accélération de 20 KeV. L'expérience a été répétée en repérant directement sur le thermoélément. À l'exception des interférences entre le courant du faisceau et le circuit du thermoélément, conduisant à un décalage réversible instantané au démarrage de l'irradiation, la température  $T_S$  suit exactement le même comportement. Il a été conclu que l'irradiation entraîne un échauffement global du substrat et du film. La même irradiation provoque une élévation de température de 250 à 315 ° C lorsque le substrat est préchauffé à 250 ° C. Pour les irradiations à 250

nA, seule une très faible augmentation de  $T_S$  de quelques degrés a été observée (non représentée). L'élévation de température supplémentaire  $\Delta T$  au-dessus de la température du substrat en volume au centre d'un faisceau d'électrons stationnaire avec une tension d'accélération  $U$  et un courant de faisceau  $I$  peut être estimée par la relation de Reimer.



**Figure (III. 43)** (à gauche) (a) Représentation schématique des conditions d'irradiation. L'échantillon est monté sur l'étage de chauffage. (b) Images AFM et profils de points irradiés: (i) 10 nA / 1 s, (ii) 30 nA / 3 s, (iii) 250 nA / 300 s. (à droite) Evolution de la température globale du substrat /film  $T_S$  avec et sans préchauffage du substrat sous irradiation par un faisceau électronique à 24  $\mu$ A / 600 s (TE=thermoélément). Evolution du courant d'échantillon  $I_S$  lors de la réduction au cours de l'irradiation à  $I_p = 30$  nA [92].

**W. F. van Dorp et al. [93]**, ont fait une synthèse sur l'effet du faisceau d'électrons focalisés utilisées pour le dépôt des nanostructures, d'après eux le faisceau d'électrons pendant l'irradiation induit un échauffement, et peut jouer un rôle important au cours du dépôt. Cette température (échauffement) dépend de la densité de courant, de l'énergie de d'accélération, de la conductivité thermique du l'échantillon et de confinement des électrons diffusé. L'élévation de température à la suite d'un faisceau d'électrons dans cas spécifiques est estimée à environ de 50 ° C. En outre, elle peut conduire à un changement dans le mécanisme de dissociation. Des effets similaires sont observés dans des expériences où l'échantillon est chauffé pendant le dépôt. Si la température atteinte au cours de l'expérience la température de décomposition thermique du précurseur, la dissociation peut être induite thermiquement. Cette situation a été observée pour un certain nombre de précurseurs organométalliques. Ceci est la raison pour laquelle des densités de courant élevées sont bénéfiques pour le dépôt des nanostructures; (1) Un degré plus haut de fragmentation d'électrons induite est obtenue et (2) le chauffage se produit. Le taux de croissance latérale est affecté uniquement si la température conduit à un changement de régime de croissance.

**A. V. Krashennnikov et al. [94]**, ont résumé les effets des ions et des électrons sur les matériaux nanostructurés. Cet article de synthèse a résumé les progrès récents dans notre compréhension des

interactions des faisceaux de particules énergétiques avec des matériaux nanostructurés. Basé sur une multitude de données expérimentales et théoriques, on peut conclure que l'irradiation des nanostructures ne doit pas nécessairement que des effets indésirables sur le matériau. Comme pour les matériaux en volume, des nano-systèmes peuvent être dopés avec des atomes étrangers, et leurs propriétés peuvent être modifiées de manière contrôlable. Dans la plupart des cas examinés dans cette étude, les propriétés électroniques, magnétiques et optoélectroniques se sont révélés être très sensibles à la présence de défauts, mais l'origine de cette sensibilité est une question très triviale et intéressant. En outre, dans certaines conditions, l'exposition à des faisceaux d'électrons ou d'ions peut donner lieu à de nombreux phénomènes indésirables et inattendus tels que le recuit des défauts préexistants, l'apparition de nouvelles phases. Beaucoup de ces effets peuvent être utilisés pour l'ingénierie des différents nano-systèmes et d'adapter leurs propriétés. Tant le "top-down" et "bottom-up" des approches peuvent être réalisée.

## V. Le modèle proposé

Dans notre modèle, on a proposé une méthode hybride, Monte Carlo-Dynamique Moléculaire (MC-DM) basée sur d'autres travaux [11], lorsqu'un faisceau de (électrons) traverse un milieu constitué par un grand nombre de centres diffusants, il s'affaiblit progressivement en raison de l'élimination des particules éprouvant divers processus de collisions inélastiques et élastiques. Les collisions inélastiques sont à l'origine de la création de paires électron-trou dans un semiconducteur, qui est un processus indispensable dans la génération des signaux E.B.I.C et CL. Nous proposons un modèle collectif de pénétration diffuse des électrons dans une cible. Les calculs sont menés en utilisant des hypothèses simplificatrices considérables telles que le fait que les distributions sont fondamentalement considérées suivant une seule direction, c'est-à-dire suivant la profondeur  $z$  dans la cible [11].

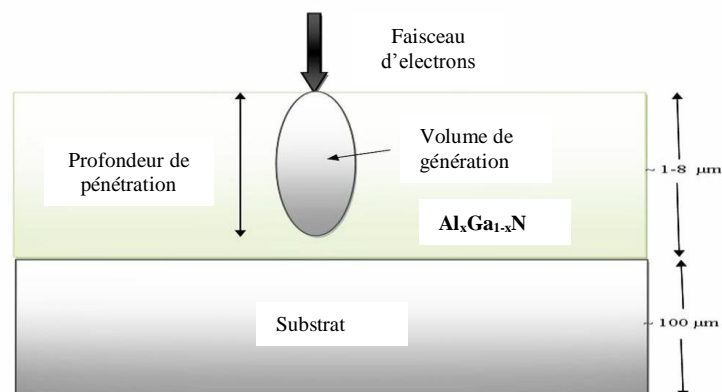
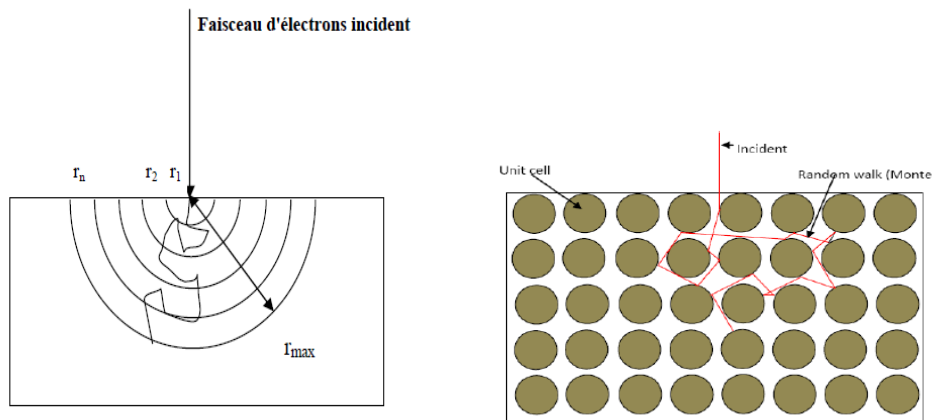


Figure (III. 44-a) Représentation schématique de la technique de caractérisation électron-matière [95].

### V.1. Modélisation de la structure de l'échantillon

La trajectoire d'un électron est simulée par une succession de lignes brisées qui correspondent aux différentes interactions élastiques. La figure (III. 44-b) représente l'allure de la trajectoire suivie par un électron à incidence normale, qui subit des interactions élastiques et une réflexion finale vers l'extérieur de l'échantillon. Pour modéliser correctement les processus d'interaction, il est important de tenir compte de la structure de l'échantillon. Au moment des tirages aléatoires la connaissance de la couche mise en jeu permet de bien choisir les libres parcours moyens et les sections efficaces différentielles qui sont la base de notre simulation. Le libre parcours moyen est défini comme la distance entre deux événements (élastique ou inélastique). Dans l'approximation de la diffusion simple, on suppose que toute particule sortie du faisceau direct est perdue. L'échantillon est divisé par plusieurs zones sous forme de demi cercle, de rayons  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$  (figure III.44).



**Figure (III. 44-b)** Représentation schématique de la méthode de MC employée dans ce modèle de calcul (rayons  $r_i$ ).

A chaque zone, une quantité de paires électron-trou ( $\Delta n$ ) est produite (générée). Cet excès de porteurs sera transformé sous forme de courant par l'application d'un champ électrique extérieur (EBIC), ou transformé en lumière par recombinaison (émission photonique cas de la cathodoluminescence CL) ou transformé en chaleur.

Concernant la cathodoluminescence, nous nous intéressons à la génération des paires électrons-trous produites pendant la collision des électrons incidents avec les atomes du matériau (marche aléatoire). Après chaque collision les électrons perdent une énergie  $E_{e-t}$  pour produire une paire électron-trou, jusqu'à ce que l'énergie tombe au-dessous de la valeur à laquelle un électron ne peut plus causer l'ionisation. Pour simplifier le calcul, deux dimensions, X et Z sont considérées. Ainsi on détermine la profondeur de pénétration comme étant le  $r_{max}$ .

$$E = E_0(1 - \gamma) \tag{III. 52}$$

$E_0$  : l'énergie de l'électron avant la pénétration.

$\gamma$  : le coefficient de la rétrodiffusion du matériau considéré.

## V.2. La diffusion des électrons (la marche aléatoire)

La méthode Monte Carlo consiste à déterminer la probabilité d'un événement à l'aide de nombres aléatoires. L'excès de phonons ( $\Delta\text{ph}$ ) est généré au cours de la collision de l'électron incident avec les atomes du matériau de la cible par l'intermédiaire de processus de marche aléatoire. Après chaque collision, l'électron perd une certaine quantité d'énergie ( $E_{\text{moy}}$ ) générant un phonon (**Figure III.36**).

La distance  $S$  s'écrit:

$$S = -\lambda \cdot \ln(R) \quad (\text{III. 53})$$

Où  $R$  est un nombre aléatoire entre 0 et 1,  $\lambda$  est le libre parcours moyen du matériau.

Pour déterminer la distance entre deux collisions successives ( $s$ ), le libre parcours moyen  $\lambda$  de l'électron dans le matériau doit être déterminé et la distance le long de la trajectoire entre les événements de diffusion élastique est donnée par le libre parcours moyen de diffusion  $\lambda$  qui peut être obtenu à partir de la section efficace totale de diffusion [9], pour ce faire, la formule suivante est utilisée :

$$\lambda = \frac{A}{\sigma \cdot N_A \cdot \rho} \quad (\text{III. 54})$$

Où  $A$  est la masse atomique,  $N_A$  est le nombre d'Avogadro,  $\rho$  est la masse volumique du matériau, et  $\sigma$  est la section efficace totale de diffusion.

La section efficace de collision élastique est calculée pour l'énergie de l'électron ( $E$ ) pour tous les éléments contenus dans la région où s'est produite la collision. La diffusion élastique des électrons par les noyaux des atomes, qui sont partiellement projetés par les électrons liés, peut être analysée en utilisant le modèle de Rutherford, ou la section efficace relativiste de diffusion totale de Rutherford, exprimée comme suit:

$$\sigma = (5,21 \cdot 10^{-21}) \left[ \frac{Z}{E} \right]^2 \left[ \frac{E + m_0 \cdot c^2}{E + 2m_0 \cdot c^2} \right]^2 \frac{4\pi}{\delta(1 + \delta)} \quad (\text{III. 55})$$

Où  $Z$  est le nombre atomique de l'atome diffusé,  $E$  est l'énergie des électrons en KeV,  $m_0$  et  $c$  sont respectivement la masse élémentaire de l'électron et la vitesse de la lumière dans le vide ( $3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ), et  $\delta$  est un paramètre donné par la relation:

$$\delta = \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (\text{III. 56})$$

### V.3. Calcul du la profondeur de pénétration dans la matière

On considère un faisceau d'électrons primaire  $E_0$  en incidence in par rapport à la normale à la surface du cristal. Chaque électron va faire l'objet d'un traitement individuel qui consiste à suivre l'évolution de son parcours jusqu'à ce qu'il subisse une interaction inélastique ; pour cela il faut considérer deux facteurs : la détermination de la position de l'électron vis-à-vis de la structure du solide et la génération des interactions liées aux distances élastique et inélastique. Après chaque interaction on devra connaître:

- la nature de l'interaction ;
- en cas de processus élastique, la nouvelle direction prise par l'électron ;
- le parcours de l'électron avant qu'il subisse un autre choc.

$$\alpha = \pi \cdot R \quad \text{et} \quad \beta = 2\pi \cdot R \quad (\text{III. 57})$$

$R$  est un nombre aléatoire entre 0 et 1, donc les coordonnées cartésiennes d'un électron "i" peuvent être exprimés:

La définition de la direction de l'électron après le  $n^{\text{ième}}$  choc élastique, permet de savoir où l'électron se trouve dans le solide c'est-à-dire connaître la position de l'électron par rapport aux couches qui le composent. A partir des coordonnées de l'électron, il est alors possible de déterminer si l'électron est ressorti du matériau et de connaître sa profondeur atteinte. Les électrons sont repérés dans une base de coordonnées sphériques. Au début de la simulation, la position de l'électron est définie par les conditions initiales  $r=0$ , l'électron aura pour coordonnées :  $(r, \theta = \varphi = 0)$  et à la  $n^{\text{ième}}$  collision élastique, les coordonnées seront  $(r_n, \alpha_n, \beta_n)$ . Nous pouvons définir la position de l'électron à la collision  $(n^{\text{ième}} + 1)$  par :

$$x_m = \sum_{i=1}^m S_i \cdot \sin \alpha_i \cdot \cos \beta_i, \quad y_m = \sum_{i=1}^m S_i \cdot \sin \alpha_i \cdot \sin \beta_i \quad \text{et} \quad z_m = \sum_{i=1}^m S_i \cdot \cos \alpha_i \quad (\text{III. 58})$$

Où  $m$  représente le nombre de pas (collisions) à l'intérieur du matériau (à partir de la surface jusqu'à ce que l'extrémité de l'énergie des électrons). Dans l'expérience SEM, un faisceau d'électrons est utilisé qui correspond à  $N$  électrons, les distances moyennes projetées à  $x$ ,  $y$ , et  $z$  coordonnées ( $S_x$ ,  $S_y$ ,  $S_z$ ) pour ces électrons est calculé comme suit:

$$S_x = \frac{[\sum_{i=1}^N x_i]}{N}, \quad S_y = \frac{[\sum_{i=1}^N y_i]}{N} \quad \text{et} \quad S_z = \frac{[\sum_{i=1}^N z_i]}{N} \quad (\text{III. 59})$$

La profondeur de pénétration maximale  $R_e$  est calculée comme suit:

$$R_z = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \quad (\text{III. 60})$$

Une fois que la trajectoire est entièrement simulée, elle est ensuite analysée pour produire les différents résultats. Il est nécessaire de spécifier que les échantillons à analyser dans le programme sont modélisés par des formes géométriques simples. Ainsi, une région est définie comme une forme géométrique. Dans cette région, la composition chimique est fixée au début de la simulation. Une région comporte donc un ou plusieurs éléments chimiques différents. Pour comparer le maximum de la profondeur de pénétration avec autres modèles, notre calcul a trois modèles ; Kanaya-Okayama, Wittry-Kyser et Everhart-Hoff [48,49,50].

#### V.4. La détermination de la concentration des porteurs minoritaires

Dans un semiconducteur soumis à une excitation extérieure, les deux processus en compétition sont la diffusion des porteurs excédentaires et leur recombinaison. Comme nous l'avons vu dans le chapitre II, les recombinaisons radiatives de porteurs libres (recombinaisons bande à bande) ont lieu à des énergies supérieures ou égales au gap du semiconducteur. Elles nécessitent la proximité d'électrons et de trous libres. Le taux de recombinaison est donc proportionnel au produit des populations hors équilibre des deux types de porteurs de charges. Ainsi, l'intensité intégrée de cathodoluminescence,  $I_{CL}$ , due aux transitions radiatives bande-à-bande à la température ambiante dépend des concentrations des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence. La modélisation de l'intensité de cathodoluminescence nécessite de connaître la concentration de porteurs minoritaires créés lors du bombardement de l'échantillon par le faisceau électronique. Le facteur de génération (c'est à dire, le nombre de paires de électron-trou généré par le faisceau d'électrons incident) est donné par [11]:

$$G = \frac{E_0}{E_i} (1 - \gamma) \quad (\text{III. 61})$$

Où  $E_0$  est l'énergie de faisceau d'électrons,  $E_i$  est l'énergie d'ionisation (c.-à-d., l'énergie requise pour la formation d'une paire électron-trou), et  $\gamma$  représente la perte d'énergie fractionnaire du faisceau d'électrons dû aux électrons rétrodiffusés. L'énergie  $E_i$  d'ionisation, est reliée au gap du matériau [9].

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

- calcul de nombre des paires ( $\Delta n_i$ ) généré dans chaque zone.
- nous introduisons la correction due à la diffusion des porteurs (e -h) (grâce au gradient de concentration).

La probabilité pour que un électron traverser une distance  $z_i$  s'écrit :

$$P \propto \exp\left(-\frac{Z_i}{L_n}\right) \quad (\text{III. 62})$$

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

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

-Calculer la surface rectangulaire  $S_i$  pour chaque zone.

La concentration dans la zone  $i$  sera :

$$C_i = \frac{\Delta n_i}{S_i} \quad (\text{III. 63})$$

### V.5. Le signal de la cathodoluminescence et d'EBIC

L'intensité de l'émission CL est calculée de la concentration de l'excès de porteurs minoritaires dans la région neutre (zone de volume). Les photons sont générés dans le GaN lorsque l'excès de porteurs recombinant radiativement. L'échantillon est divisé par plusieurs zones sous forme de demi cercle, de rayons  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$  (figure III. 44-b). A chaque zone, une quantité de paires électron-trou ( $\Delta n$ ) est produite (générée). Cet excès de porteurs sera transformé sous forme de photo-courant par l'application d'un champ électrique extérieur (cas d'EBIC Electron Beam Induced Current), ou transformé en lumière par recombinaison (émission photonique cas de la cathodoluminescence CL) et c'est notre intérêt. Une fois les concentrations de porteurs minoritaires créés lors du bombardement de l'échantillon par le faisceau électronique déterminées, il est possible de calculer l'intensité totale de la cathodoluminescence à l'aide de l'équation :

$$I_{CL} \propto \int_0^{\infty} \frac{\Delta n(z)}{\tau_n} \exp(-\alpha \cdot z) dz \quad (\text{III. 64})$$

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

Notant qu'un nombre de couches égale à dix est suffisant pour l'obtention des résultats fiables (même on a essayé jusqu'à 60 et 100 couches). Dans le programme de simulation nous supposons que toutes les porteurs générés dans chaque région sont localisés à une profondeur  $d$ , tel que :  $d = R_{\max}/2$ . Dans ce calcul nous essayons de déterminer l'allure de l'intensité de la cathodoluminescence en fonction de l'énergie d'accélération. D'après **Nouiri et al. [87]**, l'intensité de la cathodoluminescence  $I_{CL}$ , vient seulement de la recombinaison des porteurs en excès dans ces régions. En utilisant les couches proposées dans notre modèle cette intégrale devient une sommation sur le nombre de couches et on a alors:

$$\begin{aligned} I_{CL} &= \sum_{i=1}^n \Delta n_i \exp(-\alpha \cdot z_i) \\ &= \Delta n_1 \cdot \exp(-\alpha \cdot z_1) + \dots + \Delta n_n \cdot \exp(-\alpha \cdot z_n) \\ &= CL_1 + CL_2 + \dots + CL_n \end{aligned} \quad (\text{III. 65})$$

Utilisant l'équation (I.5) de chapitre I, qui décrit la dépendance de coefficient d'absorption à la température.

$$\begin{aligned}
 I_{CL} &= \sum_{i=1}^n \Delta n_i \exp(-\alpha(T) \cdot z_i) \\
 &= \Delta n_1 \cdot \exp(-\alpha(T) \cdot z_1) + \dots + \Delta n_n \cdot \exp(-\alpha(T) \cdot z_n) \\
 &= CL_1 + CL_2 + \dots + CL_n
 \end{aligned} \tag{III.66}$$

Avec

$$\alpha(T) = \alpha_0 \cdot \exp\left(\frac{h\nu - E_g(T)}{k_B T}\right), \text{ Pour } h\nu < E_g \tag{III.67a}$$

Si on tient compte de la diffusion, l'intensité de la cathodoluminescence est donnée par la relation suivante:

$$I_{CL} \propto \sum_{i=1}^n \Delta n_i \exp\left(\frac{-\alpha \cdot z_i}{L}\right) \tag{III.67b}$$

Et la dépendance de la longueur de diffusion à la température :

$$L = \sqrt{D\tau} = \sqrt{\frac{\mu(T) \cdot k_B \cdot T \cdot \tau}{e}} \tag{III.67c}$$

Avec  $\mu(T)$  est la mobilité des électrons,  $k_B$  la constante de Boltzman,  $T$  la température,  $e$  la charge élémentaire et  $t$  la durée de vie des porteurs de charge.

Et l'intensité de la cathodoluminescence (relation III.67b) devienne:

$$I_{CL} \propto \sum_{i=1}^n \Delta n_i \exp\left(\frac{-\alpha \cdot z_i}{L(T)}\right) \tag{III.67d}$$

Et pour calculer le courant EBIC nous allons considérer la relation suivante :

$$\begin{aligned}
 I_{cc} &= \sum_{i=1}^n \Delta n_i \cdot \exp\left(\frac{-z_i}{L}\right) \\
 &= \Delta n_1 \cdot \exp\left(\frac{-z_1}{L}\right) + \dots + \Delta n_i \cdot \exp\left(\frac{-z_i}{L}\right) \\
 &= I_{cc1} + I_{cc2} + \dots + I_{ccn}
 \end{aligned} \tag{III.68}$$

## V.6. Calcul de l'augmentation de la température

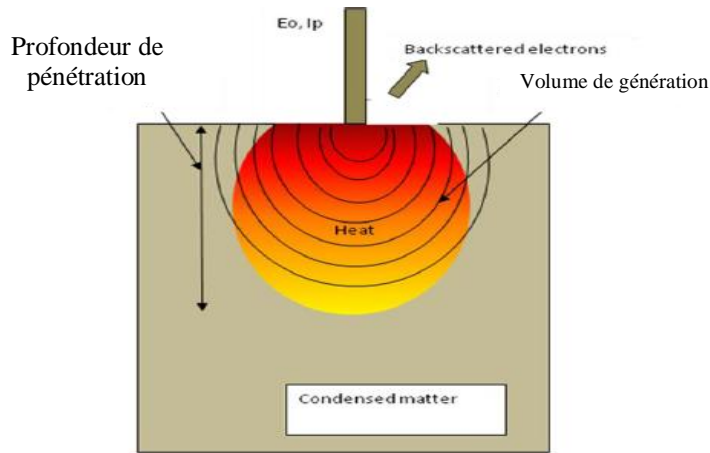
La modélisation de l'interaction d'un faisceau d'électrons avec un solide comme source de chaleur volumétrique nécessite de décrire la répartition de l'énergie du faisceau sur la surface et la perte de l'énergie le long de la pénétration

$$H = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = k \cdot A \cdot \frac{\Delta T}{x} \quad (\text{III. 69})$$

Où  $\Delta Q/\Delta t$  est la vitesse d'écoulement de la chaleur,  $k$  est la conductivité thermique,  $A$  est l'aire de la section transversale totale de la surface conductrice,  $\Delta T$  est la différence de température, et  $x$  est l'épaisseur de la surface conductrice séparant les 2 températures. Elle est définie comme la quantité de chaleur  $\Delta Q$ , transmise pendant le temps  $\Delta t$  par une épaisseur  $x$ , dans une direction normale à une surface de surface  $A$ , par unité de surface de  $A$ , due à une différence de température  $\Delta T$ , dans des conditions stables et lorsque le transfert de chaleur ne dépend que du gradient de température.

Suite à l'augmentation de température d'un matériau semiconducteur (GaN comme dans le présent travail) due a le bombardement électronique utilisé souvent dans des outils de caractérisation comme le MEB ou le MET (un gain d'énergie cinétique des électrons), les électrons de valence se déplacent vers les régions plus froides du matériau et transfèrent leur énergie aux autres atomes par de multiples collisions. La vibration atomique agite les électrons de la zone froide qui à leur tour migrent dans la zone plus chaude et le processus se poursuit de façon continue. La quantité d'énergie transmise est fonction du nombre d'électrons excités et de leur mobilité relative qui eux sont fonctions du type de matériau, des imperfections dans la maille et de la température. De même, la vibration provenant de l'agitation thermique des atomes transfert elle aussi de l'énergie à travers le matériau.

