50376 1990

N° d'ordre : 539

THESE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE FLANDRES ARTOIS

pour l'obtention d'un

DOCTORAT

Spécialité : Sciences des Matériaux

par

INTERUN

Christian de MEERSCHMAN

CARACTERISATION PAR **CATHODOLUMINESCENCE EPITAXIEES ET DE LEURS** DE COUCHES GaAs **DISLOCATIONS**

> soutenue le 26 Juin 1990 d'Examen devant Commission

Président

: M.

E. CONSTANT

Rapporteurs: M.

C. VERIE Professeur . USTL Flandres - Artois Directeur de Recherche . CNRS Sophia Antipolis

M.

Maître de Conférences. Lausanne

M.

J.D. GANIERE J.L. FARVACQUE

Professeur . USTL Flandres - Artois

Examinateurs: M.

Ρ. HENOC Ingénieur . CNET Bagneux

Mile B. SIEBER Chargé de Recherche. CNRS USTL Flandres -

Artois

REMERCIEMENTS

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide (U A 234) de l'Université des Sciences et Techniques de Lille.

Je remercie tout particulièrement Brigitte Sieber pour son soutien constant, sa disponibilité et pour son amitié témoignée au cours de ce travail. Je tiens également à exprimer ma gratitude envers Jean Louis Farvacque pour son aide efficace et pour son enthousiasme communicatif.

J'exprime toute ma gratitude et tous mes remerciements envers Monsieur le Professeur Eugène Constant qui a accepté la présidence de ce jury et envers Messieurs Christian Vérié et Jean Daniel Ganière qui ont accepté d'être rapporteurs de ce mémoire. Je remercie Monsieur Pierre Hénoc pour sa participation à ce jury.

Je tiens à souligner l'aide constante et amicale apportée par tous les membres du laboratoire ainsi que la sympathie témoignée par Messieurs Yves Druelle et Jean Luc Lorriaux. Je les en remercie sincérement.

Je remercie enfin mon épouse qui a participé activement à ce mémoire en rédigeant l'annexe II.

PLAN

		Pa	ages
CHAPITRE I	:	LE MATERIAU : GaAs	3
	1	Structure cristallographique	3
	2	Dislocations dans les composés III - V	3
	3	Rosettes d'indentation sur une face { 100 }	4
	4	Niveaux associés aux dislocations α et ß	5
CHAPITRE II	:	CATHODOLUMINESCENCE DANS LES SEMICONDUCTEURS	8
	1	Interaction électron - matière	8
	2	Taux d'injection	10
	3	Intensité de cathodoluminescence	11
		3 - 1 Etablissement de l'équation de continuité	11
		3 - 2 Intensité de cathodoluminescence I _{CL}	13
	4	Profondeurs de pénétration des électrons	
		incidents. Fonctions de génération des paires électron - trou.	16
	5	Détermination des paramètres physiques d'un	
	6	matériau par cathodoluminescence	19
	U	des paramètres physiques	20
		6 - 1 Détermination de la longueur de	
		diffusion L	20
		6 - 2 Détermination de la vitesse de	0.4
		recombinaison en surface V _S	21
	7	Contraste de cathodoluminescence des	
		dislocations	23