A la base de récent model amélioré de Nouri [11], en calculant l'augmentation de la temperature locale dans le nitrure de galium GaN et ses alliages. Revenant a la diffusion inélastique ou l'excitation de phonons est le mécanisme de perte d'énergie le plus fréquent. Ce type de transfert énergétique se manifeste par un chauffage de l'échantillon. Ce type de collision ne modifie pas considérablement la trajectoire des électrons, mais il est responsable de toutes les pertes énergétiques des électrons primaires.



**Figure (III. 45)** Représentation schématique du modèle [11]

Lorsqu'on écrit la loi de Fourier, on suppose implicitement que le champ de température  $T$  est connu partout dans le matériau. Cela permet ensuite de déterminer le flux de chaleur en tout point. Pour cela on va établir l'équation de la diffusion de la chaleur ou simplement l'équation de la chaleur en utilisant le principe de base de conservation de l'énergie. Dans le présent travail, On considère un solide (dans notre cas c'est le GaN) indéformable de volume  $V$ .

En général, la capacité  $C$  et la conductivité  $\lambda$  dépendent des variables de l'espace et de la température, mais dans ce présent travail, nous supposons que les propriétés physiques du solide ne dépendent que de  $x$ . La conservation de l'énergie implique que dans l'élément de volume considéré, la quantité d'énergie qui entre plus celle qui sort plus celle qui est créée par les sources internes est égale à la quantité d'énergie emmagasinée dans le volume. La chaleur emmagasinée dans le volume s'écrit :

$$\Delta Q = \iiint_V \rho \cdot C_p \cdot dT dV \quad (\text{III. 70})$$

Pour un milieu homogène, isotrope dont les coefficients (conductivité et la capacité thermique) ne dépendent pas de la température, l'expression de la température en tout point localisé par son vecteur position est donnée par l'équation de diffusion de la chaleur. Le transfert d'énergie se fait par transmission de l'énergie cinétique d'agitation thermique des particules qui ont une énergie cinétique plus grande dans les régions à température élevée vers les régions à température plus faible.

Pour déterminer l'augmentation de température, on suppose qu'après chaque collision l'électron produit une paire (é-h) et crée un phonon. Dans ce modèle, la température est considérée comme la

"température ambiante", de sorte que le défaut dues aux phonons et l'interaction phonon-phonon sont négligés. Après chaque collision, l'électron produit un phonon par l'excitation des oscillations du réseau. Selon le modèle d'Einstein, la perte d'énergie est un phonon, est calculée à partir de l'énergie thermique moyenne de l'atome  $E_{moy}$ :

$$E_{moy} = \frac{(3k_B T)}{2} \quad (III. 71)$$

$k_B$  est la constante de Boltzman, avec  $T = 300^\circ K$ .

Le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température, pour la conduction simple: Après chaque pas  $S$ , l'électron perd  $E_{e-h}$  (pour générer une paire é-h) et  $E_{moy}$  (pour générer un phonon). La diffusion de la chaleur se fait suivant l'axe du faisceau incident perpendiculaire à la surface de l'échantillon (figure III.45).

A la fin de la trajectoire des électrons, le nombre total des phonons engendrés ( $\Delta_{ph}$ ) à chaque zone peut être calculé. L'excès d'énergie de phonons ( $\Delta Q_i$ ) par unité de volume (par exemple, centimètre cube) est calculé comme suit:

$$\Delta Q_i = \frac{E_{moy} \cdot \Delta_{ph}(V_i)}{V_i} \quad (III. 72)$$

Où  $V_i$  est le volume de la zone "i". Cet excès d'énergie est transformé en une augmentation de température  $\Delta T_i$  (à chaque zone) en utilisant la relation suivante:

$$\Delta T_i = \frac{\Delta Q_i}{\rho c_p} \quad (III. 73)$$

Où  $\rho$  est la densité (masse en centimètre cube) et  $c_p$  est la chaleur spécifique.

La température réelle au niveau de chaque zone est calculée :

$$T_1 = T_0 + \Delta T_1(\text{zone (1)}) \quad (III. 74)$$

$$T_2 = T_1 + \Delta T_2(\text{zone (2)}) \quad (III. 75)$$

$$T_i = T_{j-1} + \Delta T_i(\text{zone (i)}) \quad (III. 76)$$

Où  $T_0$  est la température avant irradiation (la température ambiante).

La diffusion de la chaleur (flux de chaleur)  $\Delta H_i$  de la zone "i-1" à la zone "i" due à la conduction thermique entre différentes zones est décrite comme:

$$\Delta H_i = \frac{k \cdot a}{l} (T_{j-1} - T_j) \quad (\text{III. 77})$$

$k$  est la conductivité thermique (pour GaN,  $K=1.3 \text{ w cm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ),  $a$  est la surface de la zone (i),  $l$  est la distance entre les milieux des deux zones (i) et (i-1). ( $l$  est égal à l'épaisseur de la zone (i), parce que toutes les zones ont la même épaisseur). D'abord, nous calculons l'augmentation de température  $\Delta T_i$  en utilisant l'équation (III.76), puis nous l'employons pour calculer la différence  $(T_{i-1}-T_i)$  qui sera injectée dans l'équation. (III.77) pour calculer le flux  $\Delta H_i$  de la chaleur. Alors le nouvel excès d'énergie de phonon  $\Delta Q_i$  est calculé :

$$\Delta Q_i \cdot V_{i,\text{new}} = (\Delta Q_i \cdot V_i) + (\Delta H_i - \Delta H_{i+1}) \quad (\text{III. 78})$$

$\Delta H_i$  est la chaleur transférée à la zone (i) (entrée) et  $\Delta H_{i+1}$  est la chaleur transférée de la zone (i) (sortie). Nous comparons le nouveau  $\Delta Q_i$  avec  $\Delta Q_i$  précédent. Si les deux valeurs sont différentes (plus grand qu'une précision imposée), nous remplaçons le nouveau  $\Delta Q_i$  dans l'équation. (III.73) et un nouveau  $\Delta H_i$  sera calculé. Le procédé continue jusqu'à la nouvelle  $\Delta Q_i$  égale au  $\Delta Q_i$  précédent (plus petit que la précision imposée) dans chaque zone (convergence de calcul).

### V.6.1. L'influence de la durée de balayage (dynamique moléculaire)

En se basant sur le modèle de Nouri [11], deux approches ont été envisagées: la plus simple consistait à résoudre l'équation de la chaleur stationnaire de la température indépendante au temps. Cette approche est couramment utilisée pour estimer la hausse de température due à l'irradiation du faisceau. Le plus grand problème de l'influence de la durée de balayage est surtout le fait que les électrons pénètrent individuellement dans le matériau et que leurs temps de relaxation sont très courts comparés au temps entre deux impacts d'électrons.

Pour calculer l'influence de la durée de l'analyse, nous sommes obligés à introduire la méthode de la dynamique moléculaire. L'idée principale c'est de calculer vitesse de l'électron et le temps après chaque collision dans le matériau. L'énergie cinétique  $E_k$  d'un électron arrivé à la surface de matériau peut calculer par la relation suivante :

$$E_0 = E_k = \frac{1}{2} m_0 v_0^2 \quad (\text{III. 79})$$

Où  $E_0$  est l'énergie initiale,  $m_0$  est la masse de l'électron et  $v_0$  est la vitesse de l'électron à la surface. Après chaque collision, la vitesse de l'électron à la position 'j' ( $v_j$ ) peut être calculée par la relation suivante :

$$v_j = \sqrt{\frac{2(E_{j-1} - E_j)}{m_0}} \quad (\text{III. 80})$$

Où  $E_j$  et  $E_{j-1}$  représentent les énergies des électrons à "j-1" et des positions «j» successivement. Selon l'équation (III.80), la distance entre deux collisions est  $S_j$ . Avec une hypothèse que le mouvement entre deux collisions est rectiligne (avec une vitesse constante), la relation suivante peut être établie:

$$S_j = v_j t_j \quad (\text{III. 81})$$

Où  $t_j$  est la durée entre deux collisions (j et j-1) à la fin de la trajectoire d'électrons, le temps de dispersion totale (t) est calculé comme suit:

$$t = \sum_{j=1}^m t_j \quad (\text{III. 82})$$

Où m représente le nombre d'étapes à l'intérieur du matériau. Enfin, le nombre de photons ( $\Delta_{ph}$ ) peut être estimé en multipliant par un temps de fraction  $t_f$ :

$$t_f = \frac{\text{temps de balayage}}{\text{temps de diffusion}} \quad (\text{III. 83})$$

L'équation (III.73) devient:

$$\Delta T_i = \frac{\Delta Q_i}{\rho c_p} t_f \quad (\text{III. 84})$$

Où k désigne la conductivité thermique.

### **V.7.Programmation**

Au départ de la simulation, l'ordinateur calcule, à partir du tirage de deux nombres aléatoires, les distances élastiques et inélastiques. Cette opération correspond en fait à la simulation du premier événement de l'électron sur la surface. En les comparant, le programme détermine s'il y a eu une interaction élastique ou inélastique. Si l'impact est inélastique, l'électron est définitivement perdu. Sinon, un tirage des angles après l'interaction a lieu. Pour l'angle  $q$ , c'est-à-dire l'angle par rapport à

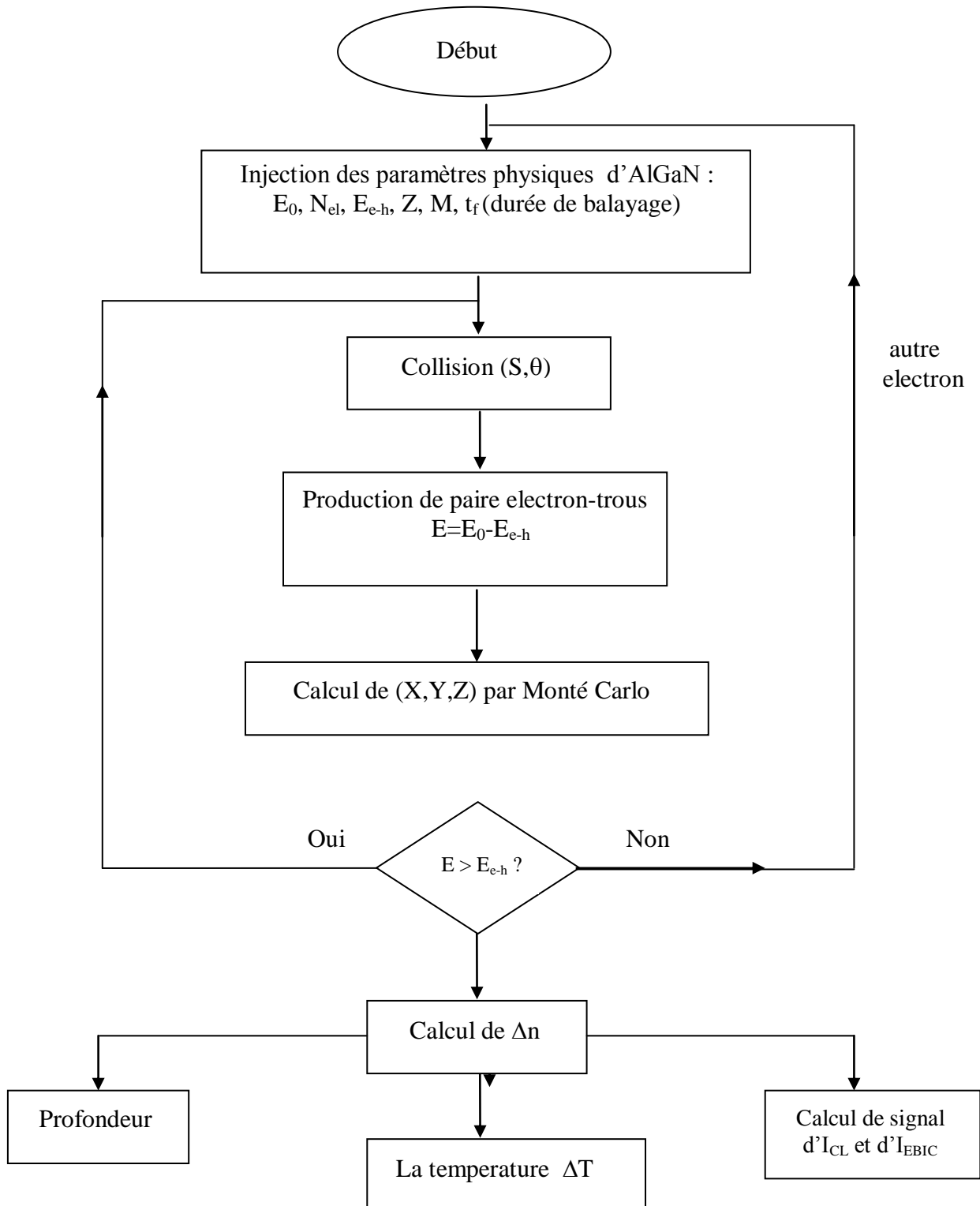
la normale à la surface. Ensuite, si la profondeur est positive l'électron peut subir une autre interaction élastique ou inélastique dans le matériau. Sinon l'électron ressort de la surface et est détecté ou pas par l'analyseur. Au début de ce présent travail, j'ai travaillé sur un programme de MC déjà existant en langage fortran. Nous avons réfléchi à le faire évoluer tout en conservant des parties déjà mises en place. Ce programme de simulation a pour objectifs de calculer la trajectoire des électrons dans un échantillon semiconducteur c'est le GaN (niture de Gallium), calculer l'élévation de la temperature de l'échantillon pendant le bombardement électronique (MEB par exemple) et la cathodoluminescence. Ces trajectoires sont représentés dans une projection sur le plan (x,z) normal à la surface (x,y) de la cible et contient le faisceau d'électrons incident. L'impacte peut être normal ou oblique dans le plan (x,z) mais dans nos calculs on constate qu'il est normal.

### **V.7.1. Exécution et Rendement d'un programme MC-Dynamique moléculaire(MC-DM)**

Ce programme permet d'activer et d'exécuter la simulation MC– DM que l'on a mis au point. Pour l'exécuter il faut fournir des paramètres d'entrée la composition de l'échantillon, la géométrie de surface, les éléments présents dans le matériau, l'énergie, l'angle d'incidence et le nombre d'électrons incidents ainsi que le parcours moyens inélastique  $\lambda$ .

Notre modèle MC est basé sur l'algorithme suivant :

1. On prend un électron d'énergie E.
2. On donne la valeur du germe n (valeur initiale) et on génère le un nombre aléatoire  $R[0,1]$ .
3. Si  $R = 0$  on génère un autre nombre, sinon on calcul le vole libre  $S = -\lambda \ln(R)$  et l'angle aléatoire  $\theta$ .
4. On détermine la position (x,y).(x = S sin  $\theta$  et y = S cos  $\theta$ ).
5. On Calcule la variation d'énergie (la perte d'énergie)
6. Si ( $E > E_{c-h}$ ) l'essai est accepté alors il y a formation d'une paire électron-trou (et on revient à l'étape 2). Sinon on refuse l'essai et on retourne à l'étape 1(choie d'un autre électron).
7. On calcul la profondeur de pénétration, et par la suite l'intensité  $I_{CL}$ ,  $I_{EBIC}$  et l'augmentation temperature.
8. Affichage des résultats.



## **Conclusion**

Ce chapitre a d'abord traité la modélisation de l'interaction electron matière ainsi des notions théoriques sur la simulation de trajectoires d'électrons dans un solide. Ceci a permis de présenter toutes les étapes nécessaires à l'élaboration d'un programme permettant la simulation de trajectoires d'électrons. Utilise différents modèles physiques pour simuler l'interaction avec la matière de l'électron accélère. Un avantage important des simulations est celui que les différents effets physiques qui sont simultanément présents dans certains systèmes peuvent être isolés, et par conséquence cette séparation fourni bien une meilleure compréhension. Si l'étude des phonons prend une part importante dans la physique de la matière condensée, c'est qu'ils jouent un rôle important dans un grand nombre de propriétés des solides dont : La capacité calorifique ou capacité à échanger la chaleur ; la conductivité thermique, ou capacité à conduire la chaleur ; la conductivité électrique, ou capacité à conduire le courant. Les vibrations du réseau peuvent jouer un rôle dans la réponse d'un solide en présence d'une radiation (électrons, X, visible, ...etc). Les quelques exemples présentes démontrent la variété des applications où un programme de Monte Carlo permet de meilleures analyses. Que ce soit pour comparer les résultats expérimentaux ou tout simplement pour établir à l'avance les conditions optimales d'observations.

### Références bibliographiques du chapitre III

- [1] D.F. Kyser and K.Murata, "Quantitative electron microprobe analysis of thin films on substrates", IBM J. of Research and Development, 18 (4), pp.352-363, (1974).
- [2] R.J. Hawryluk, A.M. Hawryluk and H.I. Smith, "Energy dissipation in a thin polymer film by electron beam scattering", J. Appl. Phys. 45 (6), pp.2551-2566, (1974).
- [3] M. Hatzakis, C.H. Ting and N.S. Viswanathan, "Fundamental aspects of electron beam exposure of polymeric resist system", Proceed. of 6-th Int. Conf. on Electron and Ion Beam Science and Technol. Electrochem Soc., R.Bakish Ed., Princeton, N.J, pp.542-579 (1974).
- [4] I. Adesida, T. E. Everhart, and R. Shimizu, "High resolution electron-beam lithography on thin films", Journal of Vacuum Science & Technology, 16(6), pp.1743-1748, (1979).
- [5] K. Vutova and G. Mladenov, "Modelling of exposure and development processes in electron and ion lithography", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2, pp.239-254 (1994).
- [6] H. Bethe, and W. Heitler, 1934, "On the Stopping of Fast Particles and on the Creation of Positive Electrons," in Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 146, 83(1934).
- [7] R.F. Egerton, P. Li and M. Malac, "Radiation damage in the TEM and SEM", Micron 35, pp.399-409 (2004).
- [8] R.F. Egerton, "Electron energy-loss spectroscopy in the TEM", Rep. Prog. Phys. 72 (2009) 016502.
- [9] A. Nouiri, "Theoretical calculation of cathodoluminescence. Influence of surface and bulk physical paramaters: Aplication at p-GaAs", Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Constantine (2000).
- [10] D. Benoit et al. , "Microanalyse et Microscopie Électronique à Balayage", École d'été de St-Martin-d'Hères (1978).
- [11] A. Nouiri, "Thermal Effect Behavior of Materials under Scanning Electron Microscopy. Monte Carlo and Molecular Dynamics Hybrid Model", Research & Reviews: Journal of Material Sciences, 2(4), 1-9(2014).
- [12] F. Miculescu, I. Jepu, C. Porosnicu, C.P. Lungu, M. Miculescu and B. Burhala, "A study on the infleunce of the primary electron beam on nanodimensional layers analysis", Digest Journal of Nanomaterials and Bio-structures Vol. 6, No 1, p. 335-345 (2011).
- [13] R. Aouati, "Etude de l'interaction électron-matière des nanostructures de l'arséniure de gallium", These de doctorat, Université de Constantine (2011).

- [14] S.C. Jain, M. Willander, J. Narayan and R.V. Overstraeten, "III-nitrides: Growth, characterization, and properties", J. Appl. Phys., Vol. 87, No. 3, (2000).
- [15] B.Sermage et G.Durafforg, "Détermination par cathodoluminescence, de la bande interdite de quelques composés", journal de physique Colloque C3, supplément au n°4, Tome 35, (1974), page C3-289.
- [16] D. Abou-Ras, N. Schäfer, N. Baldaz, S. Brunken, and C. Boit, "Electron-beam-induced current measurements with applied bias provide insight to locally resolved acceptor concentrations at p-n junctions", AIP Advances 5, 077191 (2015).
- [17] E. Rutherford, The scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  particles by matter and the structure of the atom. Phil. Mag., 21:669 (1911).
- [18] D.C. Joy, "Monte Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis", New York: Oxford University Press (1995).
- [19] H. Bichsel, "Straggling in thin silicon detectors", Rev. Mod. Phys. 60, 663 (1988).
- [20] B. Latour, "Contribution à l'étude du transport d'énergie dans la matière condensée: phonons, électrons et photons", These de doctorat de l'université de Paris-Saclay (2015).
- [21] T.L. Bergman et al., "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", John Wiley & Sons, Inc. (2011).
- [22] V. Jean, "Modélisation du transport de phonons dans les semi-conducteurs nanostructurées", These de doctorat de l'université de Lorraine (2014).
- [23] P. Roux, "Cours Thermique", (2006).
- [24] J.C. Chevrier, "Transfert de chaleur par conduction", Ecole des Mines, Nancy (1979).
- [25] A. Bouvenot, "Transferts de chaleur", Masson, (1980).
- [26] D.G. Cahill et al., "Nanoscale thermal transport. II. 2003-2012", Appl. Phys. Rev. 1, 011305 (2014).
- [27] S. Volz, "Thermal Nano-systems and Nano materials", Springer-Verlag (2009).
- [28] C. Kittel, "Physique de l'état solide", 5th, Paris, Dunod (1983).
- [29] S. Bourdreux, "Capacités thermiques : Description, interprétation microscopique", Agrégation de Physique Université de Blaise Pascal - Clermont-Ferrand, (2004).
- [30] A. Perrenoud, "Température, Chaleur", Haute Ecole d'ingénieur et de Gestion du Canton de Vaud (2008).
- [31] N. Zuckerman and J.R. Lukes, "Atomistic visualization of ballistic phonon transport", Proceedings of HT2007 (2007), ASME-JSME Thermal Engineering Summer Heat Transfer Conference July 8-12, Vancouver, British Columbia, Canada (2007).

- [32] M. X. Gu, Chang Q. Sun, Z. Chen, T.C.A. Yeung, S. Li, C. M. Tan, and V. Nosik, "Size, temperature, and bond nature dependence of elasticity and its derivatives on extensibility, Debye temperature, and heat capacity of nanostructures, *Physical Review B* 75, 125403 (2007).
- [33] J.S. Heron, "Transport des phonons à l'échelle du nanomètre" these de doctorat université Josèphe Fourier (2009).
- [34] A. Jagannathan, "Initiation à la physique des solides", L3 Physique et Applications, Université Paris-Sud, (2007).
- [35] D. Drouin, "Contributions à l'avancement de technique de caractérisation de semiconducteurs au microscope électronique à balayage", these de doctorat de l'université de Sherbrooke (Québec), Canada (1998).
- [36] K Binder, "Applications of Monte Carlo methods to statistical physics", *Rep. Prog. Phys.* 60, pp.487-559 (1997).
- [37] M. Green, "A Monte Carlo Calculation of the Spatial Distribution of Characteristic X-ray Production in a Solid Target", *Proceedings of the Physical Society*, Volume 82, Number 2, (1963).
- [38] Z.-J. Ding and R. Shimizu, "A Monte Carlo Modeling of Electron Interaction with Solids Including Cascade Secondary Electron Production", *Scanning* Vol. 18, 2 (1996).
- [39] P. Hovington, D. Drouin, R. Gauvin, D. C. Joy and N. Evans, "CASINO: A new Monte Carlo code in C language for electron beam interactions-part III: Stopping power at low energies", *Scanning* Vol. 19, pp. 29-35 (1997).
- [40] D.C. Joy, "An Introduction to Monte Carlo simulations", *Scanning microscopy*, Vol. 5, No. 2, pp.329-337 (1991).
- [41] M. Kotera, "Monte Carlo simulation of 1–10-KeV electron scattering in a gold target", *J. Appl. Phys.* 52, 997 (1981).
- [42] R. Shimizu and K. Murata, "Monte Carlo calculations of the electron sample interactions in the Scanning Electron Microscope", *J. Appl. Phys.* 42, 387 (1971).
- [43] D. Drouin, A. R. Couture, D. Joly, X. Tastet, V. Aimez and R. Gauvin, "CASINO V2.42-A Fast and Easy-to-use Modeling Tool for Scanning Electron Microscopy and Microanalysis Users", *Scanning* Vol. 29, 3 (2007).
- [44] D.P. Landau and K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", Cambridge University Press.
- [45] E. Napchan, "Electron and photon-matter interaction: Energy dissipation and injection level. *Revue de physique appliqué colloque C6, Supplément au n06, Tome 24* (1989).
- [46] G.D. Archard, "Back Scattering of Electrons", *J. Appl. Phys* 32, 1505 (1961).