CHAPITRE III	:	TECHNIQUES EXPERIMENTALES	30
	1 2	Microscope Electronique à Balayage (MEB)	30 30
	_		31
		Platine basse température (77 K)	
	4	Préparation des échantillons	31
		4 - 1 Homojonctions GaAs / GaAs / GaAs	31
		4 - 2 Hétérojonctions InP / GalnAs / InP	32
		4 - 3 Introduction des sources de dislocations	32
	5	Réalisation des transistors à effet de champ Expériences effectuées en mode cathodolumi-	33
		nescent	34
		6 - 1 Mesures de I _{CL} = f (E _o)	34
		6 - 2 Mesures de contraste de cathodolumi-	
		nescence	34
CITADITOE IV		CARACTERISATION DES COUCHES	
CHAPITRE IV	•	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI- NESCENCE	
CHAPTIKE IV	1	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI- NESCENCE	37
CHAPTIKE IV		EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI-NESCENCE Position du problème	37 37
CHAPTIKE IV	1	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI-NESCENCE Position du problème	37 37 37
CHAPTIKE IV	1 2	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI- NESCENCE Position du problème Modèle	37 37 37 43
CHAPTIKE IV	1 2	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI- NESCENCE Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion	37 37 37 43
CHAPTIKE IV	1 2	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces	37 37 37 43 43
CHAPTIKE IV	1 2	EPITAXIEES PAR CATHODOLUMI- NESCENCE Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison	37 37 37 43 43 46 46
CHAPTIKE IV	1 2	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces 3 - 3 Influence du coefficient d'absorption	37 37 37 43 43 46 46 47
CHAPTIKE IV	1 2 3	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces 3 - 3 Influence du coefficient d'absorption 3 - 4 Discussion des courbes I _{CL} = f (E _o)	37 37 43 43 46 46 47 49
CHAPTIKE IV	1 2 3	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces 3 - 3 Influence du coefficient d'absorption 3 - 4 Discussion des courbes I _{CL} = f (E _o) Résultats expérimentaux	37 37 37 43 43 46 46 47 49
CHAPTIKE IV	1 2 3	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces 3 - 3 Influence du coefficient d'absorption 3 - 4 Discussion des courbes I _{CL} = f (E _o) Résultats expérimentaux 4 - 1 Configuration 1	37 37 43 43 46 46 47 49 51
CHAPTIKE IV	1 2 3	Position du problème Modèle Résultats numériques 3 - 1 Influence des longueurs de diffusion 3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces 3 - 3 Influence du coefficient d'absorption 3 - 4 Discussion des courbes I _{CL} = f (E _o) Résultats expérimentaux 4 - 1 Configuration 1 4 - 2 Configuration 2	37 37 37 43 43 46 46 47 49 51 51

CHAPITRE V	: CO	NTRASTE DE CATHODOLUMINES -	
	CE	NCE DES DISLOCATIONS	57
I Résultats	expérin	nentaux	57
	I - 1 I - 2	Procédure expérimentale Contraste	57 59
		(),	59 60
II Interpréta	ation		62
	II - 1 II - 2	Position du problème Théorie du contraste de cathodolumi- nescence d'une dislocation perpendi- culaire à la surface	62 63
	II - 3 II - 4	•	68 69
III Discuss	sion		71

CONCLUSION

ANNEXE I

ANNEXE II

ANNEXE III

INTRODUCTION

Les composés III - V tels que l'Arséniure de Gallium sont les matériaux de base pour la réalisation de composants optoélectroniques; la qualité de ces derniers est fortement liée à la concentration de défauts introduits durant la croissance ou au cours du fonctionnement. La non uniformité des caractéristiques de ces composants (comme par exemple les différences de tension de pincement entre les transistors à effet de champ d'une même plaquette) est un problème majeur pour leur fabrication industrielle. Ces derniers sont constitués de couches semiconductrices déposées sur un substrat à l'aide de différentes techniques telles que la MBE (Molecular Beam Epitaxy) par exemple. Les dislocations et leurs propriétés ont donné lieu à de nombreuses études utilisant le plus souvent des techniques d'imagerie, comme la microscopie électronique en transmission par exemple. Ces techniques sont sont fondamentales dans l'étude cristallographique du matériau mais ne permettent pas la caractérisation quantitative des paramètres physiques de la structure semiconductrice, tels que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires ou les vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces. La détermination de ces paramètres est à la base de toute étude de contraste des dislocations.

La cathodoluminescence dans un microscope électronique à balayage est une technique privilégiée à plusieurs titres : elle est simple d'utilisation et permet à la fois une étude qualitative du matériau (quand elle est utilisée en imagerie) , mais également une étude quantitative, car elle permet de déterminer les paramètres physiques cités précédemment. Cette dernière a été essentiellement traitée dans l'échantillon massif et il nous a semblé interessant d'étendre cette technique au cas d'homo ou d'hétérostructures. Après avoir présenté le matériau GaAs dans le chapitre I, nous reviendrons sur quelques généralités concernant la cathodoluminescence, ainsi que sur l'état actuel des travaux effectués pour caractériser les semiconducteurs et leurs dislocations. Les techniques expérimentales utilisées dans nos expériences sont décrites dans le chapitre III. Notre modèle de caractérisation des couches a été développé dans le chapitre IV dans le cas de deux couches déposées sur un substrat. Une caractérisation expérimentale a été menée sur des homojonctions

GaAs / GaAs / GaAs réalisées à des températures de croissance différentes et dont les couches supérieures, déposées par MBE, ont des épaisseurs et des

dopages différents. Le cas d'une hétérostructure InP / GaInAs / InP réalisée par MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition), a également été étudié.