- [47] T. E. Everhart, "Simple Theory Concerning the Reflection of Electrons from Solids", *J. Appl. Phys* 31, 1483 (1960).
- [48] D.B. Wittry and D.F. Kyser, "Measurement of diffusion lengths in direct-gap semiconductors by electron-beam excitation", *J. Appl. Phys.* 38, pp.375-382 (1967).
- [49] T. Everhart, and P. Hoff, "Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials", *J. Appl. Phys.* 42, pp.5837-5846 (1971).
- [50] K. Kanaya and S. Okayama, "Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 5, 43 (1972).
- [51] D. B. Holt and E. Napchan, "Quantitation of SEM EBIC and CL signals using Monte Carlo electron-trajectory simulations" , *Scanning*, vol. 16, no. 2, pp.78-86 (1994).
- [52] K. Fleischer, M. Toth, M. R. Phillips, J. Zou, G. Li, and S. J. Chua, Depth profiling of GaN by cathodoluminescence microanalysis, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 74, No. 8, 22 (1999).
- [53] J. Barjon, J. Brault, B. Daudin, D. Jalabert, and B. Sieber, "Cathodoluminescence study of carrier diffusion in AlGaIn", *J. Appl. Phys.*, Vol. 94, No. 4, (2003).
- [54] S. Achour, "Cathodoluminescence determination of the temperature rise in CdS under an electron beam spot", *Phil. Mag. B*, 62, 3, P.329 (1990).
- [55] H. Kurz, L.A. Lompri and J.M. Liu, "Fundamentals of pulsed laser irradiation of silicon", *Journal de physique Colloque C5*, supplement au n10, Tome 44, (1983).
- [56] J. A. Van Vechten and A. D. Compaan, "Plasma Annealing State of Semiconductors; Plasmon Condensation to a Superconductivity-Like State at 1000K?" ,*Sol. State Commun.* 39, 867 (1981).
- [57] C. Meerschman, " Caractérisation de couches GaAs épitaxiales et de leurs dislocations", *These de doctorat*, université des sciences et techniques de Lille (1990).
- [58] N. Belabed, " L'effet de la température dans la technique Cathodoluminescence par la méthode Monte Carlo", *These de magister*, Université de Constantine (2006).
- [59] A. Nouri, A. Djemel and R-J. Tarento, *Phys. Chem. News* 13, pp.107-109 (2003).
- [60] A. Djemel, S. Kouissa and R.J. Tarento, "Temperature dependence of luminescent centre in cathodoluminescence *Physics Procedia* 2, pp.845-851 (2009).
- [61] J.M. Fontaine, "contribution of scanning auger microscopy to electron beam damage study", *Conference on scanning electron microscopy Dearborn, MI (USA)*, pp.17-22 (1983).
- [62] S.J. Randolph, "Experimental, Theoretical, and Device Application Development of Nanoscale Focused Electron- Beam-Induced Deposition", *these de doctorat de l'université de Tennessee*, Knoxville, USA (2005).
- [63] A. Nouri, S. Chaguetmi and N. Belabed, " Monte Carlo model of the temperature rise at a GaAs surface under an electron beam", *Surface and interface analysis*, 38(7), pp.1153-1157(2006).

- [64] R. Castaing, Application des Sondes Electroniques à une Méthode d'Analyse Ponctuelle Chimique et Cristallographique, these de doctorat de l'université de Paris (1951).
- [65] J. Vine and P.A. Einstein: "Heating Effects of an Electron Beam Impinging on a Solid Surface, Allowing for Penetration", Proc. IEEE, 111, n° 5, pp.921-930 (1964).
- [66] L.G. Pittaway, "The Temperature Distribution in Thin Foil and Semi-Infinite Targets Bombarded by an Electron beam" Brit. J. Appl. Phys, 15, pp.967-982 (1964).
- [67] L.F.Vassamillet and V.E. Caldwell, "Electron-probe microanalysis of alkali metals in glasses", Journal of Applied Physics, 40, pp.1637-1643 (1969).
- [68] B.G. Baker and B.A. Sexton, "Electron Beam Effects in Auger Analysis of Physisorbed Xenon", Surface. Sci. 52, pp.353-364 (1975).
- [69] K. Roll, "The Temperature Distribution in a Thin Metal Film Exposed to an Electron Beam", Appl. Surf. Sci. 5 n° 4, pp. 388-397 (1980).
- [70] Y.Talmon and E.L. Thomas, "Electron beam heating temperature profiles in moderately thick cold stage STEM/SEM specimens", Journal of Microscopy, 113(1), pp.69-75 (1978).
- [71] C. Roussel, J.P. Jadot, B. Akamatsu and P. Henoc, " Calcul de l'énergie déposée et analyse de la cinétique d'échauffement dans ZnTe et MgZnTe sous bombardement électronique pulsé", Revue Phys. Appl. 19, pp.231-239 (1984).
- [72] A. Meldrum L.M. Wang, and R.C. Ewing, " Electron-irradiation-induced phase segregation in crystalline and amorphous apatite: A TEM study", American Mineralogist, Volume 82, pp. 858-869 (1997).
- [73] P.B. Mirkarimi, D.G. Stearns, S.L. Baker, J.W. Elmer, D.W. Sweeney and E. M. Gullikson, "Method for repairing Mo/Si multilayer thin film phase defects in reticles for extreme ultraviolet lithography" Journal of applied physics, 91(1), pp.81-89 (2002).
- [74] D. Chu, W.K. Wong, Kenneth E. Goodson, R. Fabian W. Pease , "Transient temperature measurements of resist heating", J. Vac. Sci. Technol. B, Vol. 21, No. 6, (2003).
- [75] S. J. b. Reed, "Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology", second edit., Cambridge University Press (2005).
- [76] S.J. Randolph, J.D. Fowlkes, and P.D. Rack, "Effects of heat generation during electron-beam-induced deposition of nanostructures", Journal of applied physics, 97(12), 124312(2005).
- [77] M. Weber, "Scattering of non-relativistic electrons in tip structures", Journal of Physics D: Applied Physics, 27(7), 1363 (1994).
- [78] J. Shan, K. Min and A. Nouri, "Thermal effects of Scanning Electron Microscopy on He diffusion in apatite: Implications for (U-Th)/He dating", Chemical Geology, 345, 113-118 (2013).

- [79] T. Tokunaga, T. Narushima, T. Yonezawa, T. Sudo, S. Okubo, S. Komatsubara, K. Sasaki and T. Yamamoto, "Temperature distributions of electron beam-irradiated samples by scanning electron microscopy", *Journal of Microscopy Royal Microscopical Society*, 248, 228–233 (2012).
- [80] M.J. Stock, M.C.S. Humphreys, V.C. Smith, R.D. Johnson, D.M. Pyle and EIMF, "New constraints on electron-beam induced halogen migration in apatite", *American Mineralogist*, Volume 100, pp. 281-293 (2015).
- [81] D. Kenieche, "Etude théorique et pratique de la cathodoluminescence en vue de la détermination de l'influence des défauts dans les semiconducteurs II-VI" These de doctorat, Université de Constantine (2016).
- [82] Y. Ding, Y. Liu, S. Niu, W. Wu, and Z. L. Wang, "Pyroelectric-field driven defects diffusion along c-axis in ZnO nano-belts under high-energy electron beam irradiation", *J. Appl. Phys.* 116, 154304 (2014).
- [83] Y.Y. Loginov, P.D. Brown and N. Thompson", TEM Study of Sub-Threshold Electron Irradiation Damage in II–VI Compounds", *Phys. Status Solidi A* 126, 63 (1991).
- [84] I. Utke, T. Bret, D. Laub, P. Buffat, L. Scandella, Hoffmann, "Thermal effects during focused electron beam induced deposition of nano-composite magnetic-cobalt-containing tips", *Microelectronic Engineering* 73–74, pp.553-558 (2004).
- [85] M. Caldwell, B. Haynor, S. Aloni, D.F. Ogletree, H.-S.P. Wong, J.J. Urban, D.J. Milliron, "Spectroscopic Evidence for Exceptional Thermal Contribution to Electron-Beam Induced Fragmentation", *J. Phys. Chem. C*. 114, (2010).
- [86] M.A. Caldwell, "Colloidal nano-particles for phase change memory applications", these PhD de l'université de Stanford (2011).
- [87] C.-H. Lin, T. A. Merz, D. R. Douth, M. J. Hetzer, J. Joh, J. A. del Alamo, U. K. Mishra, and L. J. Brillson, "Nanoscale mapping of temperature and defect evolution inside operating AlGaIn/GaN high electron mobility transistors", *Appl. Phys. Lett.* 95, 033510 (2009).
- [88] C.-H. Lin, T. A. Merz, D. R. Douth, J. Joh, J.A. del Alamo, U.K. Mishra and L.J. Brillson "Strain and Temperature Dependence of Defect Formation at AlGaIn/GaN High-Electron-Mobility Transistors on a Nanometer Scale", *IEEE transactions on Devices*, vol. 59, N°10 (2012).
- [89] Y. Zhang, Sh. Feng, L. Wang, Y. Ji, X. Han, L. Shi and Y. Zhao, "Measuring temperature in GaN-based high electron mobility transistors by cathodoluminescence spectroscopy", *IOP* (2015).
- [90] K. Lee and T.H. Myers, "The use of Cathodoluminescence during Molecular Beam Epitaxy Growth of Gallium Nitride to Determine Substrate Temperature", *Journal of Electronic materials*, Vol. 36, N°. 4, (2007).

- [91] M. Yasuda, K. Tada and M. Kotera, "Multiphysics Simulation of Nanopatterning in Electron Beam Lithography", *J. Photopolym. Sci. Technol.*, Vol. 29, N<sup>o</sup>. 5, (2016).
- [92] P. Kern, C. Jäggi, I. Utke, V. Friedli, and J. Michler, "Local electron beam induced reduction and crystallization of amorphous titania films". *Appl. Phys. Lett.* 89, 021902 (2006).
- [93] W.F. van Dorp and C. W. Hagen, "A critical literature review of focused electron beam induced deposition", *J. Appl. Phys.* 104, 081301 (2008).
- [94] A. V. Krasheninnikov and K. Nordlund, "Ion and electron irradiation-induced effects in nanostructured materials", *J. Appl. Phys.* 107, 071301(2010).
- [95] A. Nouri, L. Leghrib, R. Aouati, "Characterization of GaN nanostructures by electron beam techniques. Calculation of thermal effect", *Global Journal on Advances in Pure & Applied Sciences* ,06, pp 08-17 (2015).
- [96] L. Leghrib and A. Nouri, "Local temperature rise during the electron beam characterization .Calculation model for the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  at low dimensions", *Materials Science-Poland*, 36(1), pp. 51-55 (2018).

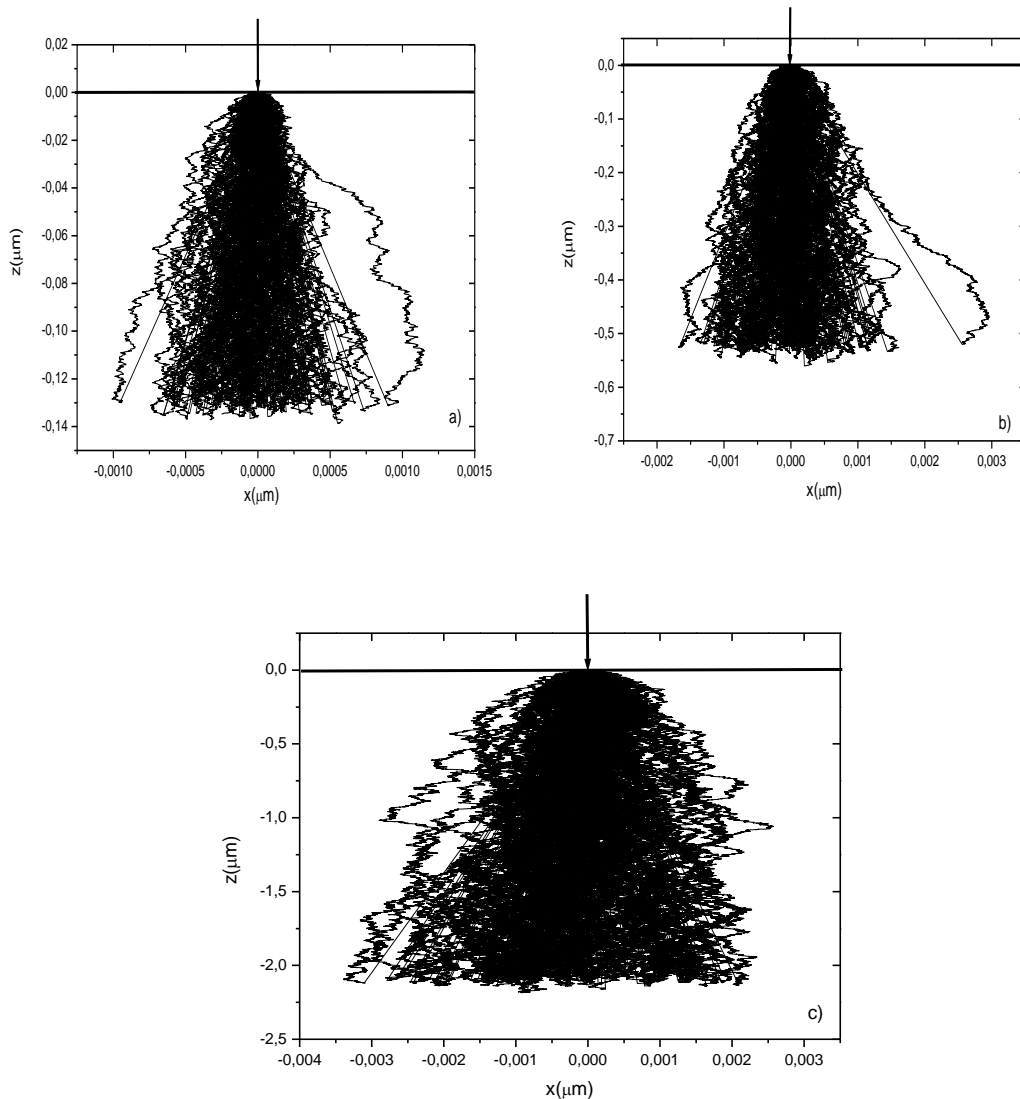
# **Chapitre IV**

## **Résultats et discussions**

Ce chapitre traite de plusieurs exemples représentatifs des résultats de simulation obtenus par le modèle développé. Tout d'abord, la détermination quantitative des paramètres des matériaux nécessite d'un calcul fiable de signal cathodoluminescence ( $I_{CL}$ ) et le courant induit par faisceau électronique ( $I_{CC}$ ) en fonction des paramètres de faisceau électronique. Mais le bombardement par un faisceau d'électrons d'un matériau semiconducteurs (comme par exemple le GaN et ses alliages dans notre cas) augmente la température de ce matériau, cette augmentation de température influe sur les propriétés du matériau généralement, et notamment sur les propriétés optoélectroniques. On présentera les résultats obtenus de calcul des trajectoires des électrons, la profondeur de pénétration  $R_e$  et le volume de génération  $V_{tot}$  sous l'influence de différents paramètres du faisceau ( $I_p$ ,  $E_0$ ,  $t$ ) et d'autres paramètres intrinsèques comme la longueur de diffusion  $L_n$ , le coefficient d'absorption  $\alpha$  et la fraction molaire  $x$  (%) et on étudiera l'influence de tous ces paramètres sur le signal CL dans le GaN et ses alliages. On présentera par la suite les résultats de calcul concernant la répartition de la température due au bombardement du faisceau d'électrons suivant la profondeur de pénétration, pour différentes intensités incidentes et une plage d'énergies d'accélération ainsi pour différentes durées de bombardement utilisées généralement dans des outils de caractérisation comme le MEB. Une fois la valeur de l'élévation de la température est déterminée, on tentera de voir l'influence de la température sur quelques propriétés extrinsèques comme par exemple la longueur de diffusion  $L_n$ , la mobilité électronique  $\mu_n$  (indice  $n$  pour les électrons,  $p$  pour les trous) la conductivité thermique  $\kappa$ , l'énergie de gap  $E_g$ .

### I. Trajectoire des électrons

Quand un flux d'électrons pénètre dans un matériau solide, les électrons peuvent être subit une diffusion élastique ou inélastique. La diffusion élastique réalise un faisceau d'électrons pour le dévier de sa direction initiale, ce qui entraîne la diffusion des électrons à travers le matériau. Les trajectoires des électrons dans un matériau ayant un numéro atomique élevé ont tendance d'être dévié de leur direction d'origine plus rapidement, la profondeur de pénétration étant réduite [1].

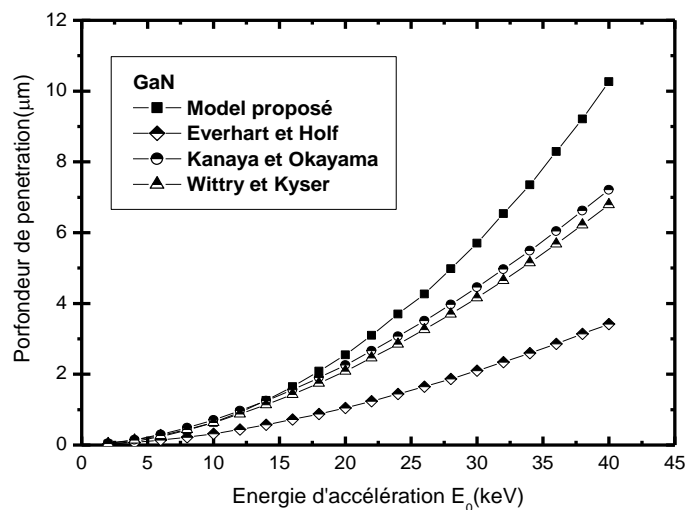


**Figure (IV. 1)** Les trajectoires des 100 électrons pénétrants dans le GaN pour :a)  $E_0 = 5$  keV, b)  $E_0 = 10$  keV, c)  $E_0 = 20$  keV respectivement.

La simulation présentée sur la figure IV. 1 modélise les trajectoires des 100 électrons dans un échantillon de GaN. On remarque que les trajectoires maximales s'arrêtent à environ 130 nm, pour une énergie  $E_0 = 5$  keV et pour une énergie  $E_0 = 10$  keV les trajectoires maximales s'arrêtent à environ 500 nm, alors que celles obtenues pour une énergie  $E_0 = 20$  keV vont jusqu'à 2 000 nm. L'utilité d'un programme basé sur le modèle Monte Carlo est justifiée par la possibilité d'effectuer une simulation complète pour les chemins des électrons. On peut remarquer facilement que la trajectoire de l'électron est aléatoire, et une dépendance de la trajectoire et de volume de génération à l'énergie d'accélération des électrons. Ainsi le volume de génération prend une forme de poire. Dans des études précédentes la trajectoire des électrons a été bien éclaircie [1,2,3].

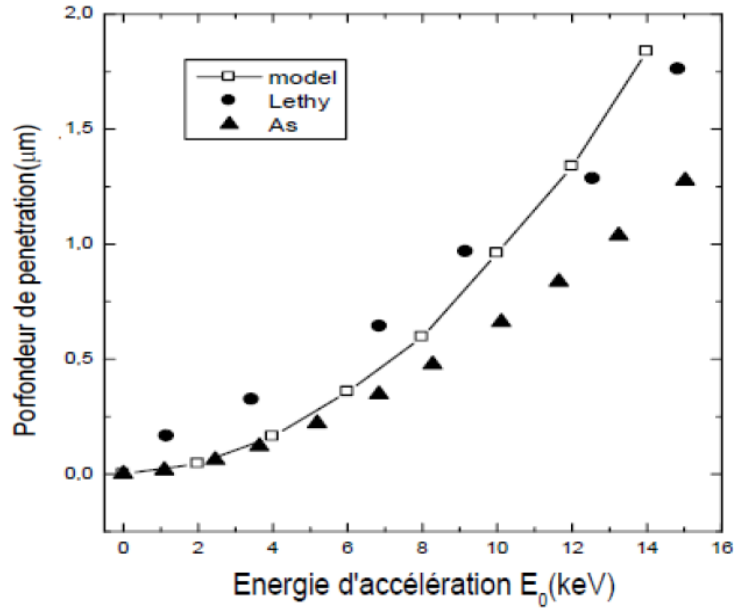
## II. La profondeur de pénétration

La puissance du faisceau d'électrons pénétrant est liée à la tension d'accélération et la densité du matériau traité. Une tension trop élevée provoque une pénétration plus profonde, et le matériau plus dense réduit la profondeur de pénétration. Ces courbes montrent la profondeur de pénétration pour différentes tensions d'accélération dans le GaN ayant une masse volumique égale à  $\rho = 6.15 \text{ g/cm}^3$ . La figure IV. 2 représente la profondeur de pénétration calculée par notre modèle pour le GaN, et la comparaison entre les profondeurs de pénétration trouvées par les modèles de Wittry et Kyser [4], d'Everhart et Hoff [5], et celui de Kanaya et Okayama [6]. Pour notre modèle il est bien clair que la profondeur de pénétration des électrons incidents croît en fonction de l'énergie d'accélération du faisceau incident. Concernant notre modèle, les calculs coïncident avec les deux modèles de Kanaya-Okayama et Wittry- Kyser, ce qui renforce notre résultat. Nos calculs pour le GaN est généralement comparable à celui obtenu par D.J.As et al. [7] et Lethy et al. [8] (figure (IV. 3)).



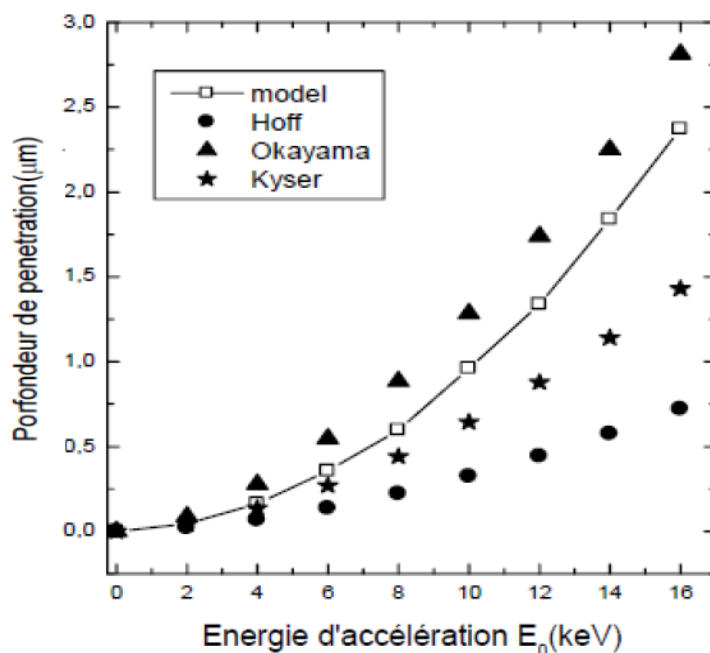
**Figure (IV. 2)** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour le GaN.

Le principal avantage de la technique CL est l'excitation locale, ce qui fait que la CL est une technique puissante pour la caractérisation optique des nanostructures. Le développement des microscopes électroniques à balayage permet un meilleur contrôle de la taille et de la position du faisceau électronique. Ainsi, il devient possible d'obtenir la luminescence des régions à l'échelle nanométrique, ce qui permet l'imagerie de distribution de la luminescence avec une résolution de dizaines de nanomètres. De plus, comme le montre la figure IV. 2, en modifiant l'énergie des électrons incidents, il est possible d'exciter le matériau à différentes profondeurs, calculé à partir de notre modèle. Par exemple, une variation de l'énergie électronique de 2 à 25 kV correspond à une variation de la profondeur de pénétration de 50 nm à 3  $\mu\text{m}$  dans le GaN.



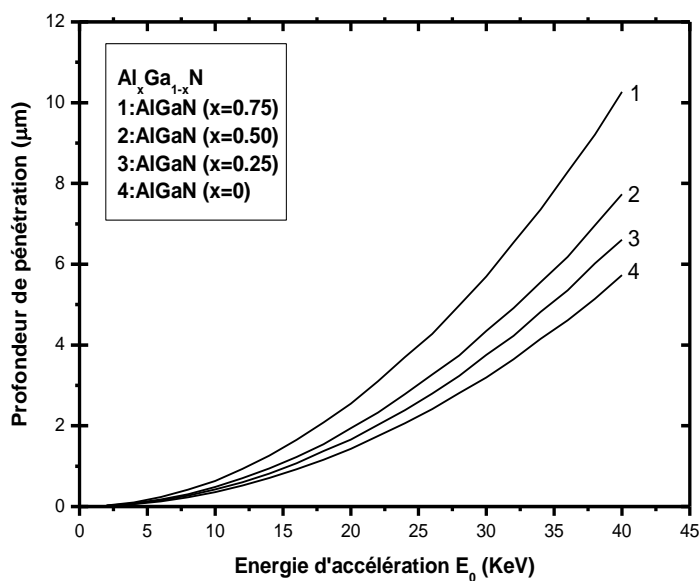
**Figure (IV. 3)** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour le GaN (comparaison avec D.J.As et al. [7] et Lethy et al. [8]).

Il est plutôt difficile d'observer la différence entre les valeurs semi-empiriques et les valeurs de simulation de Monte Carlo (model proposé) notamment pour des bases énergies (<16 KeV). Afin d'analyser davantage, nous retraçons de nouveau la figure (IV.2) pour une plage d'énergie d'accélération de 2 à 16 keV. Ceci est illustré à la figure (IV.4), la comparaison entre le model proposé et les modèles semi-empirique montre la même tendance. Ce résultat est en accord avec les définitions du chapitre précédent.



**Figure (IV. 4)** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour le GaN.

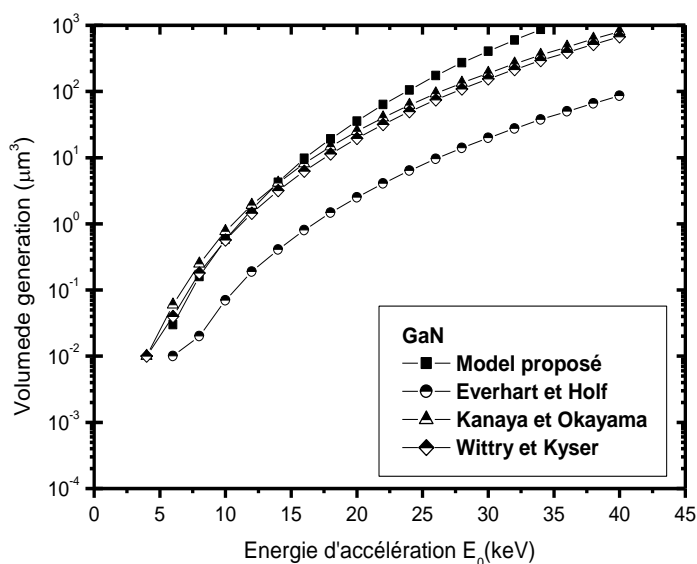
Et pour illustrer l'effet de la fraction X sur la profondeur, la figure IV.5 présente la profondeur de pénétration maximale des électrons calculée pour l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  pour différentes valeurs de la fraction X en fonction de la tension d'accélération. La profondeur de pénétration augmente avec la fraction d'aluminium. La profondeur de pénétration augmente avec l'énergie et diminue avec la fraction molaire.



**Figure (IV. 5)** Profondeur de pénétration des électrons en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , pour plusieurs valeurs de la fraction molaire X.

### III. Le volume de génération (volume d'interaction)

L'effet combiné des interactions élastiques et inélastiques est de répartir les électrons du faisceau sur un "volume d'interaction" tridimensionnel. Le volume dans lequel les électrons primaires transfèrent leur énergie est connu sous le nom de volume d'interaction. Il prend la forme d'une poire correspondant aux contours d'énergie des électrons primaires comme illustré dans la figure IV. 1. La taille du volume d'interaction est fortement dépendante de l'énergie avec laquelle les électrons interagissent avec l'échantillon. A plus haute énergie, les électrons peuvent se déplacer vers de plus grandes profondeurs. La méthode Monte-Carlo consiste à simuler un nombre important de trajectoires d'électrons de manière aléatoire en se basant sur des équations qui tiennent compte des collisions élastiques et inélastiques des électrons. Cependant, la forme du volume d'interaction ne change pas de manière significative avec l'énergie du faisceau étant donné que les dimensions latérales et en profondeur échelle d'une manière similaire à l'énergie du faisceau. L'utilisation de tension variable d'accélération ascendante conduit à des volumes d'interaction avec l'augmentation des profondeurs de pénétration. Des énergies de faisceau plus élevées entraînent des volumes de production plus importants. Par conséquent, pour obtenir une résolution plus élevée, un volume de génération plus faible est généralement utilisé, c'est-à-dire une énergie de faisceau faible [9].



**Figure (IV. 6)** Allure du volume de génération pour le model proposé et les modèles semi-empirique en fonction de l'énergie d'accélération  $E_0$  pour le GaN (échelle logarithmique).

La figure IV. 6 représente du volume d'interaction issu d'un faisceau d'électrons de plage d'énergie d'accélération de 2 a 40 KeV dans de GaN, calculée pour 100 électrons primaires. Dans le cas de

forte énergie du faisceau (30 keV), le volume d'interaction se situe dans des couches plus profondes et il doit être plus large. Ces valeurs sont proches de celles obtenues pour le GaAs par [2]. Cependant, l'ensemble de ces courbes laissent prévoir que plus la tension d'accélération est importante plus le maximum du dépôt d'énergie se fait en profondeur.

#### **IV. Signal de la cathodoluminescence (CL)**

Le GaN a récemment suscité beaucoup d'intérêt dans le domaine optoélectronique en raison de son large bande (3,4 eV à température ambiante), de sa grande énergie de liaison à l'exciton et de son utilité pour des substrats de haute qualité ou pour des nanostructures comme nanorods, nanotubes, etc... Un facteur important pour les applications industrielles est la stabilité des propriétés de luminescence, qui affecte la durée de vie des dispositifs. Ainsi, nous avons étudié les évolutions de l'intensité de luminescence sous irradiation par faisceau électronique. Dans ce paragraphe, les effets sur l'irradiation par un faisceau électronique sur la luminescence ont été étudiés pour différents types de structures GaN. Nous avons simulé le signal de la cathodoluminescence du GaN irradié, de AlGaN.

La lumière émise est caractéristique de la composition et de la structure du matériau exposé, donnant des informations sur ses propriétés optiques et électriques. Pour étudier un échantillon via CL, un faisceau d'électrons est focalisé sur sa surface. L'intensité de l'émission de CL d'un échantillon est proportionnelle au nombre de porteurs libres générés par le faisceau d'électrons primaires. Le nombre et la distribution des paires électron-trou générées par le faisceau d'électrons primaires peuvent être estimés à partir du profil de perte d'énergie calculé en utilisant le modèle proposée.

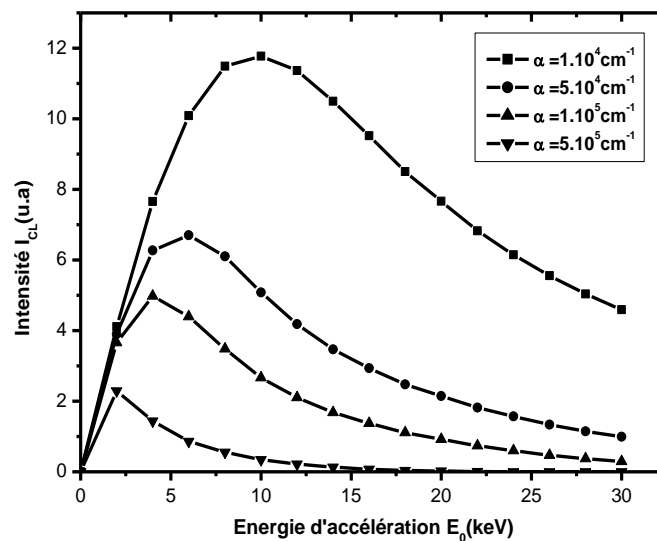
Cependant, la connaissance des énergies et trajectoires typiques des électrons interagissant permet de localiser où la cathodoluminescence est potentiellement originaire. Pour ce la, l'influence de l'énergie d'accélération, la diffusion des porteurs minoritaires, la fraction molaire  $X$ , le coefficient d'absorption seront étudiées. Lorsque la tension d'accélération est trop faible, le signal CL ne sera pas libéré parce que la surtension n'a pas été atteinte. Comme la tension d'accélération augmente, à la fois la profondeur de pénétration et la taille des volumes d'interaction augmente, résultant en un signal détecté augmenté [1].

Les courbes qu'on exploite en général en CL sont les courbes  $I_{CL}=f(E_0)$ , parce que dans la plus part des cas, les auteurs utilisent ces courbes pour déterminer les paramètres physiques [2]. L'allure de la courbe  $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  présente, en générale, un maximum, elle est déterminée par la génération et la recombinaison des porteurs à faibles énergies d'accélération et par l'absorption à hautes énergies d'accélération. La dépendance de l'intensité du pic d'émission du CL sur la puissance

d'excitation peut être utilisée pour déterminer l'origine chimique d'une émission par son comportement de saturation [2].

#### IV.1. L'influence du coefficient d'Absorption ( $\alpha$ )

La figure (IV. 7) montre la variation d' $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  sous l'influence du coefficient d'absorption  $\alpha$ . Les paires d'électrons-trous sont produites, il y a une augmentation de l'intensité de CL et alors elle diminue après atteinte d'un maximum, cette décroissance dépend du coefficient d'absorption. Il apparaît claire que une fois la valeur du coefficient d'absorption augmente, l'intensité  $I_{CL}$  diminuait. Mais d'après K. Kanaya [6], bien que l'intensité  $I_{CL}$  soit dégradée lorsqu'on augmente le coefficient d'absorption. Ce résultat est similaire à celui trouvé dans la littérature [10].

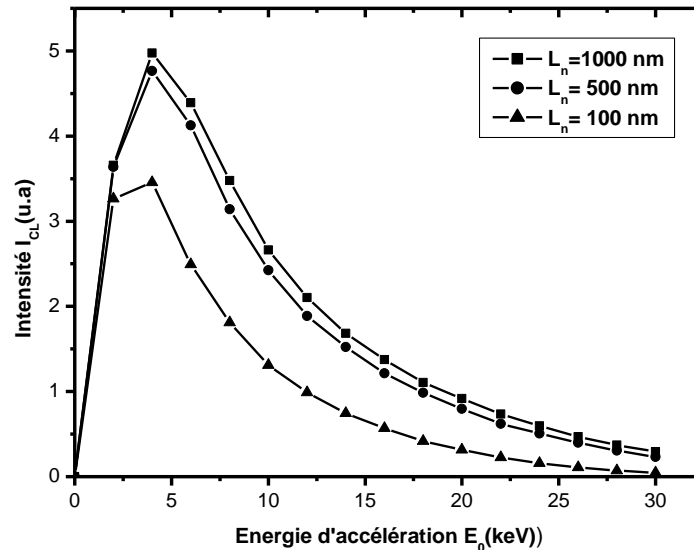


**Figure (IV. 7)** Variation de signal  $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  pour le GaN différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$ .

#### IV.2. L'influence de la longueur de Diffusion ( $L_n$ )

Un des paramètres de volume le plus important est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L_n$  qui joue un grand rôle dans l'étude caractéristique des matériaux semiconducteurs. Outre la limitation de résolution provenant des dimensions du volume d'interaction, il faut tenir compte de la diffusion des paires électrons-trous qui agrandit la zone d'où proviennent les photons. En fait, comme dans l'expérience de la luminescence, ce sont les porteurs minoritaires qui interviennent et c'est donc leur longueur de diffusion qui altère la résolution des images (la cathodoluminescence). La diffusion fait en sorte que le maximum dans la courbe d'intensité de la CL soit plus profond dans l'échantillon ainsi que la diminution du pic d'intensité. Les effets de la diffusion sont les plus importants à de faibles tensions [2].

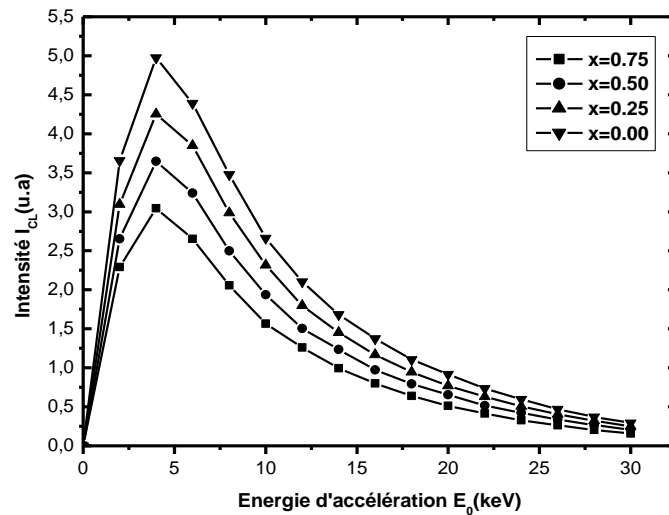
L'augmentation de la longueur de diffusion signifie une diffusion plus grande des porteurs minoritaires. La figure (IV.8) montre la variation d' $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  pour différent  $L_n$  (100, 500 et 1000nm), dans tous les cas,  $I_{CL}$  croît quand la longueur de diffusion augmente. Ce résultat est en accord avec celui observé par différent auteurs [2]. D'autre part, le signal CL est généré lorsque les électrons primaires pénètrent dans le matériau et génèrent des paires électron-trou qui peuvent se recombiner et générer des photons qui sont détectés.



**Figure (IV. 8)** Variation de signal  $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  pour différent valeurs de la longueur de diffusion  $L_n$  pour le GaN (avec un coefficient d'absorption  $\alpha=1.10^5 \text{ cm}^{-1}$ ).

### IV.3. L'effet de la fraction molaire

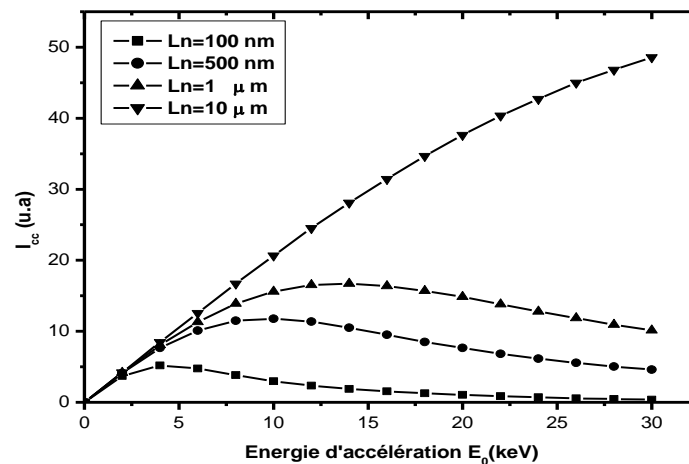
La dépendance des signaux de cathodoluminescence à la fraction molaire d'aluminium calculée montre que les signaux de cathodoluminescence diminuent lorsque la fraction molaire d'aluminium augmente (figure IV. 9). Procédé de modification contrôlée des composants élémentaires de l'alliage semi-conducteur pour obtenir une bande interdite souhaitée pouvant émettre des rayonnements avec des longueurs d'onde souhaitée. La fraction molaire Al est un paramètre critique qui détermine la longueur d'onde d'émission dans les diodes électroluminescentes AlGaIn [11].



**Figure (IV. 9)** Variation de signal  $I_{CL}$  en fonction d' $E_0$  dans l' $Al_xGa_{1-x}N$  pour différentes valeurs de fraction  $X$ . (Avec longueur de diffusion  $L_n=1\mu m$  et le coefficient d'absorption  $\alpha=1.10^5cm^{-1}$ ).

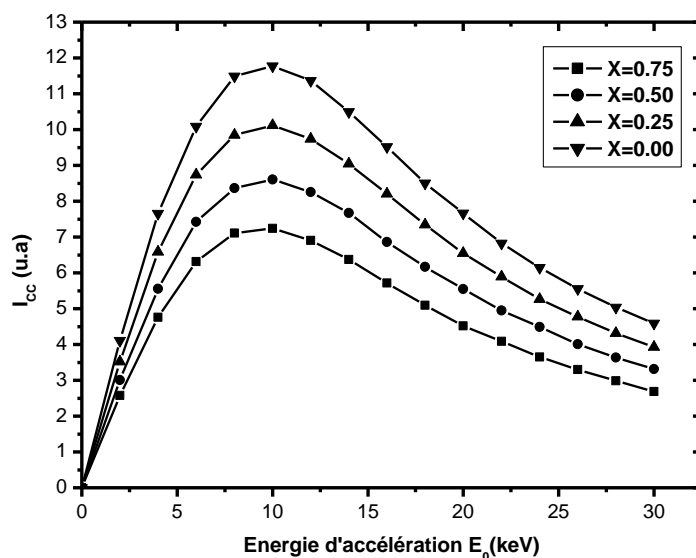
## V. Le courant induit par faisceau électronique (EBIC)

De nombreux traitements auxquels sont soumis les matériaux semiconducteurs, oxydation, diffusion d'un dopant ont pour effet de modifier les propriétés des ces matériaux. Parmi les méthodes permettant l'étude de ces effets, le courant induit par un faisceau d'électrons (Electron Beam induced Current, EBIC) est une technique bien adaptée à la mesure locale de la durée de vie  $\tau$  ou de la longueur de diffusion  $L_n$  des porteurs minoritaires. Cette technique peut être employée sous diverses formes [12], celle préservant le mieux l'aspect local consiste à faire varier l'énergie d'un faisceau incident fixe, perpendiculaire la de la cible à étudié [13].



**Figure (IV. 10)** Variation de signal EBIC  $I_{CC}$  en fonction d' $E_0$  dans le GaN pour différentes valeurs de longueur de diffusion.

La figure IV. 10 montre l'influence de la longueur de diffusion  $L_n$  sur signal EBIC  $I_{CC}$ . Lorsque la longueur de diffusion  $L_n$  augmente influe sur signal EBIC  $I_{CC}$  pour n'importe quelle valeur de  $R$ , mais son influence est plus importante pour les faibles valeurs de  $R$  qui correspond à des faibles valeurs d'énergie  $E_0$ . Ce résultat est logiquement attendu puisque la probabilité que les porteurs soient collectés augmente avec ces paramètres [12].



**Figure (IV. 11)** Variation de signal EBIC  $I_{CC}$  en fonction d' $E_0$  dans l' $Al_xGa_{1-x}N$  pour différentes valeurs de  $x$  (fraction) (avec une longueur de diffusion  $L_n=500$  nm).

La figure (IV.11) montre la variation du signal EBIC, la première partie de la courbe correspondant aux faibles énergies du faisceau d'électrons, l'augmentation rapide est liée à l'élargissement du volume d'interaction electron-matière et donc au fait que plus de paires électron-trou sont créées. Mais, lorsqu' $E_0$  augmente, la profondeur de pénétration augmente également et un nombre croissant de charges se recombine avant d'atteindre la zone d'appauvrissement puisque la distance à parcourir par les porteurs minoritaires devient plus grande. Par conséquent, l'efficacité de la collecte diminue.

## **VI. Les effets secondaires du faisceau électronique (l'augmentation de température locale)**

La réduction de la taille des composants optoélectroniques en dessous du libre parcours moyen de phonon acoustique, crée une nouvelle situation pour la propagation des phonons et l'interaction [14]. D'un côté, il peut compliquer l'évacuation de la chaleur à partir des dispositifs à échelle réduite pendant la caractérisation avec des outils basés sur l'interaction electron-matière comme le MEB. De l'autre côté, il ouvre une opportunité pour l'ingénierie des phonons spectre dans des matériaux nanostructurés, et la réalisation d'un fonctionnement amélioré des dispositifs à l'échelle nanométrique [15]. Et comme nous avons vu aux chapitres précédent, la plupart des semi-conducteurs et les métaux épais avec une bonne conductivité thermique, le chauffage par faisceau d'électrons ne joue pas un rôle important et ne pas influencer les mesures, mais actuellement avec la miniaturisation des composants optoélectroniques a base des semiconducteurs nanostructurés ce ne pas le cas, pare ce que l'évacuation de la chaleur dans des nanostructures se diffère a celle du couches épais.

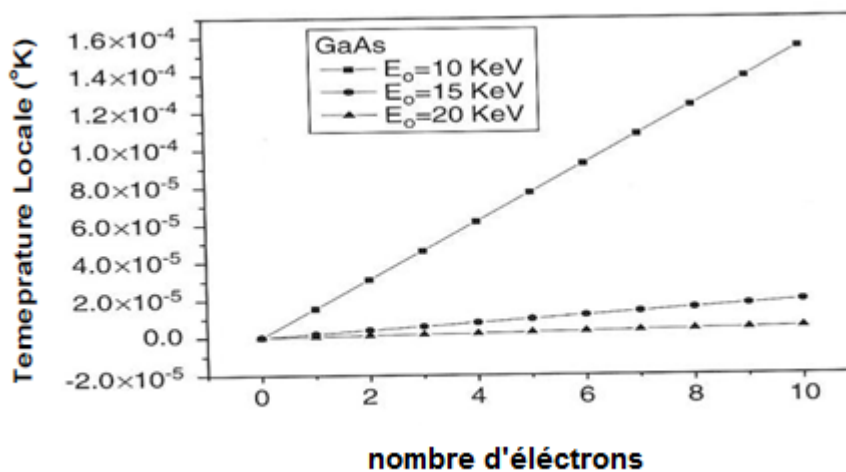
### **Quelle est la température?**

La définition habituelle de la température est liée à l'énergie moyenne d'un système de particules. Cette définition concerne un système en équilibre et fonctionne même pour les systèmes à l'échelle nanométrique. Cependant, notre intérêt est dans le transport de chaleur à travers des systèmes nanométriques. La température, qui est un concept d'équilibre, peut-elle encore être invoquée dans un processus non équilibré tel que le flux thermique? La réponse est affirmative pour les systèmes macroscopiques: s'ils sont grands que l'on peut définir une température locale dans chaque région de l'espace. Cette température locale variera d'une région à l'autre. La question «Qu'est-ce que la température?» Est en réalité une question sur la taille des régions sur lesquelles une température locale peut être définie. Dans de nombreux super-réseaux de semi-conducteurs, l'épaisseur de la couche est de 2 à 5 nm. Ces régions sont-elles assez grandes pour définir une température? [16].

Le microscope électronique à balayage offre deux possibilités pour réaliser une expérience. La première qu'on appelle « balayage TV » consiste à balayer le faisceau dans une fenêtre délimitée sur l'échantillon et ce mode est utilisé pour observer les phénomènes physiques lors des premiers instants de fonctionnement. Le spot électronique est alors défléchi à la vitesse de balayage d'un tube cathodique. La deuxième possibilité appelée « mode spot » est obtenue en fixant le faisceau en un point de la surface de l'échantillon. Pour ces deux techniques la densité de puissance est la même mais le temps passé sur un point de la structure est très différent, ce dernier mode sera plutôt utilisé

pour étudier le vieillissement. Dans ce present travail nous avons utilisé le mode spot dans la modélisation [17].

La plus grande partie de l'énergie des électrons qui subissent une diffusion inélastique est perdue en chauffant l'échantillon. La majeure partie de l'énergie perdue est donc convertie en chaleur. Et comme la concentration du phonon se traduit en température on peut donc obtenir des profils qui donnent la variation de la température en fonction de la profondeur. Un courant du faisceau par exemple de  $I_b=1$  nA qui correspond à  $10^9$  électrons. Mais l'ordinateur ne peut pas calculer l'interaction de ce grand nombre d'électrons. Donc, on calcule l'augmentation de la température d'un petit nombre d'électrons, puis on déduit l'augmentation pour le grand nombre puisque la variation de  $\Delta T$  avec le nombre d'électron est linéaire (figure IV. 12) [18].



**Figure (IV. 12)** Variation de la temperature local en fonction de nombre d'electrons dans le GaAs pour différentes valeurs d'énergie d'accélération.