Le chapitre V concerne le contraste de cathodoluminescence de dislocations de croissance et de dislocations " fraîches " α et β introduites par microindentations dans deux homojonctions. L'étude du contraste de cathodoluminescence des dislocations permet en effet de comprendre les mécanismes de recombinaison des porteurs minoritaires sur celles - ci. La nature intrinsèque ou extrinsèque de cette recombinaison est une question qui reste d'actualité et qui n'a toujours pas trouvé de réponse dans le cas des dislocations. Un modèle théorique faisant l'hypothèse d'une recombinaison intrinsèque a été développé dans le chapitre V et comparé à nos résultats expérimentaux afin de nous permettre d'apporter des éléments de réponse sur la nature de la recombinaison.

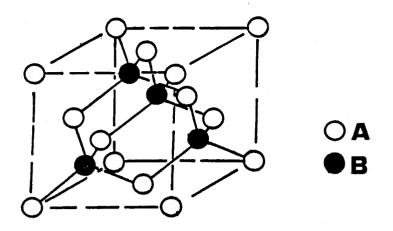


Figure 1 : Maille élémentaire de la structure sphalérite d'un composé A (III) B (V).

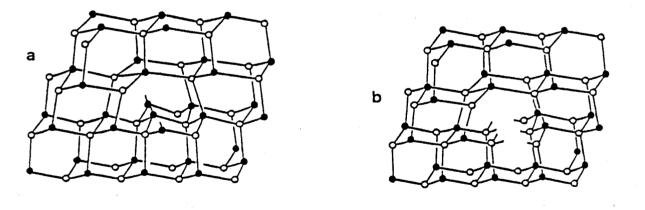


Figure 2: Dislocations parfaites 60° "shuffle" (a) et "glide" (b) [19].

CHAPITRE I

DISLOCATIONS DANS GaAs

1 Structure cristallographique

Les composés III-V tels que l'arséniure de gallium cristallisent dans la structure sphalérite qui est semblable à la structure diamant. Le réseau est cubique à faces centrées. L'atome de gallium occupe la position (0,0,0) et l'atome d'arsenic la position (a/4,a/4,a/4) (figure 1).

Les liaisons chimiques entre chaque paire d'atomes premiers voisins sont essentiellement de nature covalente et résultent de la combinaison d'orbitales sp³. Ces liaisons possèdent également un caractère ionique du fait de la différence d'ionicité entre le gallium et l'arsenic. Le taux d'ionicité est d'environ 33% [1].

2 <u>Dislocations dans les composés III - V</u>

Dans la structure sphalérite, les plans de glissement sont de type {111} et les vecteurs de Burgers des dislocations parfaites sont de type 1/2 < 110 >.

On distingue deux types de dislocations parfaites :

- dislocation vis quand la ligne et le vecteur de Burgers sont parallèles.
- dislocations 60° quand la ligne et le vecteur de Burgers font un angle de 60° entre eux (figure 2).

L'empilement des plans {111} en bicouches alternées (figure 3), conduit à définir deux modes de glissement des dislocations : "glide "ou "shuffle "[2]. En effet, la structure est appelée shuffle lorsque le cisaillement a lieu entre deux rangées successives I et 2, et glide lorsqu'il a lieu entre deux rangées de type 2 et II.

En absence de reconstruction, la structure shuffle possède une orbitale pendante par atome de coeur alors que la structure glide possède deux lignes d'atomes : l'une ayant une orbitale pendante par atome, l'autre ayant deux orbitales pendantes par atome. Les études de microscopie électronique montre

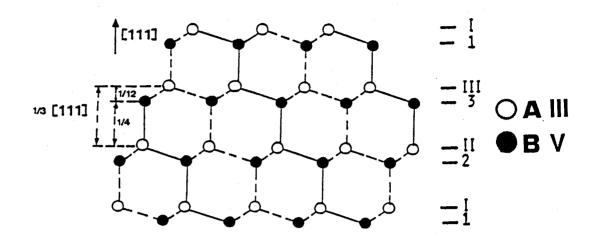


Figure 3: Empilement des couches (111) alternées (projection sur le plan (110)) [19].

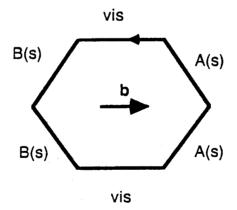


Figure 4: Répartition des caractères $\,\alpha$, $\,\beta$ et vis le long d'une boucle hexagonale.

que les dislocations sont dissociées en partielles [3].

Le caractère composé (Ga - As) de la liaison chimique conduit à des différences de comportement mécanique par rapport à la maille diamant. Les dislocations de vecteurs de Burgers opposés ont des configurations de coeur différentes. Le demi-plan supplémentaire se termine soit par une rangée d'atomes de gallium, soit par une rangée d'atomes d'arsenic. La classification suivante est utilisée (convention de Hünfeld [4]):

$$\alpha = [Ga]_S = [As]_G$$

et
 $\beta = [As]_S = [Ga]_G$

où S signifie shuffle et G glide.

La différence des atomes de coeur agit sur la mobilité des dislocations. Des différences de mobilité suivant le type de dislocations ont été mise en évidence dans les semiconducteurs III-V et en particulier dans l'Arséniure de Gallium de type n [5 - 9] . Les dislocations α ont la mobilité la plus grande, et ceci quelque soit le type de dopage. La mobilité des β , plus faible, varie suivant la position du niveau de Fermi $\mathsf{E_F}\ [$ 6]. Les dislocations vis ont une mobilité identique à celle des β .

3 Rosettes d'indentations sur une face (001)

Des essais de microdureté permettent d'introduire dans l'échantillon, une faible densité de sources de dislocations fraîches en vue d'une étude de contraste de cathodoluminescence. Un microscope métallographique Reichert et une pointe diamant appliquée avec une force variable crée les sources de dislocations; en effet la contrainte créée est relachée par nucléation et propagation de demi boucles de dislocations (figure 4). L'énergie nécessaire au glissement des dislocations peut être d'origine thermique (recuit) ou d'origine lumineuse [10].

Les rosettes d'indentation sont constituées d'une zone centrale très perturbée contenant une très forte densité de dislocations et de deux bras parallèles aux directions [110] et [$\overline{1}10$] qui sont constitués de dislocations α et β respectivement (figure 5). On observe en cathodoluminescence les émergences des dislocations sur la face (001) (figure 6).

Des études en microscopie électronique en transmission [11] effectuées sur des indentations d'une face (001) de cristaux GaAs (semi-isolant non dopé et dopé type n) montrent que les bras de rosette [110] sont dûs à la propagation

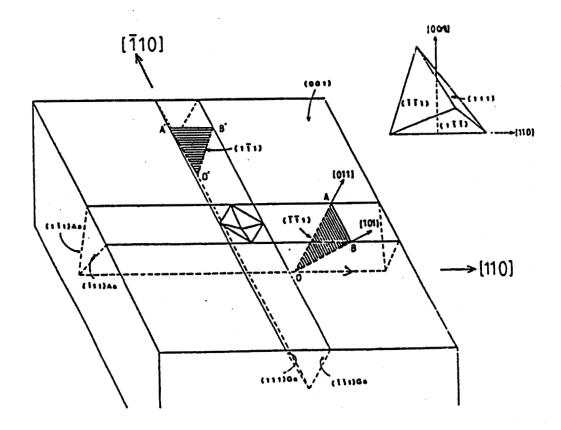


Figure 5: Bras d'indentation sur une face (001) de GaAs [18]. Les bras α sont parallèles à la direction [110] et les bras β sont parallèles à la direction [110].

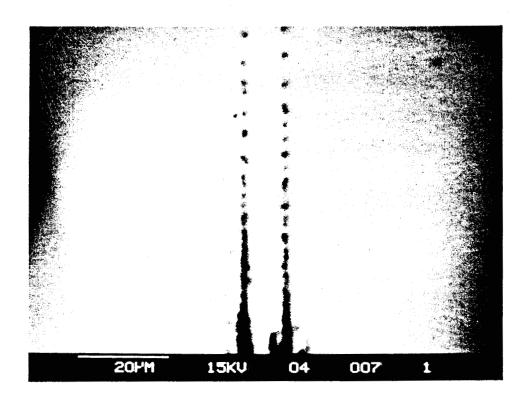
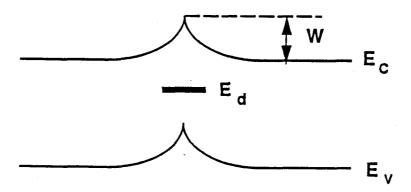


Figure 6: Emergences de dislocations α obtenus en cathodoluminescence sur une homojonction dopée $N_D=2.10^{18}$ cm⁻³ à 15 keV et à 300K.

de demi-boucles parfaites de caractère α ($b = \pm a/2$ [110]) et que les bras de rosette [$\overline{1}10$] sont dûs à la propagation de dislocations partielles β (a/6 < 112 >) conduisant à la formation de micromâcles sur les plans (111) et (11 $\overline{1}$).