Les calculs suivants sont destinés à donner une estimation des effets thermiques. Le choix de modèles physiques pour la simulation de la trajectoire des électrons de Monte Carlo et du transfert d'énergie ainsi que les conditions aux limites appliquées dans les calculs de transfert de chaleur sont très influents. Tous ces facteurs sont discutés dans ce chapitre et des explications sur les choix ou approximations spécifiques sont données. La simulation a été effectuée en tenant compte de différents paramètres des échantillons et des conditions expérimentales. La distribution de la température locale  $\Delta T$  en fonction de la profondeur de pénétration pour différentes valeurs de :

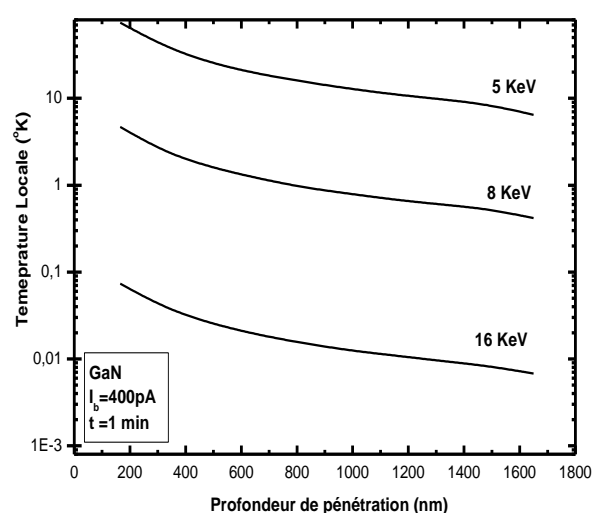
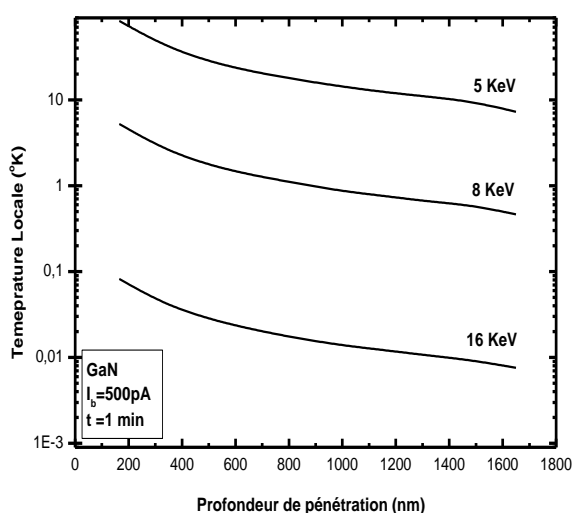
- L'énergie d'accélération
- Le courant de faisceau
- Le temps de balayage (temps d'irradiation)

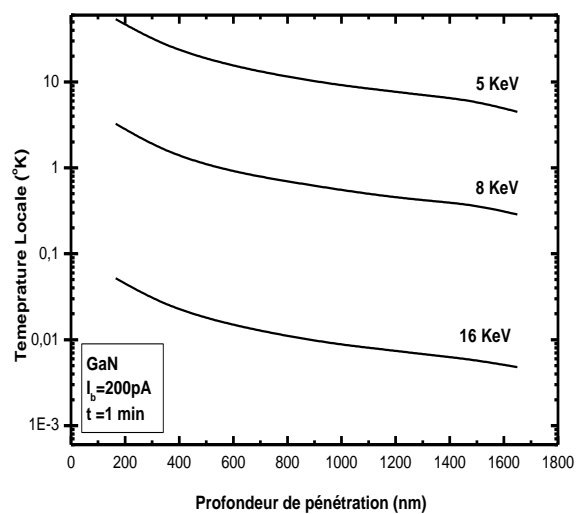
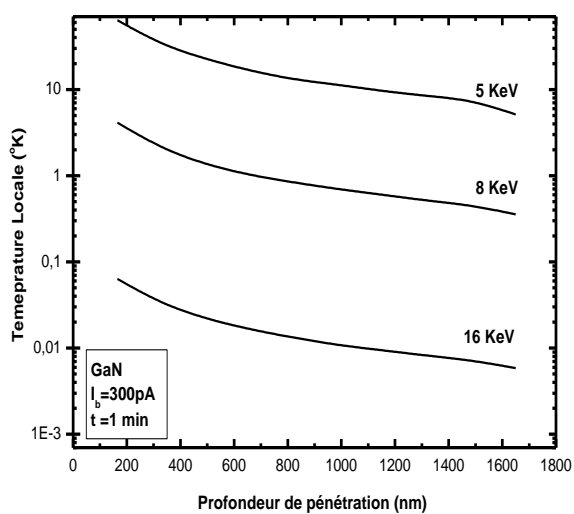
**Remarque:** L'étape de calcul en profondeur n'est pas la même sur les courbes, cette modification de l'étape de calcul peut donc avoir une légère influence sur la précision du calcul.

### VI.1. L'effet de l'énergie d'accélération

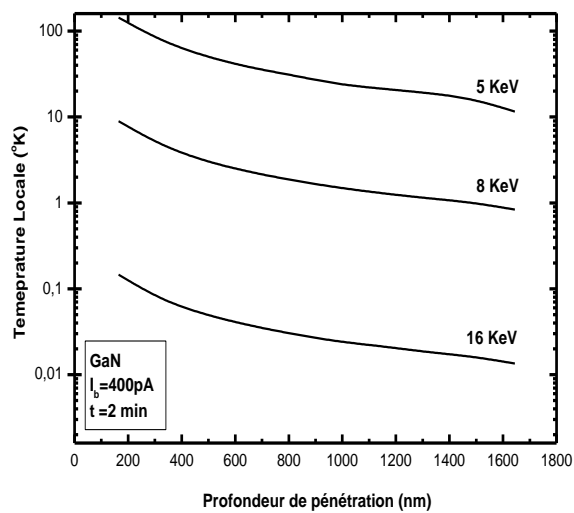
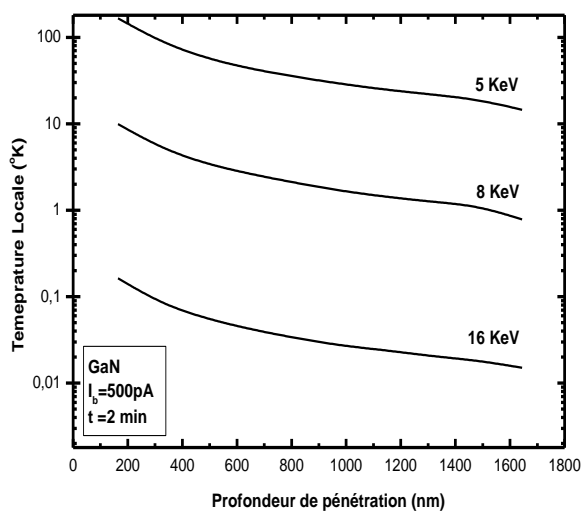
Les figures (IV.13, IV.14, IV.15 et IV.16) montrent l'élévation locale de la température en fonction de la profondeur pour différentes valeurs de l'énergie d'accélération  $E_0$  dans le GaN ainsi pour des valeurs fixes du courant et la durée d'irradiation. La température locale augmente avec la diminution d' $E_0$ , car le volume de génération dépend d' $E_0$  dans ce cas, une grande quantité d'énergie est localisée dans un petit volume et le total des phonons générés par le faisceau d'électrons est situé dans ce petit volume, de sorte que l'élévation de température devient importante.

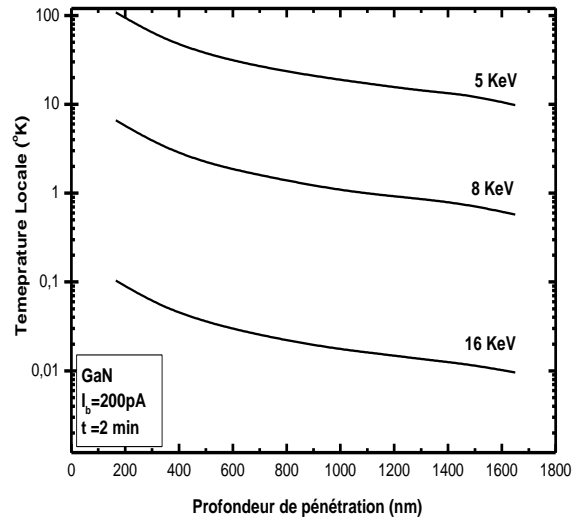
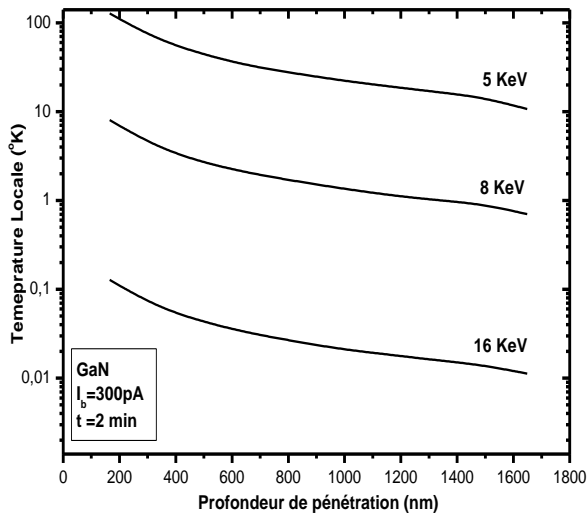
Les variations des distributions de la température locale sont plus grandes pour l' $E_0$  faible (5KeV), ce qui suggère qu'elles se produisent dans la région proche de la surface. Par conséquent, les chercheurs devraient prendre en compte cette augmentation de la température dans la nano-caractérisation par des techniques de faisceau d'électrons, car dans ce cas, nous utilisons de petites valeurs d' $E_0$ . Mais dans les couches profondes on ne peut pas analyser ce phénomène. On dit que pour les fortes énergies la température est distribuée sur un grand volume. Par contre pour les faibles énergies nous avons un nombre d'électrons localisés dans un petit volume [19].



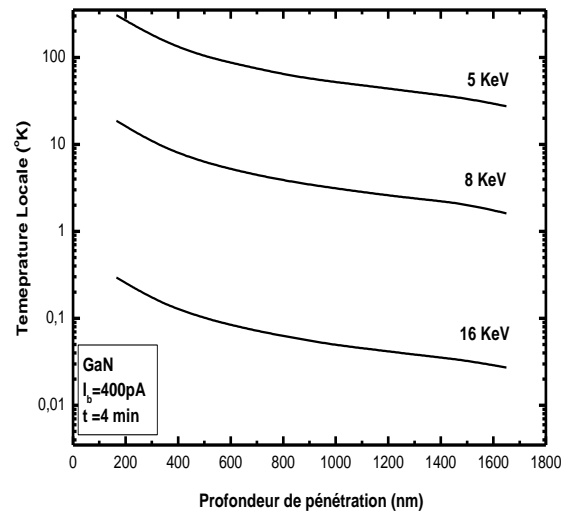
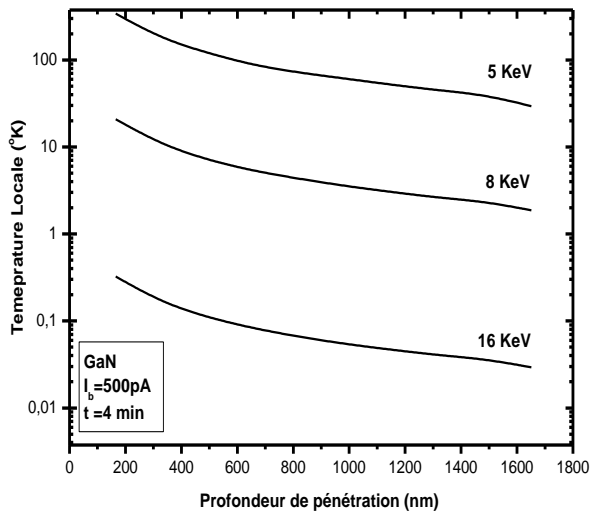


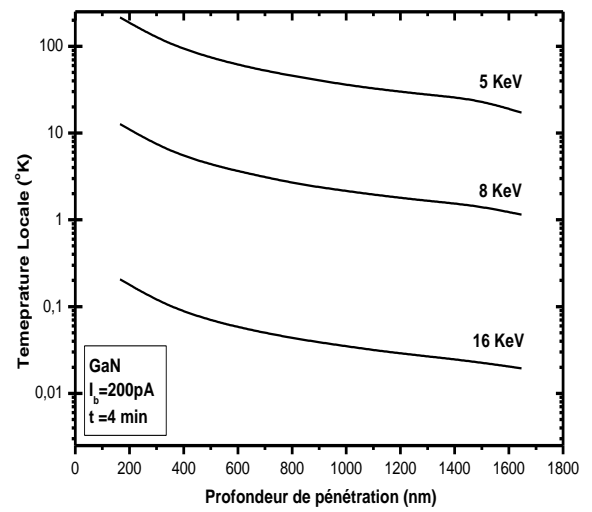
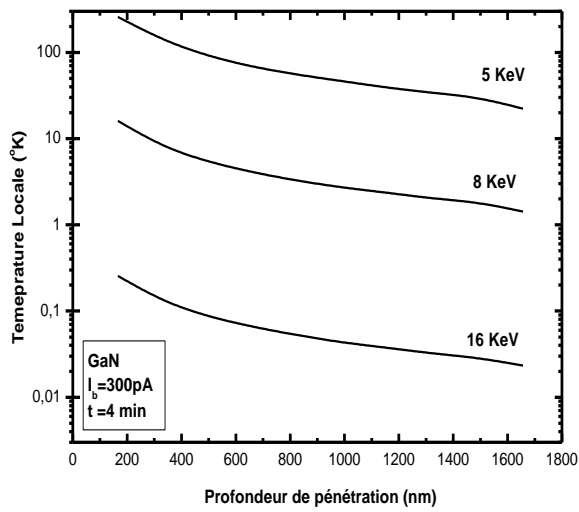
**Figure (IV. 13)** Variation de la temperature local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs d'énergie d'accélération (avec un courant de 200, 300,400 et 500 pA et d'une durée de 1 min).



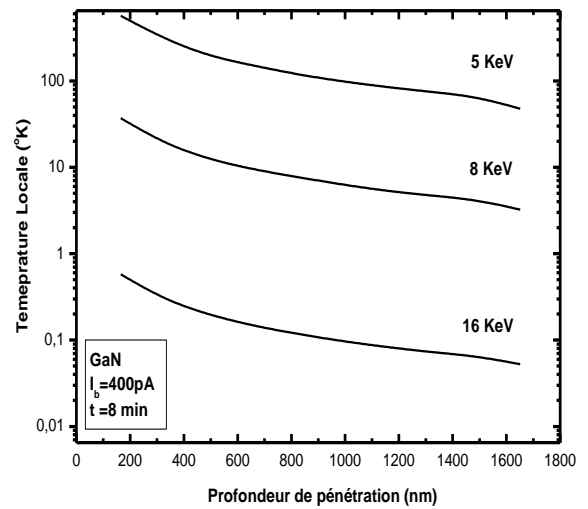
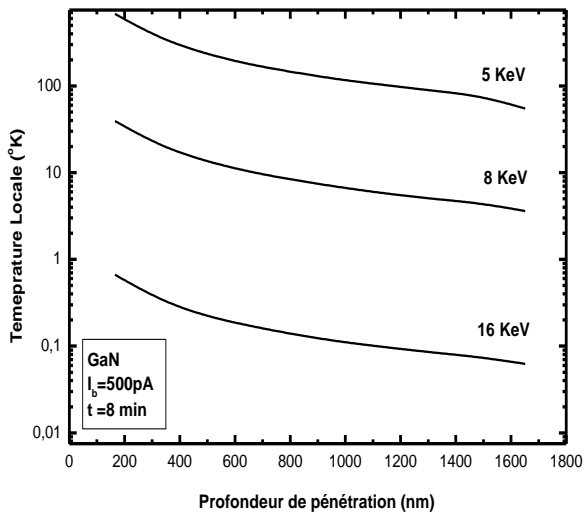


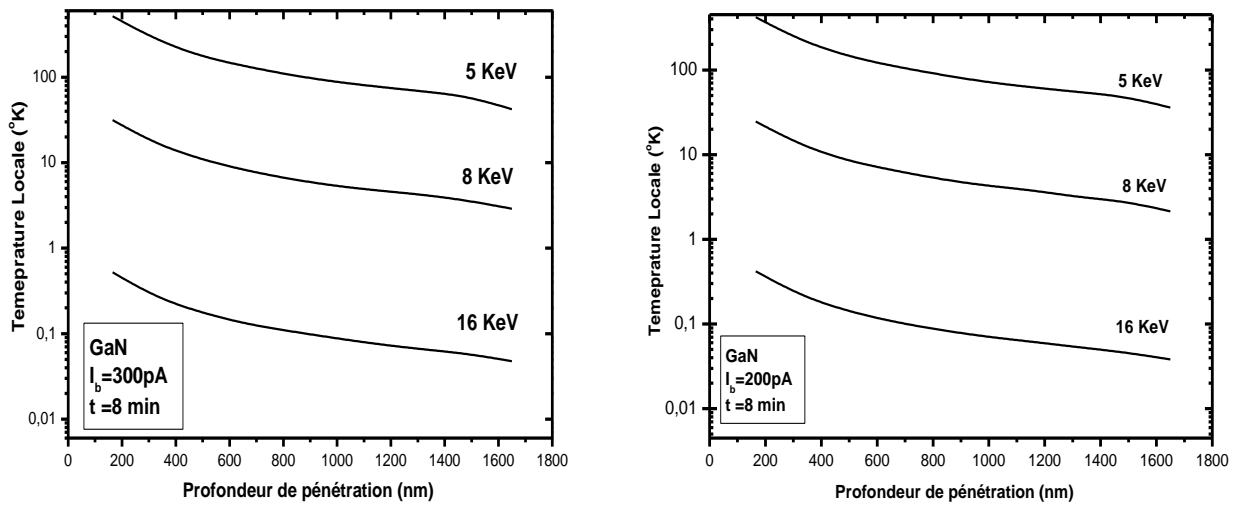
**Figure (IV. 14)** Variation de la temperature local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs d'énergie d'accélération (avec un courant de 200, 300,400 et 500 pA et d'une durée de 2 min).





**Figure (IV. 15)** Variation de la temperature local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs d'énergie d'accélération (avec un courant de 200, 300,400 et 500 pA et d'une durée de 4 min).





**Figure (IV. 16)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs d'énergie d'accélération (avec un courant de 200, 300,400 et 500 pA et d'une durée de 8 min).

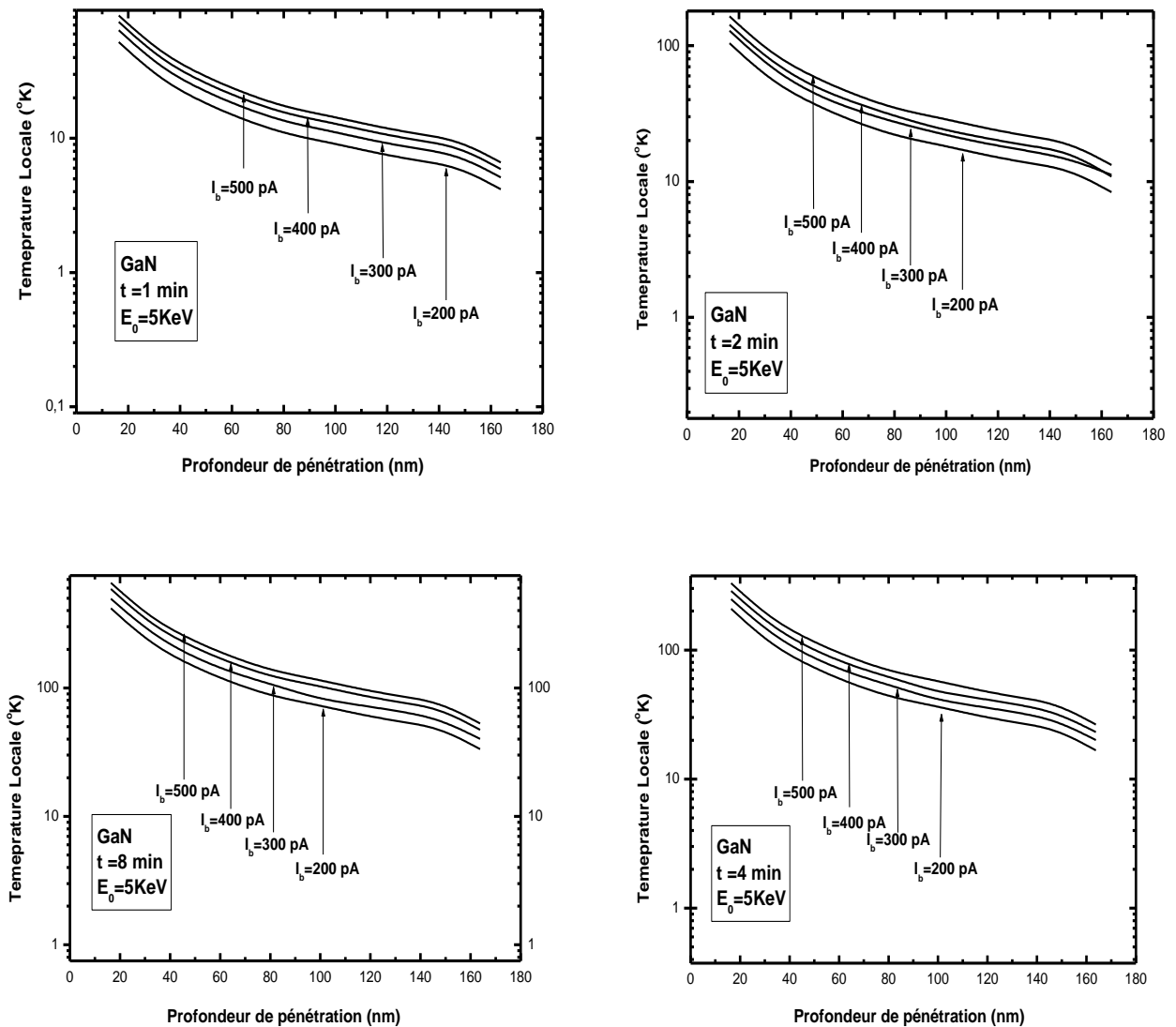
## VI.2. L'effet du courant de faisceau

Après avoir déterminé les effets de l'énergie du faisceau, les effets du courant de faisceau sur la température ont été simulés. Les résultats de cette simulation sont présentés sur les figures (IV.17, IV.18 et IV.19), les figures montrent l'élévation locale de la température en fonction de la profondeur pour différentes valeurs du courant de faisceau  $I_b$ . En surface, une très haute élévation de température ( $\Delta T > 800$  °K) peut être obtenue avec un courant  $I_p$  de 500 pA pour quelques 5 keV et d'une 1 minute d'irradiation.

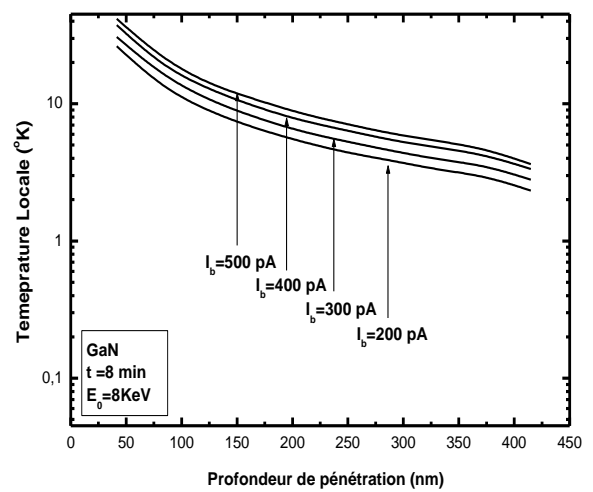
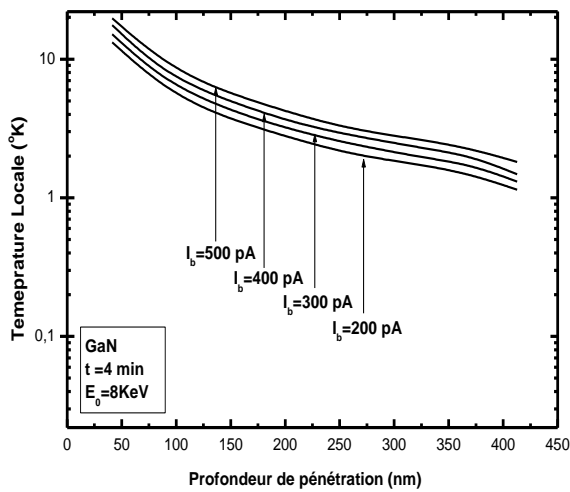
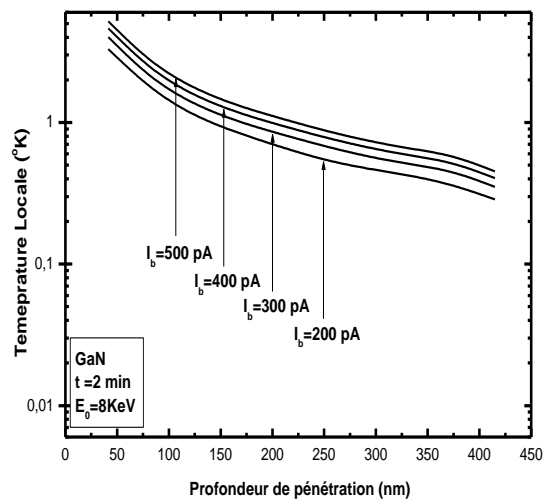
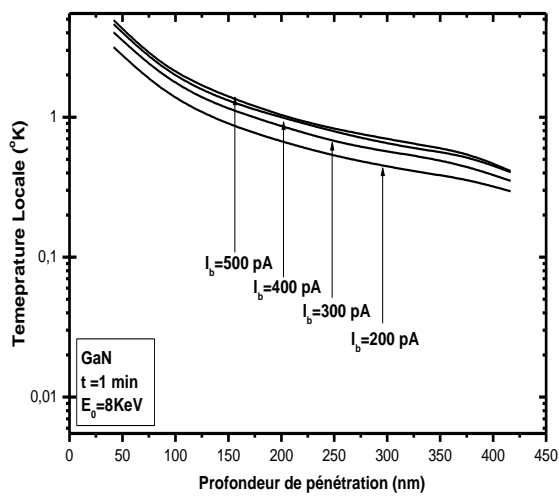
L'augmentation de la température est très sensible au courant primaire ( $I_p$ ). D'autre part, l'élévation de température prend des valeurs très élevées au niveau des couches superficielles (20 et 250 nm), puis diminue de manière significative jusqu'à une valeur très faible dans les couches plus profondes. Des températures plus élevées sont observées à faible consommation d'énergie en raison de la réduction inhérente au volume d'interaction de l'électron. Tandis que l'énergie totale déposée par les électrons de faible énergie est évidemment plus petite, elle est répartie sur un volume beaucoup plus petit. Par conséquent, l'effet du chauffage diminue avec la profondeur et devient négligeable dans les couches plus profondes. Cette diminution spectaculaire de la température locale peut être due à la génération rapide de phonons (excès de phonons) et à la conductivité thermique du matériau [19].