4 Niveaux associés aux dislocations α et β

Les dislocations possèdent des niveaux d'énergie représentés par des bandes unidimensionnelles situées dans la bande interdite [12 , 13]. Il apparaît donc un potentiel électrostatique qui perturbe les états électroniques du cristal et on observe un décalage rigide des bandes au voisinage de la dislocation (figure 7). Des travaux menés en photoluminescence [10], en absorption optique [14] et par effet Hall [15] ont montré que la dislocation de type α avait un niveau d'énergie dans la bande interdite situé à 0,2 eV au dessus de la bande de valence alors que la dislocation de type ß devait avoir un niveau situé vers le milieu de la bande interdite. Des calculs théoriques [16] indiquent que, quelle que soit la structure de coeur de la dislocation (dissociée, reconstruite ou non), les coeurs constitués d'atomes Ga correspondent à des bandes localisées plus profondément dans la bande interdite, alors que les coeurs constitués d'atomes As correspondent à des niveaux d'énergie situés près de la bande de valence. Les directions α correspondent donc certainement à des dislocations à coeur As (glide) et les dislocations B à des dislocations à coeur Ga (glide) [17].



<u>Figure 7</u>: Décalage rigide des bandes d'énergie au voisinage d'une dislocation dans un semiconducteur de type n.

BIBLIOGRAPHIE - CHAPITRE I

- [1] PHILLIPS J.C. dans "Bonds and bands in semiconductors" Acad. Press. New York / London (1973).
- [2] HIRTH J.P. and LOTHE J., Theory of Dislocations, Mc Graw Hill (1968).
- [3] GOTTSCHALK H., PATZER G. and ALEXANDER H., Phys. Stat. Sol. (b), 45, 207, (1978).
- [4] ALEXANDER H., HAASEN P., LABUSCH R. and SCHROTER W., J. Physique 40, C6, (1979).
- [5] CHOI S.K. and MIHARA M., J. Phys. Soc. Japan, 32, (1972).
- [6] CHOI S.K., MIHARA M. and MINOMIYA T., Japan. J. Appl. Phys., 16, 737, (1977).
- [7] CHOI S.K., MIHARA M. and MINOMIYA T., Japan. J. Appl. Phys., 17, 329, (1978).
- [8] STEINHARDT H. and HAASEN P., Phys. Stat. Sol. (a), 49, 93, (1979).
- [9] KESTELOOT R., Thèse de 3ème cycle, Université de Lille (1981).
- [10] DEPRAETERE E., Thèse de 3ème cycle à l'Université de Lille (1989).

- [11] LEFEBVRE A. and VANDERSCHAEVE G., Phys. Stat. Sol. (a), **107**, 647, (1988).
- [12] OBERG S., Phys. Stat. Sol. (b), 89, K127, (1978).
- [13] FARVACQUE J.L. and FERRE D., Rev. Phys. Appl., 15, 33, (1980).
- [14] VIGNAUD D., Thèse d'Etat à l'Université de Lille (1989).
- [15] FERRE D., Thèse d'Etat à l'Université de Lille (1987).
- [16] JONES R., OBERG S. and MARKLUND S., Phil. Mag. B, 43, 839 (1981).
- [17] FARVACQUE J.L., VIGNAUD D., DEPRAETERE E., SIEBER B. and LEFEBVRE A., Struct. Prop. Disloc. Semicond., 141, (1989), Inst. Phys. Conf. Ser. n°104.
- [18] WARREN P.D., PIROUZ P. and ROBERTS S.G., Phil. Mag A, **50**, L23, (1984).
- [19] ANDROUSSI Y., thèse de 3ème cycle, Université de Lille, (1988).

CHAPITRE II

CATHODOLUMINESCENCE DANS LES SEMICONDUCTEURS

La cathodoluminescence 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 et d'hétérogénéïtés présentes 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.

1 Interaction électron - matière

Des électrons incidents d'énergie E_o pénétrant dans un échantillon, subissent deux types de collision [1]:

- des collisions élastiques, du type électron noyau ne participant pas aux processus radiatifs (c'est à dire ne s'accompagnant pas d'émission de photons). Elles induisent une déviation à grand angle de la trajectoire des électrons incidents et sont à l'origine des électrons rétrodiffusés qui provoquent un élargissement du faisceau dans le matériau.
- des collisions inélastiques, du type électron électron (de coeur ou de valence) qui provoquent une diminution de l'énergie cinétique des électrons incidents et qui sont à l'origine de l'émission des électrons secondaires, des rayons X, des électrons Auger, et de la création des paires électrons trous qui engendrent le courant induit (EBIC) et la cathodoluminescence.