Notant que la température diminue lorsque le nombre d'électrons (qui provient de l'augmentation d' $I_p$ ) diminue. Cette diminution, ou le décalage entre les courbes, est très claire dans les premières couches entre. Il est clair que les effets du courant primaire sont proportionnels au nombre d'électrons. Il

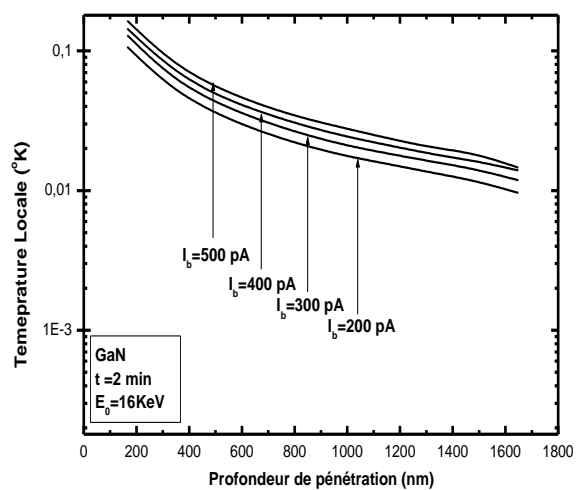
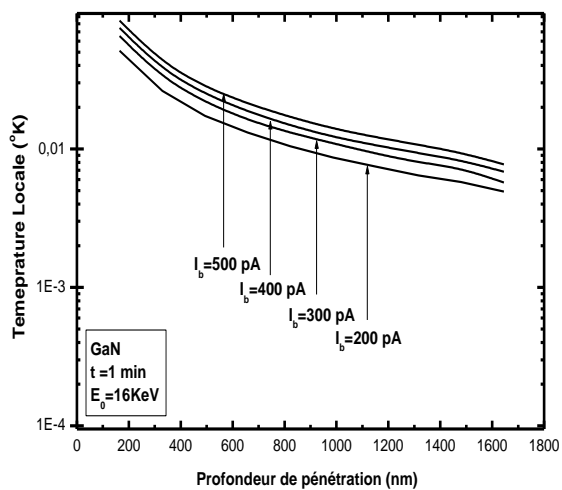
est évident que l'augmentation de la température induite par un courant primaire plus élevé est plus importante. Les densités de courant utilisées sont plus importantes qu'en imagerie et les risques de modifications chimiques locales ne sont pas négligeables, donc l'intensité du courant est un facteur très important pour l'effet thermique [20].

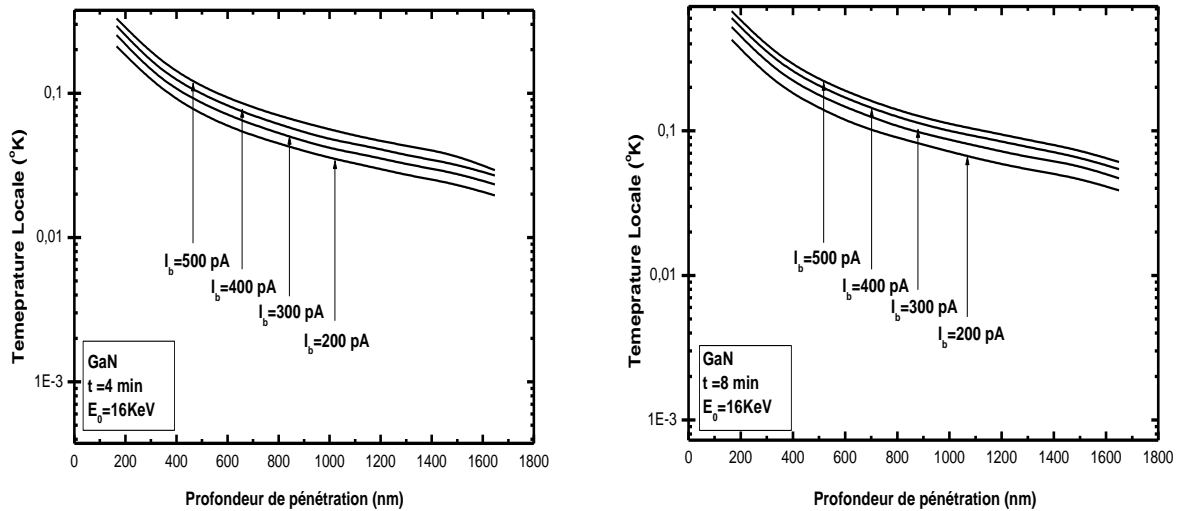


**Figure (IV. 17)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de courant (avec un courant de 1, 2,3 et 4 min et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 5 KeV).



**Figure (IV. 18)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de courant (avec un courant de 1, 2, 3 et 4 min et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 8 KeV).



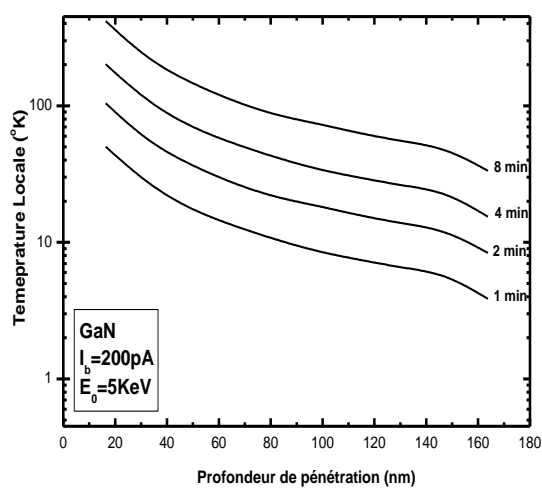
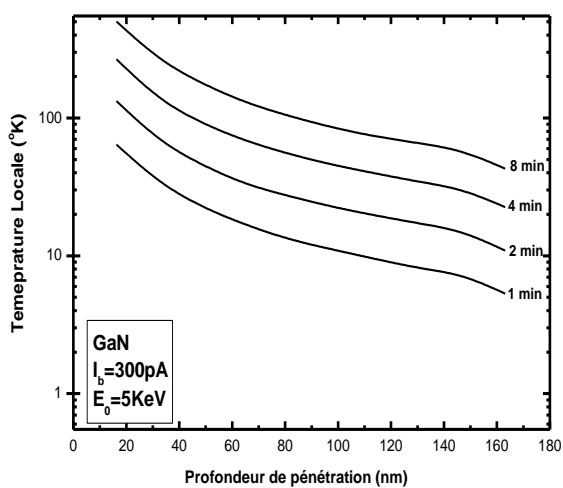
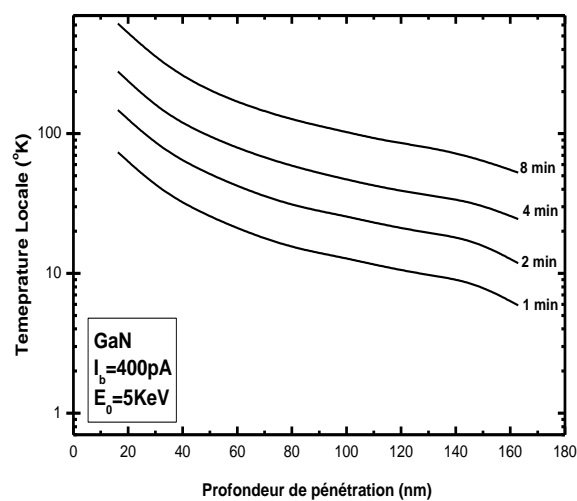
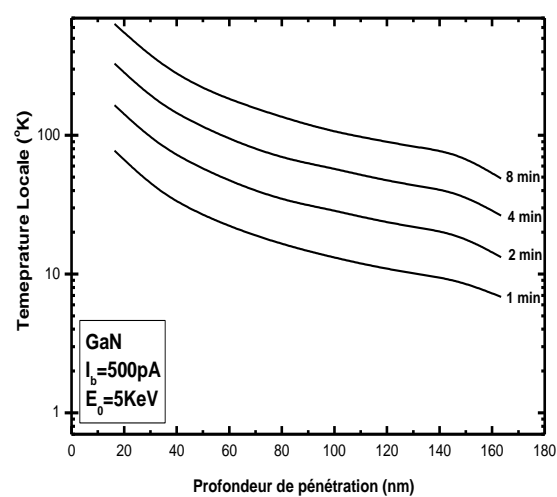


**Figure (IV. 19)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de courant (avec un courant de 1, 2,3 et 4 min et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 16 KeV).

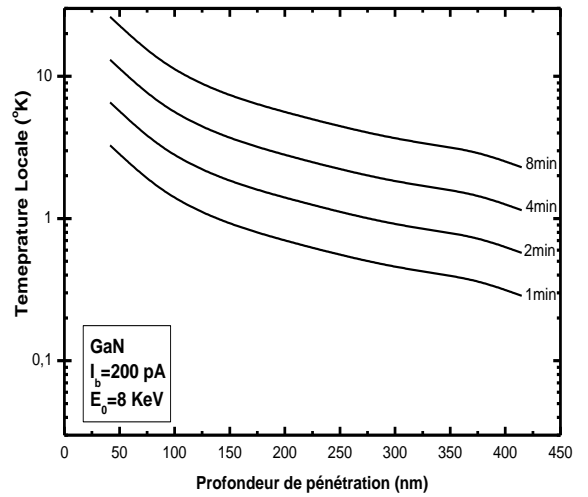
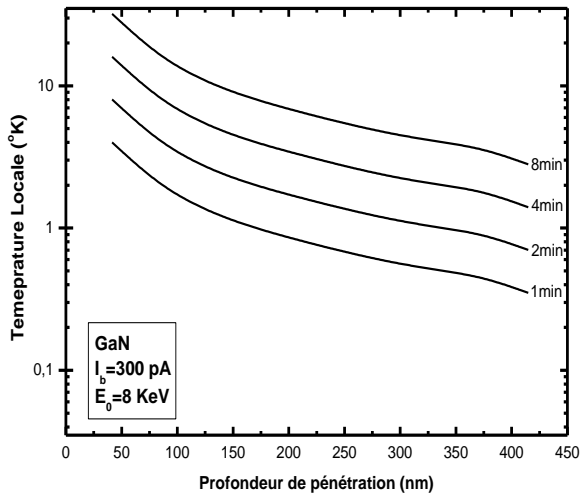
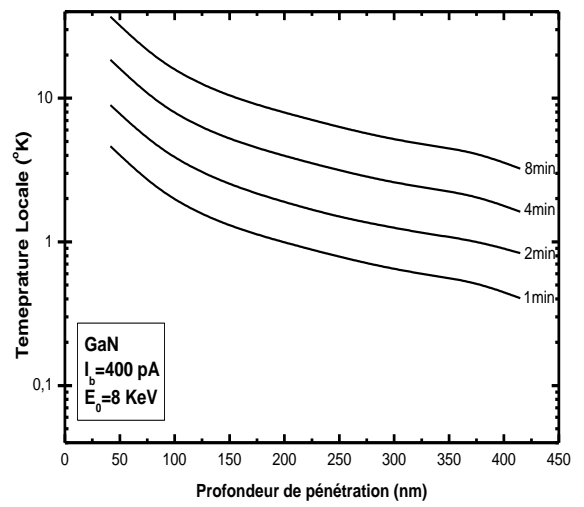
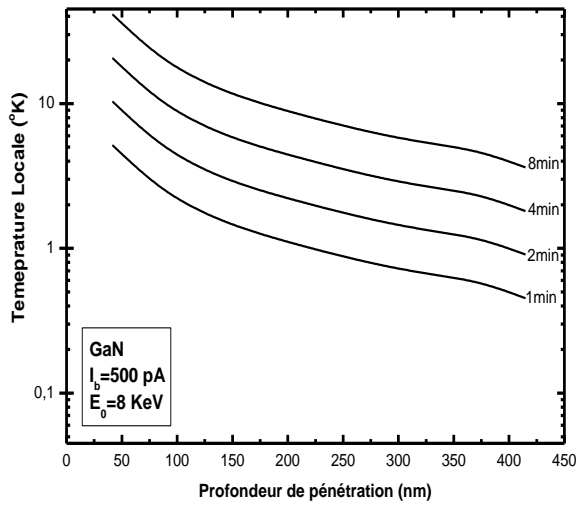
### VI.3. L'effet de la durée d'irradiation

L'un des paramètres influençant l'analyse MEB est la durée de l'analyse. Pour calculer l'influence de la durée d'analyse, nous avons utilisé la méthode dynamique moléculaire et Monte Carlo (modèle hybride illustré dans le chapitre précédent). Les résultats de simulation de l'élévation la température locale en fonction de la profondeur pour différentes valeurs de la durée d'irradiation sont présentés sur les figures (IV.20, IV.21 et IV.22). Ce paramètre induit alors les mêmes effets que la tension d'accélération. Cette variation peut être expliquée en considérant que la quantité d'électrons augmente avec la durée d'irradiation et on dépose ensuite, l'élargissement de la surface d'interaction peut être plus large et plus grand pour une irradiation plus longue et plus longue.

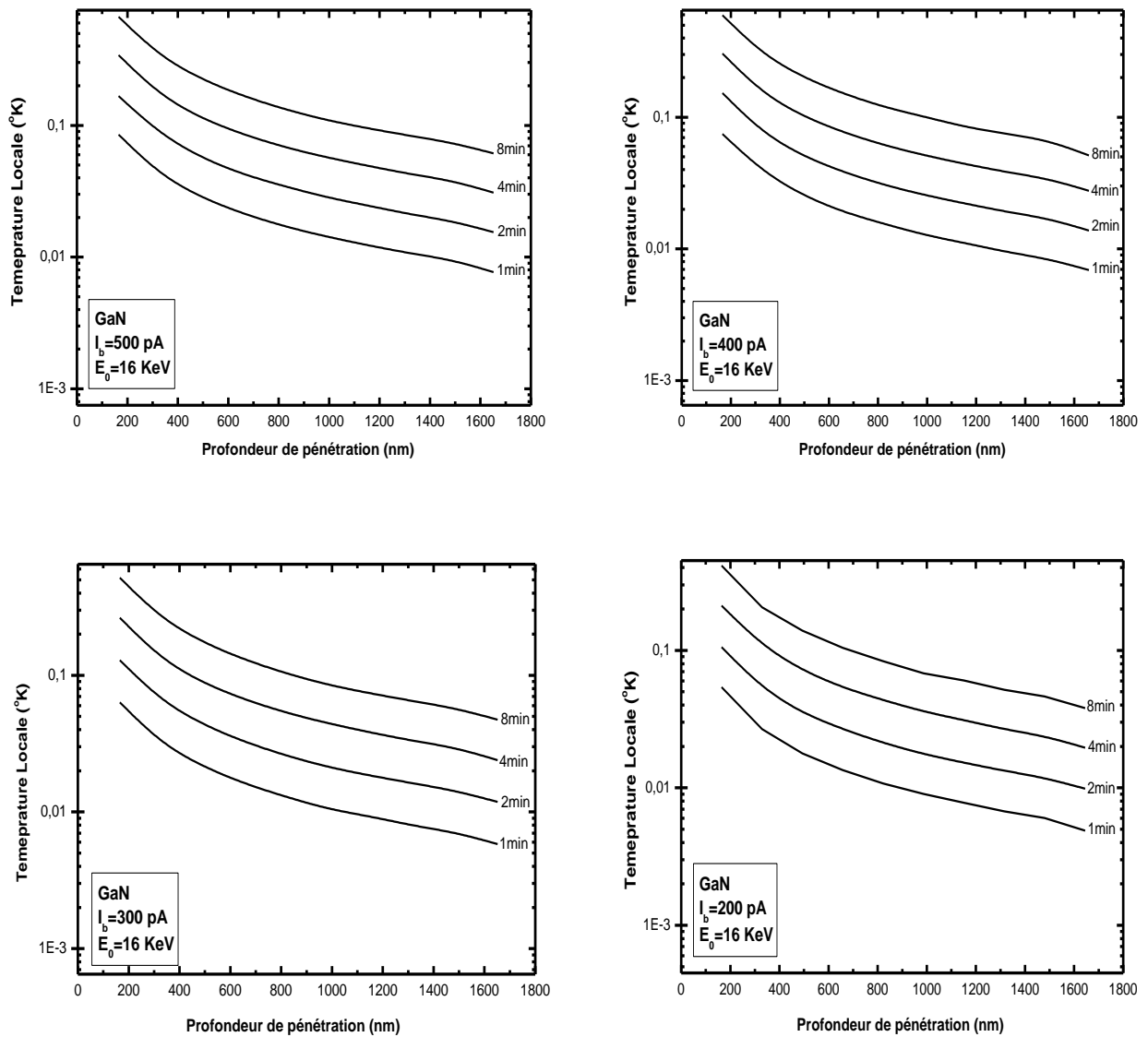
Selon les résultats obtenus, la durée d'irradiation peut modifier les résultats de la caractérisation du matériau à faibles dimensions grâce au chauffage par faisceau d'électrons. Donc pour éviter le chauffage irréversible par faisceau d'électrons, il est préférable d'utiliser des durées courtes dans les expériences de caractérisation surtout pour les bases énergies [19].



**Figure (IV. 20)** Variation de la temperature local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de durée  $t$  (avec un courant de 200, 300, 300 et 500 pA et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 5 KeV).



**Figure (IV. 21)** Variation de la temperature local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de durée  $t$  (avec un courant de 200, 300, 300 et 500 pA et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 8KeV).

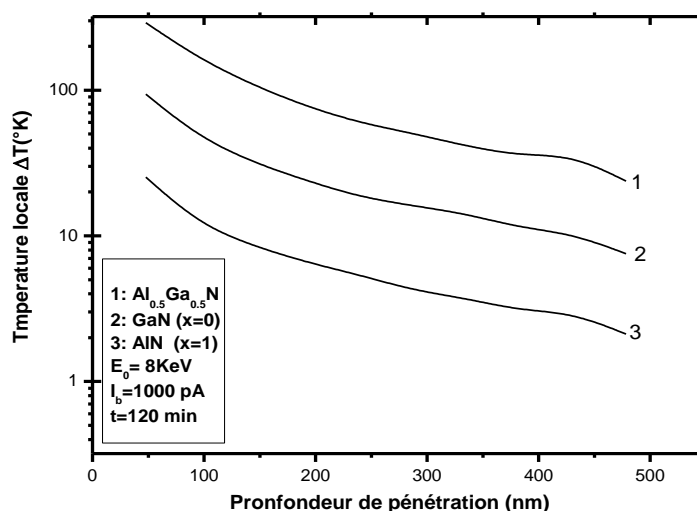


**Figure (IV. 22)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans le GaN pour différentes valeurs de durée  $t$  (avec un courant de 200, 300, 300 et 500 pA et d'une énergie d'accélération  $E_0$  de 16 KeV).

#### VI.4. L'effet de la fraction molaire (x%)

La figure (IV. 23) montre l'élévation de température en AlN, GaN et  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$  respectivement, en fonction de la profondeur lorsque l'énergie accélératrice est égale à 8keV, le faisceau est  $I_p=1000$  pA et la durée d'irradiation est de 120 minute. Il apparaît clairement que l'amplitude de l'élévation de la température locale dans le cas d' $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$  est supérieure à celle de GaN et AlN respectivement. Cela peut s'expliquer par les conductivités thermiques de chaque composé (50 W/mK pour  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ , 130 W/mK pour GaN et 280 W/mK pour AlN). Dans tous les cas, l'élévation de

température prend les valeurs les plus élevées en surface et diminue de façon exponentielle avec la profondeur.



**Figure (IV. 23)** Variation de la température local en fonction de la profondeur de pénétration dans l' $A_xI Ga_{1-x}N$  pour différentes valeurs de la fraction  $x$ .

Globalement la température locale prend des valeurs très élevées dans les couches superficielles, puis diminue considérablement jusqu'à une valeur très faible dans les couches profondes. Autrement dit, pour les couches superficielles, les électrons sont très énergétiques, donc l'interaction provoque une grande vibration des atomes qui conduit à une création d'énergie thermique à cause d'une onde élastique ou inélastique appelée phonon. Cet effet thermique par les vibrations des atomes est transféré aux atomes voisins, puis à l'ensemble du réseau sous forme de chaleur (effet d'échauffement). Les électrons perdent leurs énergies au cours de leur trajectoire. Donc, l'effet d'échauffement décroît en fonction de la profondeur et devient négligeable sur les couches profondes.

### VI.5. La comparaison avec des résultats expérimentaux

Les progrès récents de la microscopie électronique ont permis de mieux comprendre les propriétés structurales, électroniques et optiques de la matière à des échelles de longueur nanométrique et sub-nanométrique. Cela inclut la caractérisation détaillée des nanomatériaux et, de plus en plus, la structure dynamique et les propriétés des nanomatériaux soumis à des perturbations externes. Par exemple, la microscopie électronique in situ a permis récemment l'observation à l'échelle nanométrique des changements structuraux induits par la chaleur des nanoparticules de Pt, des nanofils semi-conducteurs et des nanotubes de carbone et de la structure dynamique des nanoparticules de cuivre catalytiques exposées au monoxyde de carbone [22].

Les microscopies à faisceau d'électrons impliquent le bombardement d'échantillons avec des faisceaux d'électrons énergétiques. Sans surprise, cela peut induire des changements dans le matériau étudié, une observation qui a été utilisée avec succès comme outil de fabrication et de modelage dans des cas choisis, comme dans la lithographie par faisceau électronique [23], la fabrication directe de nanostructures métalliques [24] la formation de nanocristaux inorganiques par fragmentation induite par un faisceau d'électrons (EBIF) [25].

Différents modèles de calcul de l'élévation de température sous un spot de faisceau d'électrons sont proposés comme nous avons mentionné au chapitre précédent. A partir d'une étude du déplacement de la cathodoluminescence (CL) en fonction de la température en CdS, un modèle de détermination de l'élévation de température est proposé. Pour de bons isolants thermiques, avec  $k = 0,1 \text{ W/m.K}$ , une augmentation de température locale de 100 K ou plus peut être anticipée dans des conditions d'imagerie, mais des conductivités thermiques modérément supérieures ( $k = 1-10 \text{ W/m.K}$ ) réduisent cette estimation à des dizaines de degrés [22]. Quelques expériences ont directement mesuré les changements de température adjacents à un faisceau d'électrons incident, améliorant l'exactitude des estimations d'augmentation de température [26,27].

Lorsqu'un semi-conducteur est bombardé par un faisceau d'électrons, une petite fraction des électrons entrants crée des paires électron-trou qui peuvent ensuite se recombiner, émettant un photon avec l'énergie caractéristique de la bande interdite. Comme les bandes interdites des semi-conducteurs se déplacent de façon prévisible vers une énergie plus faible avec une température croissante, le spectre CL de bande interdite résultant reflète la température locale. Cependant, l'énergie d'émission maximale d'un semi-conducteur peut être fortement modifiée par des effets électroniques aussi bien que thermiques [28].

La dépendance vis-à-vis du pouvoir, plutôt que de l'énergie d'accélération, suggère que les dommages évidents à l'échantillon ne sont généralement pas observés dans des conditions d'imagerie standard. Dans un MEB, dans des conditions d'imagerie normales,  $E_0 = 5 \text{ kV}$ , et la puissance résultante du faisceau est typiquement inférieure à  $10 \mu\text{W}$ . Ceci est inférieur à la puissance nécessaire pour un chauffage très extrême et le potentiel associé pour des dommages sérieux, mais toujours suffisant pour induire 100 K ou plus de charges thermiques [28].

En utilisant la dépendance à la température connue de la bande interdite GaN, la température du réseau local peut être déduite de la position du pic CL et suivie en fonction du courant du faisceau. La dépendance à la température des bandes interdites de semi-conducteurs a été décrite par un certain nombre de modèles semi-empiriques et théoriques. La relation de Varshni (voir chapitre I) est le modèle semi-empirique le plus basique qui correspond aux données expérimentales, mais il a peu

de base théorique. La dépendance en température des bandes interdites de semi-conducteurs a été décrite par un certain nombre de modèles semi-empiriques et théoriques [28].

Pour étudier le mécanisme d'un chauffage aussi important, les variations de température sont mesurées à différentes énergie d'accélération de faisceau La distribution en profondeur d'un centre luminescent est profilée en faisant varier  $E_0$  et en ajustant  $I_b$  pour maintenir une puissance de faisceau constante ( $E_0 I_b$ ). La puissance d'excitation ( $I_b E_0$ ), qui est proportionnelle à la vitesse de génération de porteurs en excès, a été contrôlée en maintenant l'énergie d'accélération ( $E_0$ ) constante tout en faisant varier le courant du faisceau ( $I_b$ ).