Au cours de ces collisions, des électrons de la bande de valence du semiconducteur transitent vers la bande de conduction laissant des niveaux énergétiques inoccupés (trous). Les électrons et les trous en excès ont une densité Δ n (\mathbf{r}) et Δ p (\mathbf{r}) respectivement ; après thermalisation en bord de bande, les électrons deviennent indiscernables des électrons libres déjà présents dans l'échantillon (pour un semiconducteur de type n). La valeur minimale de l'énergie nécessaire pour la transition entre les bandes de valence

et de conduction est d'environ trois fois l'énergie E_g de la bande interdite.

Le faisceau électronique incident a donc créé des porteurs libres en excès (électrons et trous) par rapport aux porteurs à l'équilibre, ce que l'on traduit par la notion de paires. Celles-ci sont créées dans un volume appelé volume de génération. En absence de champ électrique, les porteurs sont animés d'un mouvement de diffusion, et, après avoir parcouru une longueur L appelée longueur de diffusion, se recombinent au bout d'un temps moyen τ appelé durée de vie totale . Celle ci dépend du matériau et des conditions expérimentales (injection , température).

La longueur de diffusion moyenne L d'une paire électron - trou et la durée de vie totale τ sont deux des caractéristiques d'un semiconducteur.

Les recombinaisons des paires électron - trou se font :

- soit entre les bandes de conduction et de valence ; ce sont les recombinaisons interbandes.
- soit via une impureté ou un défaut dont le niveau d'énergie est situé dans la bande interdite; ce sont les recombinaisons extrinsèques.

Ces recombinaisons peuvent être :

- soit radiatives lorsqu'il y a émission de photons.
- soit non radiatives lorsqu'elles sont assistées par les phonons.

Les notions de durée de vie radiative τ_r et non radiative τ_{nr} sont associées respectivement à ces deux types de recombinaison. La durée de vie totale peut s'écrire :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \tag{1}$$

 τ_{nr} est, en général, le résultat de différents processus de recombinaison non radiatifs.

Le rendement quantique interne η est défini comme le rapport de la durée de vie totale sur la durée de vie radiative [1]:

$$\eta = \frac{\tau}{\tau_r} \tag{2}$$

2 Taux d'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 [2]. Dans le cas contraire, l'injection est dite " forte " [3] et il faut alors tenir compte, dans l'expression de la recombinaison, des deux types de porteurs.

Le taux d'injection θ est donc un paramètre déterminant dans l'interprétation des résultats obtenus en EBIC (Electron Beam Induced Current) ou en cathodoluminescence. Il s'exprime, dans le cas d'une génération homogène, par la relation :

$$\theta = \frac{E_{0f}}{e_i} \cdot \frac{I_{bo}}{e \cdot V \cdot n_0} \tag{3}$$

- V est le volume de génération des paires électron-trou.
- ei est l'énergie d'ionisation :
- E_of est l'énergie effective des électrons incidents (elle tient compte des électrons rétrodiffusés).
- no est la densité de porteurs majoritaires à l'équilibre (ici des électrons).
- Iba est le courant de faisceau.

On peut s'assurer du régime de faible injection sur une zone de l'échantillon où la luminescence est homogène, en vérifiant que l'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle à l'intensité du faisceau incident.

La dépendance de l'intensité de cathodoluminescence I_{CL} avec le courant de faisceau I_{b_n} a été publiée par Wittry et Kyser [4] :

- Quand la recombinaison radiative domine ($\tau_r << \tau_{nr}$), I_{CL} est proportionnelle à $I_{b_0}.$
- Quand la recombinaison non radiative domine ($\tau_{\,\,\text{nr}} << \tau_{r}$), deux cas sont à considérer :
 - * le cas de l'injection faible où $I_{CL} \sim I_{b_0}$.
 - * le cas de l'injection forte où $I_{CL} \sim I_{b_0}^{-2}$.

Dans les semiconducteurs à gap direct fortement dopés, il faut tenir compte

de la RRR (Reabsorbed Recombination Radiation) [5 - 9] : après recombinaison d'une paire électron - trou via l'émission d'un photon, ce dernier peut être réabsorbé immédiatement créant une nouvelle paire électron - trou. Ceci se traduit, lors d'une expérience EBIC, par l'apparition d'un courant supplémentaire I_{RRR} au courant induit I_{cc} . La RRR est alors responsable d'une longueur de diffusion des porteurs minoritaires mesurée plus grande que la longueur de diffusion réelle. En cathodoluminescence, la RRR se traduit par l'apparition d'un coefficient d'absorption apparent dont la valeur mesurée est inférieure à la valeur réelle. Pour L < 1 μm , la RRR est négligeable [6]. Cet effet diminue la contribution dûe à la recombinaison radiative et τ ne dépend alors que de τ_{nr} [1].