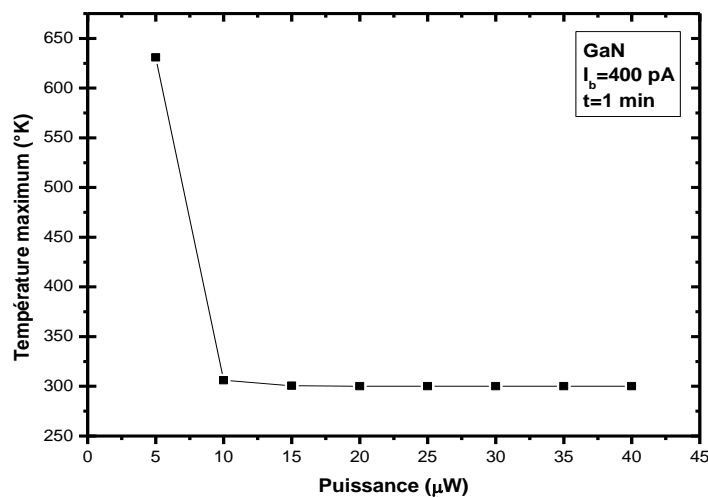


Figure (IV. 24) Variation de la température maximum en fonction de la puissance dans le GaN.

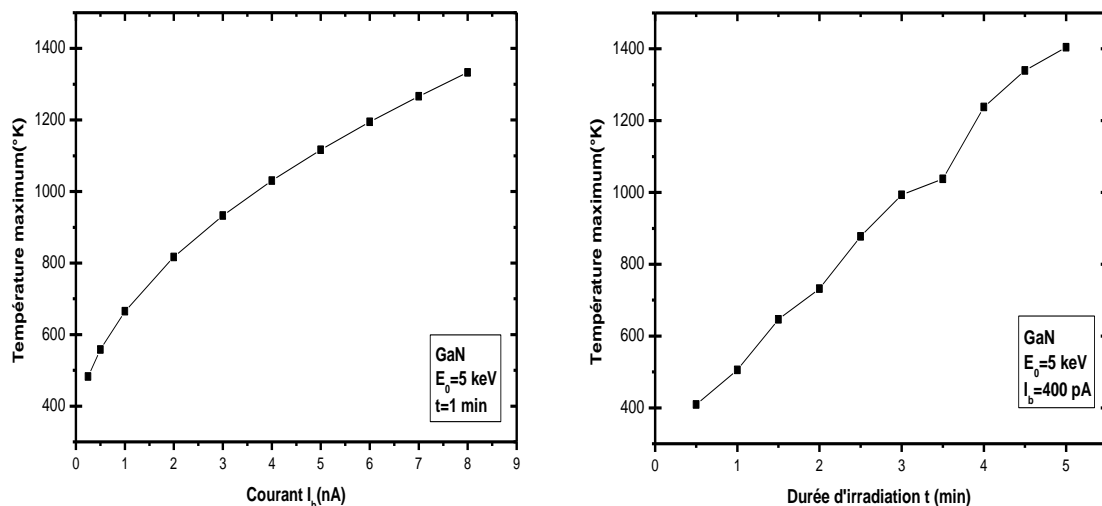
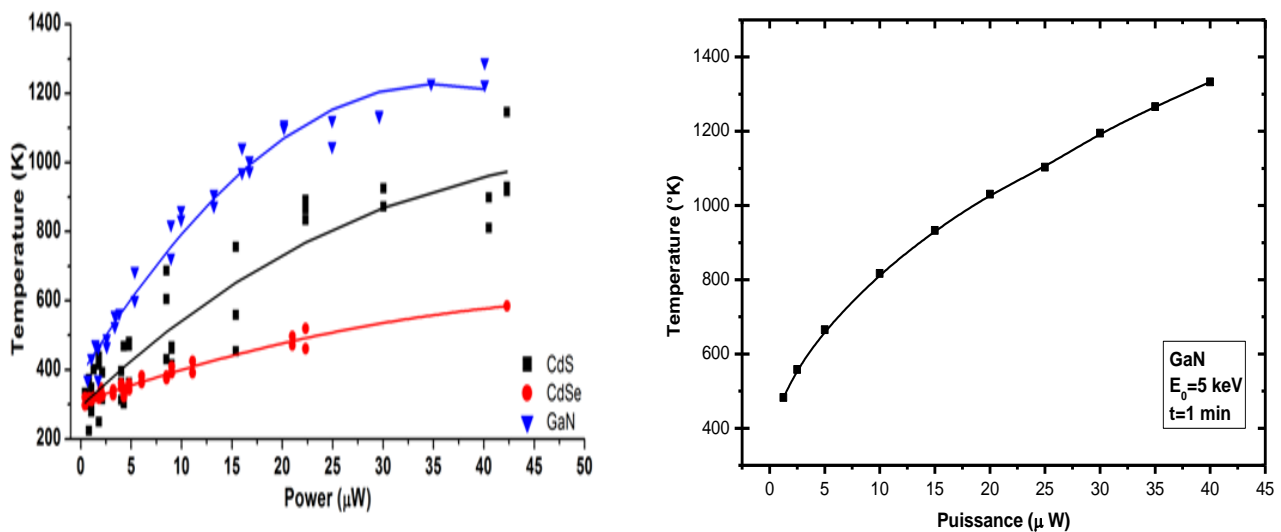


Figure (IV. 25) Variation de la température maximum en fonction de :a) de courant  $I_b$  et b) de la durée d'irradiation dans le GaN.

Afin de contrôler les effets de la structure cristalline et des joints de grains sur l'augmentation de la température, des microfils de GaN monocristallins ont été soumis à une irradiation par faisceau d'électrons. Ces fils conviennent bien à cette expérience dans la mesure où ils possèdent une luminescence intense au bord de la bande qui facilite les études de CL à microfils. Les spectres CL sont ajustés pour déterminer les positions des pics, ces valeurs de pics sont comparées à celles des courants de faisceau, puis l'équation O'Donnell et Chen est utilisée pour dériver le changement de température. Les températures résultantes, atteintes dans la plage des conditions d'imagerie conventionnelles, peuvent dépasser 1000 K (figure IV. 27) [22].



**Figure (IV. 27)** Variation de la température maximum en fonction de la puissance dans le GaN : comparaison des résultats de simulation (à droite) avec ceux de l'expérience (à gauche) [22].

La figure (IV. 27) montre une comparaison des résultats obtenus via la simulation (droite) avec ceux des données expérimentales (gauche) obtenus par [22] pour un échantillon de GaN. D'après Caldwell et al. [22], l'EBIF se révèle être un phénomène beaucoup plus général que ce qui a été rapporté précédemment dans la littérature, avec des matériaux allant des métaux aux semi-conducteurs en passant par les isolants présentant le phénomène. L'inclusion de semi-conducteurs dans la liste des matériaux démontrant l'EBIF permet de quantifier les augmentations de température locales par spectroscopie CL.

Les températures locales augmentent de manière remarquable pour tous les semi-conducteurs étudiés, dépassant 1000 K pour les monocristallins de GaN et pour le CdS à l'échelle micrométrique, le degré de chauffage étant en corrélation avec l'ampleur du couplage électron-phonon. Ces températures élevées indiquent une contribution thermique significative à l'EBIF, en accord avec les

hypothèses antérieures selon lesquelles l'EBIF se produit par un mécanisme dans lequel les matériaux passent par une transition de phase induite thermiquement.

L'universalité du chauffage induit par le faisceau électronique peut être mise à profit pour préparer des nanocristaux de matériaux qui sont autrement difficiles à synthétiser par voie chimique. En utilisant cette boucle de rétroaction, EBIF peut être facilement contrôlé en ajustant le courant et la tension du faisceau, et peut être utilisé comme une méthode générale pour la production de nanocristaux en recherchant des propriétés dépendantes de la taille [23].

**Tableaux (IV.1, IV.2, IV.3, et IV.4)** Paramètres du faisceau d'électrons utilisés pour les calculs de la température: énergie d'accélération  $E_0$ , profondeur de pénétration  $R_e$  calculée à partir du model proposé, et le courant de faisceau  $I_b$ .

$E_0$ (keV)	5	10	15	20	25	30	35	40
Durée t (min)	1	1	1	1	1	1	1	1
$I_b$ (nA)	1	1	1	1	1	1	1	1
$P=I_bE_0$ ( $\mu$ W)	5	10	15	20	25	30	35	40
R ( $\mu$ m)	0.16	0.64	1.45	2.59	4.03	5.80	7.89	10.31
Température maximum ( $^{\circ}$ K)	630.93	306.08	300.52	300.096	300.025	300.008	300.003	300.001

$E_0$ (keV)	5	10	15	20	25	30	35	40
Durée t (min)	5	5	5	5	5	5	5	5
$I_b$ (nA)	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
$P=I_bE_0$ ( $\mu$ W)	1	2	3	4	5	6	7	8
R ( $\mu$ m)	0.16	0.64	1.45	2.59	4.03	5.80	7.89	10.31
Température maximum ( $^{\circ}$ K)	1128	313.21	301.17	300.21	300.057	300.018	300.007	300.003

$E_0$ (keV)	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Durée t (min)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$I_b$ (nA)	0.25	0.5	1	2	3	4	5	6	7	8
$P=I_bE_0$ ( $\mu$ W)	1.25	2.5	5	10	15	20	25	30	35	40
R ( $\mu$ m)	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16
Température maximum ( $^{\circ}$ K)	482.65	558.30	665.30	816.61	932.72	1030.60	1116.84	1194.80	1266.50	1333.23

$E_0$ (keV)	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
<b>Durée t (min)</b>	<b>0.5</b>	<b>1</b>	<b>1.5</b>	<b>2</b>	<b>2.5</b>	<b>3</b>	<b>3.5</b>	<b>4</b>	<b>4.5</b>	<b>5</b>
$I_b$ (nA)	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
$P=I_b E_0$ ( $\mu$ W)	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
R ( $\mu$ m)	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16
Température maximum ( $^{\circ}$ K)	409.14	505.70	646.55	731.92	877.59	993.10	1037.68	1237.89	1339.66	1404.0

### VI.6. La distribution de la température locale dans des heterostructures AlN/ $Al_xGa_{1-x}$ N/AIN

L'imagerie de la distribution de la température à l'échelle nanométrique constitue un défi majeur dans divers domaines de la science et de la technologie. Des points chauds nanoscopiques, tels que ceux observés dans des circuits intégrés ou des nanostructures plasmoniques, peuvent être utilisés pour modifier les propriétés locales de la matière, régir les processus physiques, activer des réactions chimiques et déclencher des mécanismes biologiques dans les organismes vivants [37].

Les températures des dispositifs AlGaN/GaN ont été mesurées auparavant par des méthodes micro-Raman visibles ou ultraviolets [30,34] et par microscopie thermique à balayage [35]. Les résultats expérimentaux [30,31,32,34] et de simulation [31,33,34] montrent que des points chauds et des dislocations se forment près de la porte du côté du drain. Les dislocations et les défauts de semi-conducteurs peuvent dégrader la mobilité, la répartition de la chaleur et les caractéristiques du dispositif. Des mesures précises de la température locale des matériaux sont importantes pour la modélisation des appareils et l'analyse des défaillances.

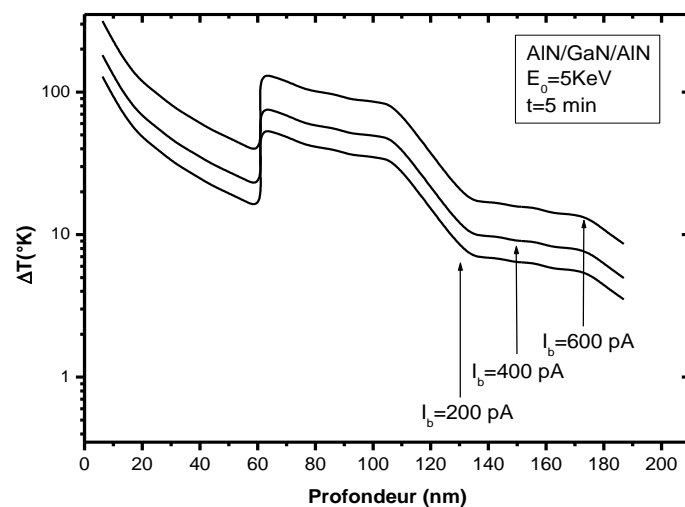
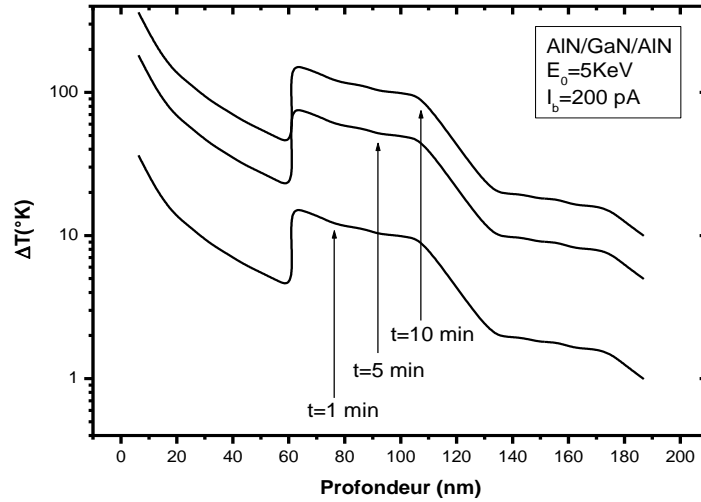
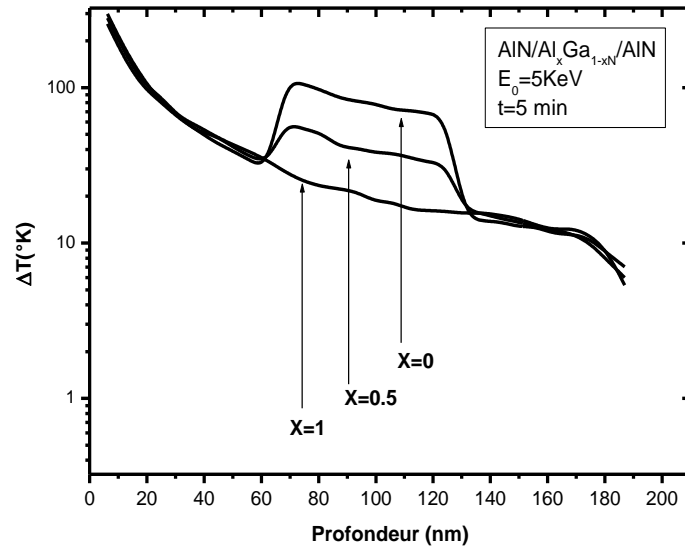


Figure (IV. 28) Variation de la température locale dans heterostructures AlN/GaN/AIN.



**Figure (IV. 29)** Variation de la température locale dans heterostructures AlN/GaN/AlN.



**Figure (IV. 30)** Variation de la température locale dans heterostructures AlN/GaN/AlN.

Les distributions de la température locale causé par le faisceau d'électrons dans des heterostructures AlN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN et GaN/ Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N /GaN sont présentées dans les figures (IV. 28), (IV. 29) et (IV. 30). Il apparait claire que l'augmentation de la temepature locale dans la région de GaN est supérieure a celle de AlN, cela peut s'expliquer par les conductivités thermiques de chaque composé. Il a été constaté que les variations d'intensité de CL dépendaient non seulement des conditions de l'échantillon et du faisceau d'électrons, mais également de la nature des centres de luminescence et de la nature chimique de la surface du matériau. Ainsi, les spectres et les cartes DRCLS [36] montrent que des défauts peuvent s'accumuler localement pour modifier la position du niveau de Fermi en

surface, la flexion de la bande et, par conséquent, le potentiel de surface après le fonctionnement du dispositif.

Globalement, les distributions de la température locale causée par le faisceau d'électrons à résolution nanométrique en profondeur peuvent être utilisées pour décrire les mécanismes de défaillance HEMT à base de GaN et pour prévoir la zone du premier au point de la défaillance dans des situations réalistes. De plus, le modèle proposé permet l'exploration de la distribution de la température locale causée par un faisceau d'électron (la cathodoluminescence, tout comme les autres phénomènes de luminescence, dépend fortement de la température) qui va permettre l'estimation de certains paramètres quantitatifs et leurs dépendance à cette température.

#### **VI.7. Une brève synthèse sur l'influence de la température sur les propriétés intrinsèque de GaN**

Généralement, l'influence de la température sur les propriétés intrinsèque de GaN comme par exemple la longueur de diffusion, la mobilité électronique, la conductivité thermique la capacité thermique, l'énergie de gap etc..., a été reportée dans plusieurs travaux dans littérature [29, 39,38]. Mais, l'influence de l'élévation de la température locale due au chauffage d'un faisceau d'électrons sur ces propriétés reste inexplorable. Sachant que la dissipation d'énergie d'un faisceau d'électrons dans un échantillon est le premier paramètre responsable de la génération des signaux utilisés pour la caractérisation des semiconducteurs. D'après Varshni [40] et Fan [41], la diminution de l'énergie de bande interdite d'un semiconducteur lorsque sa température augmente trouve son origine dans les deux mécanismes suivants: i) la dilatation thermique (qui influé sur le paramètre de réseau), qui modifie les positions des bandes de valence et de conduction, ii) les interactions électron-phonon, qui induisent un décalage des positions relatives des bandes de valence et de conduction. C'est ce phénomène qui donne lieu à la plus forte contribution dans la variation en température l'énergie de bande interdite. On a montré que l'irradiation de l'échantillon par le faisceau d'électrons produisait également une augmentation de la température locale et après avoir vu la variation de l'énergie de la bande interdite avec la température (chapitre I), Il est possible de déterminer par exemple la gamme de température de fonctionnement d'une structure laser et de voir la réponse des lasers à puits quantique sous l'effet de la température locale. Et comme la bande interdite est dépendent au paramètre de réseau (ou le coefficient d'expansion thermique qui décrit la dilatation ou la contraction d'un réseau cristallin à une variation de température), de telle sorte qu'en faisant varier le paramètre de réseau par un faisceau d'électrons [42], il est possible de varier la largeur de cette bande interdite, ce qui offre la possibilité de moduler la taille du gap, en agissant tout simplement sur d'autres paramètres comme la longueur d'onde, concentration des porteurs, la mobilité électronique etc...

La longueur de diffusion est un paramètre à connaître lors de la conception d'un composant électronique, comme des cellules solaires. En effet, si les électrodes collectant le courant produit par la cellule sont éloignées d'une distance supérieure à la longueur de diffusion, alors les charges se recombineront avant d'être collectées. Des techniques de caractérisation comme la cathodoluminescence (CL) et le courant induit par un faisceau (EBIC) sont très utilisés pour déterminer ce paramètre, sans oublier la dépendance à la température de ces techniques. La longueur de diffusion des porteurs de charges est exprimée en utilisant la relation d'Einstein qui relie la constante de diffusion, la mobilité des électrons (ou des trous), la constante de Boltzmann, la charge élémentaire, la durée de vie de porteurs de charges et la température [43, 44, 45]. L'augmentation de la longueur de diffusion électronique induite par le faisceau d'électrons dans les super-réseaux de GaN et AlGaN/GaN de type p rapportée par Chernyak et al [46]. Ainsi des mesures EBIC et CL en fonction de la température sous excitation électronique continue ont permis de déterminer l'énergie d'activation pour les modifications induites par l'irradiation [47]. Lopatiuk et al. [48] ont montré que l'irradiation par le faisceau du MEB entraînait une augmentation notable de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires dans les composés contenant des espèces formant des niveaux d'accepteur profonds. Cette augmentation était associée à une augmentation de la durée de vie induite par l'irradiation, comme en témoigne la décroissance de l'intensité de la cathodoluminescence. Dans tous les cas, le taux de cette augmentation diminue avec l'augmentation de la température de l'échantillon, ce qui indique qu'il existe un processus concurrent qui neutralise les effets de l'irradiation électronique.

## **Conclusion**

Le modèle numérique basé sur la méthode de Monte Carlo qui a été proposé dans ce présent travail décrit l'interaction du faisceau d'électrons avec le GaN et ses alliages. Tout d'abord, le calcul de la profondeur de pénétration des électrons, la trajectoire des électrons, le signal de cathodoluminescence (CL) et le courant induit par faisceau électronique (EBIC) en fonction des paramètres de faisceau électronique a été fait. Concernant l'augmentation de la température due au bombardement de faisceau d'électrons, et selon les résultats obtenus, le faisceau d'électrons peut modifier les propriétés du matériau à l'échelle nanométrique en raison du chauffage par faisceau d'électrons, qui dépend des paramètres du faisceau d'électrons (tension accélérée, courant primaire et durée de l'irradiation). Selon ce modèle, l'augmentation de température croît linéairement avec la croissance du nombre d'électrons (courant absorbé) et décroît avec l'augmentation de l'énergie d'accélération qui dépend du volume de génération. Enfin, une comparaison des résultats de la répartition de la température due au bombardement du faisceau d'électrons a été faite avec des résultats expérimentaux reportés dans la littérature.

## VII. Références bibliographiques du chapitre IV

- [1] A. Nouri, "Theoretical calculation of cathodoluminescence. Influence of surface and bulk physical parameters: Application at p-GaAs", Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Constantine (2000).
- [2] N. Belabed, L'effet de la température dans la technique Cathodoluminescence par la méthode Monte Carlo, These de doctorat, Université de Constantine (2006).
- [3] R. Aouati, "Etude de l'interaction électron-matière des nanostructures de l'arséniure de gallium", These de doctorat, Université de Constantine (2011).
- [4] D.B. Wittry and D.F. Kyser, "Measurement of diffusion lengths in direct-gap semiconductors by electron-beam excitation", J. Appl. Phys. 38, pp.375-382 (1967).
- [5] T. Everhart, and P. Hoff, "Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials", J. Appl. Phys.42, pp.5837-5846 (1971).
- [6] K. Kanaya and S. Okayma, "Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets", J. Phys. D: Appl. Phys., 5, 43 (1972).
- [7] D.J. As, S. Potthast, U. Köhler, A. Khartchenko and K. Lischka, "Cathodoluminescence of MBE-grown cubic AlGa<sub>x</sub>N/GaN multi-quantum wells on GaAs (001) substrates", Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 743, L5.4.1- L5.4.6 . (2003).
- [8] K.J. Lethy, P.R. Edwards, C. Liu, P.A. Shields, D.W.E. Allsopp and R.W. Martin "Cathodoluminescence studies of GaN coalesced from nano-pyramids selectively grown by MOVPE", Semicond. Sci. Technol., 27, 08501 (2012).
- [9] J. Kuhr and H. Fitting "Monte-Carlo simulation of low energy electron scattering in solids". Phys Status Solidi (A) Appl Res 172, 433 (1999).
- [10] J.I. Pankove, H. P. Maruska, and J. E. Berkeyheiser, "Optical absorption of GaN ", Appl. Phys Lett, 17, 5 (1970).
- [11] L. Leghrib and A. Nouri, Monte Carlo model to study Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N nanostructure under an electron beam. Influence of aluminum mole fraction, Journal of New Technology and Materials (JNTM), Vol. 04, N°01, pp. 134-137(2014).
- [12] M. Ledra, "Simulation Monte Carlo du contraste de recombinaison des défauts étendus dans les semi-conducteurs These de doctorat, Université de Mentouri Constantine (2006).
- [13] K. Bunker, "Developpement and application of electron beam induced current and cathodoluminescence analytical techniques for characterization of gallium nitrides-based devices", thèse de doctorat (PhD) de l'université de Raleigh (2004).
- [14] B. Latour, "Contribution à l'étude du transport d'énergie dans la matière condensée: phonons, électrons et photons", These de doctorat de l'université de Paris-Scalay (2015).
- [15] M. A. McCord and M.J. Rooks, Handbook of Microlithography, Micromachining and Micro-fabrication: Microlithography; Ed.; Institution of Engineering and Technology, Vol. 1. (1997).
- [16] D.G. Cahill, W.K. Ford, Kenneth E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin and S.R. Phillpot, Nanoscale thermal transport, J. Appl. Phys., Vol. 93, No. 2, 15 (2003).
- [17] J. Barjon, Etude d'un laser UV compact à semiconducteurs (Al, Ga) N pompé par micropointes, These de doctorat de l'Institut National Polytechnique Grenoble (2002).
- [18] A. Nouri, S. Chaguetmi and N. Belabed, " Monte Carlo model of the temperature rise at a GaAs surface under an electron beam", Surface and interface analysis, 38(7), pp.1153-1157(2006).

- [19] L. Leghrib and A. Nouri, "Local temperature rise during the electron beam characterization .Calculation model for the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  at low dimensions", *Materials Science-Poland*, 36(1), pp. 51-55 (2018).
- [20] A. Nouri, L. Leghrib and R. Aouati, "Characterization of GaN nanostructures by electron beam techniques. Calculation of thermal effect", *Global Journal on Advances in Pure & Applied Sciences*, Issue 6, pp.8-17 (2015).
- [21] L. Weili, A.B. Alexander, " Temperature dependence of thermal conductivity of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  thin films measured by the differential 3v technique" *Appl. Phys. Lett.*, 85 (2004), 5230.
- [22] M. Caldwell, B. Haynor, S. Aloni, D.F. Ogletree, H.-S.P. Wong, J.J. Urban and D.J. Milliron, "Spectroscopic Evidence for Exceptional Thermal Contribution to Electron-Beam Induced Fragmentation", *J. Phys. Chem. C*. 114, (2010).
- [23] M. A. McCord and M.J. Rooks, *Handbook of Microlithography, Micromachining and Micro-fabrication: Microlithography*; Ed.; Institution of Engineering and Technology, Vol. 1. (1997).
- [24] M.D. Fischbein and M. Drndic, "Sub-10 nm Device Fabrication in a Transmission Electron Microscope" *Nano Letters*, 7, 1329-1337 (2007).
- [25] W. D. Pyrz, S. Park, T. Vogt, and D. J. Buttrey, "Electron Beam Induced Fragmentation (EBIF) and Dispersion of Bi-Ni Nanoparticles," *J. Phys. Chem. C* 111, 10824 - 10828 (2007).
- [26] S. Achour, "Cathodoluminescence determination of the temperature rise in CdS under an electron beam spot", *Phil.Mag.B*, 62, 3, P.329 (1990).
- [27] K. Lee and T.H. Myers, "The use of Cathodoluminescence during Molecular Beam Epitaxy Growth of Gallium Nitride to Determine Substrate Temperature", *Journal of Electronic materials*, Vol. 36, No. 4, (2007).
- [28] M.A. Caldwell, "Colloidal nano-particles for phase change memory applications", these de doctorat de l'université de Stanford (2011).
- [29] C. Hodges, J. Anaya Calvo, S. Stoffels, D. Marcon, and M. Kuball, AlGaIn/GaN field effect transistors for power electronics-Effect of finite GaN layer thickness on thermal characteristics, *Appl. Phys. Lett.* 103, 202108 (2013).
- [30] M. Kuball, J. M. Hayes, M. J. Uren, T. Martin, J. C. H. Birbeck, R. S. Balmer, and B. T. Hughes, *IEEE Electron Device Lett.* 23, 7 (2002).
- [31] M. Kuball, S. Rajasingam, A. Sarua, M. J. Uren, T. Martin, B. T. Hughes, K. P. Hilton, and R. S. Balmer, Measurement of temperature distribution in multifinger AlGaIn/GaN heterostructure field-effect transistors using micro-Raman spectroscopy, *Appl. Phys. Lett.* 82, 124 (2003).
- [32] J. W. Pomeroy, M. Kuball, M. J. Uren, K. P. Hilton, R. S. Balmer, and T. Martin, Insights into electroluminescent emission from AlGaIn/GaN field effect transistors using micro-Raman thermal analysis, *Appl. Phys. Lett.* 88, 023507 (2006).
- [33] I. Ahmad, V. Kasisomayajula, M. Holtz, J. M. Berg, S. R. Kurtz, C. P. Tigges, A. A. Allerman, and A. G. Baca, *Appl. Phys. Lett.* 86, 173503 (2005).
- [34] I. Ahmad, V. Kasisomayajula, D. Y. Song, L. Tian, J. M. Berg, and M. Holtz, Self-heating in a GaN based heterostructure field effect transistor: Ultraviolet and visible Raman measurements and simulations *J. Appl. Phys.* 100, 113718 (2006).
- [35] R. Aubry, J.-C. Jacquet, J. Weaver, O. Durand, P. Dobson, G. Mills, M.-A. di Forte-Poisson, S. Cassette, and S.-L. Delage, *IEEE Trans. Electron Devices* 54, 385(2007).

- [36] C.-H. Lin, T. A. Merz, D. R. Doutt, M. J. Hetzer, J. Joh, J. A. del Alamo, U. K. Mishra, and L. J. Brillson, "Nanoscale mapping of temperature and defect evolution inside operating AlGaIn/GaN high electron mobility transistors", *Appl. Phys. Lett.* 95, 033510 (2009).
- [37] F. Menges, P. Mensch, H. Schmid, H. Riel, A. Stemmer and B. Gotsmann, Temperature mapping of operating nanoscale devices by scanning probe thermometry, *Nature Communications* , 7, 10874 (2016).
- [38] T. Batten, A. Manoi, M. J. Uren, T. Martin, and M. Kuball, "Temperature analysis of AlGaIn/GaN based devices using photoluminescence spectroscopy: Challenges and comparison to Raman thermography", *J. Appl. Phys.* 107, 074502 (2010).
- [39] M. Kuball and J. W. Pomeroy , "A Review of Raman Thermography For Electronic and Opto-Electronic Device Measurement with Sub-micron Spatial and Nanosecond Temporal Resolution", *IEEE ,TDMR*-(2016).
- [40] Y.P.Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors" *Physica*, vol.34, pp. 148-154 (1967).
- [41] H.Y. Fan, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors", *Physical Review*, vol. 82, n° 6, pp. 900-905 (1951).
- [42] N. Harris, "Correction for the effect of electron beam heating on Kossel pattern lattice spacing results", *Journal of Materials Science*. Vol. 9, pp.1211-1213(1974).
- [43] N. Belabed, L'effet de la température dans la technique Cathodoluminescence par la méthode Monte Carlo, These de doctorat, Université de Constantine (2006).
- [44] M. Eckstein and H. U. Habermeier, "Numerical-Analysis of the Temperature- Dependence of EBIC and CL Contrasts", *Journal de Physique IV* 1, 23 (1991).
- [45] A. Ourmazd, P. Wilshaw and G. Booker, "the temperature dependence of EBIC contrast from individual dislocation in silicon", *Journal de Physique Colloques*, 44 (C4), pp.C4-289-C4-295 (1983).
- [46] L. Chernyak, A. Osinsky, V. Fuflyigin et al., "Electron beam-induced increase of electron diffusion length in p-type GaN and AlGaIn/GaN superlattices", *Appl. Phys. Lett.* 77, 875 (2000).
- [47] C. M. Schwarz, Radiation effects on wide band gap semiconductor transport properties. Thèse de doctorat (PhD) de l'université de Florida Orlando, Florida (2012).
- [48] O. Lopatiuk-Tirpak, L. Chernyak, Y.L.Wang, F.Ren, S.J.Pearson, K. Gartsman, Y. ,Feldman, "Cathodoluminescence studies of carrier concentration dependence for the electron irradiation effects in p-GaN", *Applied Physics Letters*, 90, 172111 (2007).

## **Conclusion générale**

Dans cette thèse, la technique électron-matière a été théoriquement étudiée pour le GaN et l'AlGaN à faibles dimensions. La distribution de température induite par l'énergie du faisceau d'électrons a été simulée pour vérifier certains résultats expérimentaux. En outre, il est très difficile de mesurer expérimentalement et directement le chauffage, car de nombreuses variables peuvent affecter les résultats, telles que le faisceau de courant, l'énergie d'accélération, la conductivité thermique et la taille des échantillons. Compte tenu de tous les facteurs et afin de déterminer l'élévation locale de la température lors de la caractérisation par faisceau d'électrons de l'AlGaN à faible dimension, nous avons utilisé un modèle hybride basé sur la dynamique moléculaire combinée et le calcul Monte Carlo de l'interaction inélastique des électrons avec la matière.

Le modèle que nous avons proposé, permet de prédire judicieusement les valeurs de la température locale causée par le faisceau électronique, donc le but principal est d'optimiser les paramètres physiques afin d'aboutir au meilleur rendement possible. Alors que un certain nombre de modèles ont été proposés pour prédire l'augmentation de la température dans les échantillons lors de l'exposition au faisceau d'électrons, mais les résultats sont très différents selon les paramètres d'entrée, la géométrie de l'échantillon et l'élévation de température n'est pas traitée en fonction de la profondeur. Premièrement, les simulations de pénétration d'électrons et de perte d'énergie étaient censées fournir des informations sur un éventuel échauffement localisé. Avant ça, la trajectoire électronique, le volume de génération, ainsi que la profondeur de pénétration sont calculées par notre modèle pour le GaN ainsi que l'influence de la fraction molaire  $x$  qui a été étudiée. Le signal cathodoluminescence ( $I_{CL}$ ) et le courant induit par faisceau électronique ( $I_{CC}$ ) ont été calculés pour le  $Al_xGa_{1-x}N$ , les signaux ont été calculés en fonction des paramètres qui sont responsables de la variation des signaux  $I_{CL}$  et  $I_{CC}$  et de la résolution, comme la longueur de diffusion  $L_D$ , l'énergie d'accélération  $E_0$  et la fraction molaire  $x$ .

Les effets thermiques calculés à l'aide du modèle proposé semblent très raisonnables et concordent avec les observations et les calculs approximatifs rapportés dans la littérature [28]. L'élévation de température qui en résulte est en unités ou en dizaines de degrés °C pour le matériau examiné, de sorte que la possibilité que le processus soit entraîné thermiquement peut être écartée. Les estimations de l'élévation de température dues aux effets engendrées par un faisceau électronique à l'augmentation des tensions d'accélération indiquent que les données initiales contrôlées de courant de sonde, la durée de caractérisation ainsi que l'énergie du faisceau peut conduire à un résultat significatif.

À faible énergie des électrons incidents, l'effet d'absorption est moins important parce que le volume d'interaction est plus proche de la surface. Si l'absorption est prise en compte, on peut remarquer l'influence de l'énergie de l'irradiation à laquelle le phénomène devient important. À plus

haute énergie de faisceau, le faisceau d'électrons peut pénétrer plus profondément, mais l'élévation de la température locale est faible à cause de grand volume de génération qui dépend de profondeur de pénétration.

Une comparaison entre la température calculée et une expérience visait à vérifier le modèle proposé. Pour des conditions expérimentales typiques, la simulation suggère que la température locale diminue avec l'augmentation de l'énergie du faisceau (élargissement de volume de génération) elle dépend fortement du volume d'interaction des électrons. Il a également été déterminé par simulation que la température augmente lorsque courant de du faisceau augmente pour des bases énergies. Selon le modèle, les conditions typiques expérimentales sont capables de générer des augmentations de température considérable, une température qui a été démontrée expérimentalement capable d'atteindre une valeur considérable de 1200 °K [28] (la température ambiante  $T_0$  plus l'élévation de la température locale  $\Delta T$ ) pour une énergie de 5 KeV, un courant de 1nA et une durée de bombardement d'une minute. Les résultats de la simulation obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux [28].

En pratique, lors de la caractérisation par techniques de faisceaux d'électrons comprenant le microscope électronique à balayage et la cathodoluminescence à faibles dimensions, certains phénomènes indésirables (effets indésirables), comme les effets thermiques (ou dommages par faisceau d'électrons), peuvent endommager l'échantillon. Il aura des changements dans les propriétés thermo-physiques (densité, chaleur spécifique et conductivité) en fonction de l'état de matériau. Néanmoins, le chauffage induit par faisceau pourrait devenir pertinent si:

- 1) Le faisceau est condensé jusqu'à une sonde de taille nanométrique et est dirigé vers une région de l'échantillon ou des densités de courant élevées peuvent déposer de grandes quantités d'énergie dans une petite zone, augmentant considérablement la température locale.
- 2) L'échantillon a une faible conductivité thermique, ce type de matériaux est incapable de dissiper efficacement la chaleur, ce qui peut entraîner une augmentation considérable de la température locale dans le volume irradié.
- 3) L'échantillon a un point de fusion faible ou une faible dimensionnalité. Les matériaux à bas point de fusion peuvent subir des changements structurels même si le chauffage induit par le faisceau n'est pas suffisamment élevé.

Et comme prévention, un terme de correction du chauffage par faisceau d'électrons (élévation de température) doit être pris en compte lors de l'analyse avec le MEB pour améliorer les résultats de la caractérisation du matériau, en particulier à l'échelle nanométrique (puits quantiques).

Globalement, l'ensemble des ces résultats obtenus fournissent les conditions d'entrée nécessaires au transfert thermique pour prédire les propriétés et la performance du matériau étudié. Ce travail n'est qu'une première approche et il suggère un certain nombre d'études complémentaires. Le résultat désiré est alors l'élucidation des mécanismes physiques qui sont responsables des phénomènes observés durant la caractérisation utilisant généralement des outils basées essentiellement sur l'interaction electron matière.

Un avantage important des simulations est celui que les différents effets physiques qui sont simultanément présents dans certains systèmes peuvent être isolés, et par conséquence cette séparation fourni bien une meilleure compréhension. Nous souhaitons souligner que le but des simulations n'est pas seulement de fournir un ajustement de courbes aux données expérimentales plus mieux que celui de la théorie analytique, mais le but est de créer une compréhension des propriétés et des processus physiques qui sont aussi complètes que possible, en se servant de la commande parfaite des conditions expérimentales dans l'ordinateur et de la possibilité d'examiner chaque aspect des configurations de système en détail. En fin, ce travail n'est qu'une première approche et il suggère un certain nombre d'études complémentaires.

### **Liste des publications issues de ce travail**

**L. Leghrib** and A. Nouiri, "Monte Carlo model to study  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  nanostructure under an electron beam. Influence of aluminum mole fraction", Journal of New Technology and Materials (JNTM), Vol. 04, N°01, pp. 134-137(2014).

A. Nouiri, **L. Leghrib** and R. Aouati, "Characterization of GaN nanostructures by electron beam techniques. Calculation of thermal effect", Global Journal on Advances in Pure & Applied Sciences, Issue 6, pp.8-17 (2015).

**L. Leghrib** and A. Nouiri, "Local temperature rise during the electron beam characterization .Calculation model for the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  at low dimensions", Materials Science-Poland, 36(1), pp. 51-55 (2018).

### **Conférences internationales**

**L. Leghrib** and A. Nouiri, "Monte Carlo model to study  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  nanostructure under an electron beam. Influence of aluminum mole fraction", second Internationals Conférences of New Materials and Active Devices (NMCA), Oum El- Bouaghi (Algeria), May 25th-26th(2014).

A. Nouiri, **L. Leghrib** and R. Aouati, "Characterization of GaN nanostructures by electron beam techniques. Calculation of thermal effect", Global Conference on Materials Sciences (GC-MAS-2014), 13-15 November 2014, Queen Elizabeth Hotel, Kemer, Antalya, Turkey.

## دراسة محاكاة لنتريد الغاليوم وسبائكه

### ملخص

إن الاهتمام بأشباه الموصلات على سبيل المثال نتريد الجاليوم وسبائكه يكمن في تطبيقاتها العديدة في مجال الالكترونيات البصرية . فسيائك الجاليوم تمتلك فجوة مباشرة قابلة للتعديل وبالتالي استخدامها في مجال الالكترونيات الضوئية. لذلك يتم إجراء الكثير من الأبحاث لإيجاد المواد التي تلبى المتطلبات المتزايدة لصناعة الالكترونيات الدقيقة. وبمأن درجة الحرارة متضمنة في المكونات القائمة على أشباه الموصلات فإن هذا يترجم إلى خواصها الفيزيائية التي تقلل من أداء هذه المكونات. وهكذا أدت التطورات الحديثة في المجهر الالكتروني إلى فهم أفضل للخصائص الهيكلية والالكترونية والبصرية للمادة على مقياس النانومتر. وهذا يشمل التحديد التفصيلي للبنى النانوية، على سبيل جعل المجهر الالكتروني الماسح في الآونة ممن الممكن مراقبة التغيرات الهيكلية الناجمة عن شعاع الالكترون على القياس النانوي. مما لا يثير الدهشة، قد يؤدي هذا إلى تغيرات في المواد التي يتم دراستها (التسخين)، وهي الملاحظة تم استخدامها بنجاح كأداة تصنيع في حالات مختارة، كما هو الحال في الطباعة الحجرية بالالكترونات.

في هذا العمل و باستخدام طريقة مونتني كارلو قمنا بتطوير نموذج رقمي لدراسة أشباه الموصلات (نتريد الجاليوم كما في هذه الدراسة). يتعامل هذا النموذج مع تفاعل مادة-إلكترون، وخاصة التالق المهبطي وحزمة المستحث. وتأخذ عملية الحساب المستخدمة في النمذجة في الحسبان السير العشوائي للالكترونات في المادة و تأثير معاملات حزمة الالكترونات ( كمدة القصف، شدة التيار و طاقة تسريع الالكترونات) ونمذجة التشتت المرن تمت على أساس المقطع العرضي لنموذج روزرفورد، و تتمثل المشكلة الرئيسية التي تم تناولها في هذا الموضوع هو ارتفاع درجة حرارة المادة خلال قصفها بشعاع الكتروني. ويمكن تفسير ازدياد حرارة المادة هذه بسبب نقل الطاقة في تصادم غير مرن للالكترونات الواردة مع نواة المادة. تظهر نتائج الحساب أن درجة الحرارة المحلية تأخذ قيما قصوى على السطح كدالة للعمق، وتزيد درجة الحرارة المحلية مع زيادة عدد الالكترونات، لكن بالنسبة للقيم العالية لشدة التيار و مدة القصف فإن الكثافات و النقصان عندما تزداد درجة الحرارة المحلية على وجه الخصوص. تتم مقارنة هذه النتائج التي تم الحصول عليها من خلال هذا النموذج البسيط المقترح مع النتائج التجريبية الموجودة في المراجع ومع غيرها من النتائج النظرية المتاحة المراجع كذلك وهي على اتفاق جيد، مما سمح لنا بالقول انه على الرغم من بساطة هذا النموذج، فإنه قادر على وصف مواد ذات بنى نانوية بشكل صحيح .

### الكلمات المفتاحية:

نتريد الغاليوم، تفاعل إلكترون-مادة، التالق المهبطي، تيار المستحث، محاكاة مونتني كارلو، التسخين .

## Simulation study of gallium nitride (GaN) and its alloys

### Abstract

The interest of the nitrides of III-V semiconductors (InN, GaN), such as gallium nitrides (GaN) and its alloys, for example, lies in their many applications in the field of optoelectronics: diodes, sensor and solar cells. The GaN alloys have an adjustable direct gap hence their use in the optoelectronic field. Much research is being done to find materials that meet the growing demands of the microelectronics industry. And since temperature is involved in materials in semiconductor-based components (such as GaN), this translates into an evolution of their physical properties that reduce the performance of these components. Thus, recent advances in electron microscopy have led to a better understanding of the structural, electronic and optical properties of matter at scales of nanometric and sub-nanometric length. This includes the detailed characterization of nanostructures. For example, the scanning electron microscope (SEM) recently made it possible to observe at the nanoscale the structural changes induced by the electron beam. Unsurprisingly, this may induce changes in the material being studied (heating), an observation that has been used successfully as a manufacturing tool in selected cases, such as in electron beam lithography. In this work, we have developed a numerical model to study a GaN semiconductor using the Monte Carlo method. This model deals with the electron-matter interaction, in particular the cathodoluminescence (CL) technique and the electron beam induced current (EBIC). The calculation procedure used in this modeling takes into account the random walk of the electrons in the material and the influence of the parameters of the electron beam (beam current  $I_p$ , the acceleration energy  $E_0$  and the duration of bombardment  $t$ ). To describe the electron collisions with matter, the modeling of elastic scattering based on Rutherford's modified screened cross section. The main problem dealt with in this work is the heating of the GaN material during bombardment by the incident electron beam which results in a local temperature increase ( $\Delta T$ ). This temperature could increase due to the energy transfer in an inelastic collision of incoming electrons with atomic electrons in the solid material (GaN). The influence of  $\Delta T$  on the intensity of ICL (CL) and ICC (EBIC) is also studied. Calculation results show that  $\Delta T$  takes maximum values at the surface and then decreases (exponentially) as a function of depth. The values of  $\Delta T$  depend on the beam parameters ( $I_p$  and  $E_0$  and  $t$ ).  $\Delta T$  increases with the increase in the number of electrons, especially in the wells (GaN) in the case of AlN/GaN/AlN heterostructures. On the other hand, it decreased with the increase of  $E_0$ . Regarding the ICL and ICC signals, there is no influence in the case of low injection (low  $I_p$ ). But for high values of current  $I_p$  and duration of bombardment  $t$ , the intensities of ICL and ICC decreases when  $\Delta T$  increases, in particular, for the low values of  $E_0$ . These results obtained by the simple proposed model are compared with those of experimental results in the literature, and with other theoretical results available in the literature as well. They are in good agreement, which allowed us to see that despite the simplicity of the numerical model, it is able to properly characterize nanostructured quantum well materials, and even determine the parameters responsible for the resolution of the CL image and EBIC.

**Key words:** Electron-matter interaction, cathodoluminescence, EBIC, Monte Carlo simulation, heating, GaN.

# Etude par simulation de nitrure de gallium (GaN) et ses alliages

## Résumé

L'intérêt des nitrures des semi-conducteurs III-V ( InN , GaN ), comme le nitrure de gallium (GaN) et ses alliages , par exemple , réside dans leurs nombreuses application dans le domaine de l'optoélectronique : les diode , les capteur et les cellules solaires. Les alliages du GaN présentent un gap direct ajustable d'où leur utilisation dans le domaine optoélectronique. De nombreuses recherches sont menées afin de trouver des matériaux qui répondent aux exigences croissantes de l'industrie de la micro-électronique. Et comme la température intervient dans les matériaux présents dans les composants a base des semiconducteurs (comme le GaN) et cela se traduit par une évolution de leurs propriétés physiques qui réduisent les performances du ces composants. Ainsi, les progrès récents de la microscopie électronique ont permis de mieux comprendre les propriétés structurales, électroniques et optiques de la matière à des échelles de longueur nanométrique et sub-nanométrique. Cela inclut la caractérisation détaillée des nanostructures. Par exemple, le microscope électronique à balayage (MEB) a permis récemment l'observation à l'échelle nanométrique des changements structuraux induits par le faisceau d'électrons. Sans surprise, cela peut induire des changements dans le matériau étudié (échauffement), une observation qui a été utilisée avec succès comme outil de fabrication dans des cas choisis, comme dans la lithographie par faisceau électronique. Dans ce présent travail, nous avons élaboré un modèle numérique pour étudier un matériau semi-conducteur GaN utilisant la méthode Monte Carlo. Ce modèle traite l'interaction électron-matière, en particulier la technique cathodoluminescence (CL) et le courant induit par un faisceau d'électrons (EBIC). La procédure de calcul utilisé dans cette modélisation prend en compte la marche aléatoire des électrons dans la matière et l'influence des paramètres du faisceau électronique (courant de faisceau  $I_p$ , l'énergie d'accélération  $E_0$  et la durée de bombardement  $t$ ). Pour décrire les collisions des électrons avec la matière, la modélisation de la diffusion élastique étant basée sur la section efficace écrantée modifiée de Rutherford. Le problème principal traité dans ce travail est l'échauffement du matériau GaN pendant le bombardement par le faisceau électronique incident qui se traduit par une augmentation de température locale ( $\Delta T$ ). Cette température pourrait augmenter en raison du transfert d'énergie dans une collision inélastique des électrons entrants avec des électrons atomiques dans le matériau solide (GaN). L'influence de  $\Delta T$  sur l'intensité d' $I_{CL}$  (CL) et d' $I_{CC}$  (EBIC) est aussi étudiée. Les résultats de calcul montrent que  $\Delta T$  prend des valeurs maximales à la surface, puis elle diminue (exponentiellement) en fonction de la profondeur. Les valeurs de  $\Delta T$  dépendent des paramètres du faisceau ( $I_p$  et  $E_0$  et  $t$ ).  $\Delta T$  augmente avec l'augmentation du nombre d'électrons surtout dans les puits (GaN) dans le cas des hétérostructures AlN/GaN/AlN. Par contre, elle diminué avec l'augmentation de  $E_0$ . Concernant les signaux d' $I_{CL}$  et d' $I_{CC}$ , il n'y a aucune influence dans le cas de faible injection (faible  $I_p$ ). Mais pour des valeurs fortes de courant  $I_p$  et de la durée de bombardement  $t$ , les intensités d' $I_{CL}$  et d' $I_{CC}$  diminuent lorsque  $\Delta T$  augmente, en particulier, pour les faibles valeurs d' $E_0$ . Ces résultats obtenus par le simple modèle proposé sont comparés à ceux de résultats expérimentaux dans la littérature, et à d'autres résultats théoriques disponibles dans la littérature aussi. Ils sont en bon accord, ce qui nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle numérique, il est capable de bien caractériser les matériaux nanostructurées à puits quantiques, et même déterminer les paramètres responsables à la résolution de l'image CL et d'EBIC.

**Mots clés :** Interaction électron-matière, cathodoluminescence, EBIC, simulation Monte Carlo, échauffement, GaN.