3 Intensité de cathodoluminescence

Dans un semiconducteur soumis à une excitation extérieure, les deux processus en compétition sont la diffusion des porteurs excédentaires et leur recombinaison. L'équation de continuité (4) tient compte de ces processus et est à la base de toute interprétation des phénomènes observés en EBIC (Electron Beam Induced Current) ou en cathodoluminescence.

$$\Delta . \Delta p(r) = \frac{\Delta p(r)}{L^2} - \frac{g(r)}{D}$$
 (4)

g (r) est la fonction de génération des paires électron - trou. Les caractères gras symbolisent la notion de vecteur.

D est le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires défini par :

$$D = \frac{k T}{e} \mu \tag{5}$$

μ est leur mobilité.

3 - 1 Etablissement de l'équation de continuité

Les porteurs en excès créés dans un semiconducteur diffusent dans le matériau afin d'uniformiser leur répartition spatiale. Leur flux est proportionnel au gradient de leur concentration :

* -
$$D_n$$
 grad Δn pour les électrons. (6)

* -
$$D_p$$
 grad Δp pour les trous. (7)

 D_{n} et D_{p} sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous respectivement.

 Δ n et Δ p sont les densités d'électrons et de trous respectivement.

Le signe " - " traduit le fait que les porteurs diffusent dans la direction de plus faible concentration.

En présence d'un champ électrique **E**, les densités de courants d'électrons et de trous sont la somme d'une composante de conduction et d'une composante de diffusion :

$$j = j$$
 conduction + j diffusion

D'où:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{n}} = \Delta \, \mathbf{n} \, \mathbf{e} \, \mu_{\mathbf{n}} \, \mathbf{E} + \mathbf{e} \, \mathbf{D}_{\mathbf{n}} \, \mathbf{grad} \, \Delta \, \mathbf{n}$$
 pour les électrons. (8)

$$\mathbf{j}_{\mathbf{p}} = \Delta \mathbf{p} e \,\mu_{\mathbf{p}} \,\mathbf{E} - e \,D_{\mathbf{p}} \,\mathbf{grad} \,\Delta \,\mathbf{p}$$
 pour les trous. (9)

e étant la charge électronique, μ_n et μ_p les mobilités des électrons et des trous respectivement.

Les équations de continuité décrivent la variation du nombre de porteurs de charge par unité de temps :

$$\frac{\partial \Delta n(\mathbf{r})}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{e} \text{ div } \mathbf{j_n} \qquad \text{pour les \'electrons} \qquad (10)$$

$$\frac{\partial \Delta p(\mathbf{r})}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{1}{e} \text{ div } \mathbf{j}_p \qquad \text{pour les trous}$$
 (11)

 G_n et G_p sont les taux de génération des électrons et des trous respectivement (en cm $^{-3}$. s $^{-1}$)

R $_{\rm n}$ et R $_{\rm p}$ sont les taux de recombinaison d'électrons et de trous respectivement (en cm $^{\rm -3}$. s $^{\rm -1}$) ; ils s'écrivent , en injection faible :

$$R_{n} = \frac{\Delta n(r)}{\tau_{n}} \qquad R_{p} = \frac{\Delta p(r)}{\tau_{p}} \qquad (12)$$

Si l'on remplace les expressions de j $_{n}$, j $_{p}$, R $_{n}$ et R $_{p}$ dans (10) et (11), on obtient :

- pour les électrons :

$$\frac{\partial \Delta n(\mathbf{r})}{\partial t} = G_n - \frac{\Delta n(\mathbf{r})}{\tau_n} + \mu_n \mathbf{E} \operatorname{grad} \Delta n(\mathbf{r}) + \mu_n \Delta n(\mathbf{r}) \operatorname{div}(\mathbf{E})$$

$$+ D_n \operatorname{div} \operatorname{grad} \Delta n(\mathbf{r})$$
(13)

- pour les trous :

$$\frac{\partial \Delta p(\mathbf{r})}{\partial t} = G_p - \frac{\Delta p(\mathbf{r})}{\tau_p} - \mu_p \mathbf{E} \operatorname{grad} \Delta p(\mathbf{r}) - \mu_p \Delta p(\mathbf{r}) \operatorname{div}(\mathbf{E}) + D_p \operatorname{div} \operatorname{grad} \Delta p(\mathbf{r})$$
(14)

En régime stationnaire, en absence de champ électrique, en injection faible et pour un semiconducteur de type p :

$$D_{n} \operatorname{div} \operatorname{grad} \Delta n(\mathbf{r}) - \frac{\Delta n(\mathbf{r})}{\tau_{n}} = -g(\mathbf{r})$$
 (15)

pour un semiconducteur de type n :

$$D_{p} \operatorname{div} \operatorname{grad} \Delta p(\mathbf{r}) - \frac{\Delta p(\mathbf{r})}{\tau_{p}} = -g(\mathbf{r})$$
 (16)

3 - 2 Intensité de cathodoluminescence I CL

L'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle au taux de recombinaison radiative τ_r qui dépend lui même de la densité de porteurs en excès Δp (\mathbf{r}) (dans le cas d'un semiconducteur de type n), de leur distribution (par l'intermédiaire de la fonction de génération g (\mathbf{r})) et du rendement quantique interne η . Il faut noter que dans les matériaux dopés [10]:

$$\frac{1}{\tau_r} \sim \{ n_o(\mathbf{r}) + \Delta n(\mathbf{r}) \} . \{ p_o(\mathbf{r}) + \Delta p(\mathbf{r}) \}$$
 (17)

Donc dans le type n et en injection faible : $\eta \sim n_0(\mathbf{r}) \cdot \Delta p(\mathbf{r})$ (18)

De même dans le type p: $\eta \sim p_0(r) \cdot \Delta n(r)$ (19)

Le nombre de photons créés dans l'échantillon lors du processus de recombinaison des paires électron - trou peut s'écrire :

$$N \sim \eta$$
 (20)

Pour obtenir le nombre de photons émis par l'échantillon, il faut moduler ce nombre N par leur réflection à l'interface échantillon - air. On définit l'angle limite de réfraction θ_{C} au delà duquel les photons sont réfléchis dans l'échantillon :

$$\theta_{C} = \operatorname{Arc} \sin (n^{-1}) \tag{21}$$

où n est l'indice de réfraction du semiconducteur (= 3,4 pour GaAs)

$$\theta_{\rm C} = 16^{\circ}$$
 pour GaAs

Les pertes optiques sont alors représentées par une fonction qui peut s'exprimer par [11] :

$$A(z) = \int_{0}^{\theta_{c}} \exp\left(-\frac{\alpha \cdot z}{\cos(\theta_{c})}\right) \cdot \sin\theta \cdot d\theta \qquad (22)$$

$$A(z) = E_2(\alpha.z) - \cos\theta_c.E_2(\frac{\alpha.z}{\cos\theta_c})$$
 (23)

- E2 est l'intégrale exponentielle du second ordre [12] :

$$E_2(x) = \int_1^{+\infty} \frac{\exp(-xt)}{t^2} dt$$
 (24)

- α est le coefficient d'absorption optique.

Le nombre de photons N r qui ressort de l'échantillon peut alors s'exprimer par :

$$N_r = \int \Delta p(r) \cdot A(z) \cdot (1-R) \cdot d^3r$$
 (25)

avec:

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 : \text{ coefficient de réflexion}$$
 (26)

1 - R est donc le coefficient de transmission.

L'intensité de cathodoluminescence $I_{\rm CL}$ globale, accessible expérimentalement, est dépendante des facteurs de réponse du système de collecte de cathodoluminescence (miroir, photomultiplicateur) que l'on négligera; elle s'exprime finalement par :

$$I_{CL} \sim \frac{\tau}{\tau_r} \cdot \int_{V} A(z) \cdot \Delta p(r) \cdot dV$$
 (27)

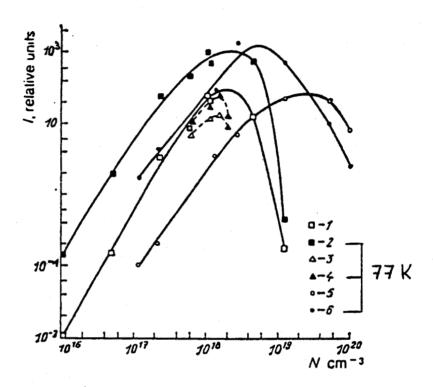
- Δp (r) dépend de la géométrie de l'échantillon et de la génération des porteurs minoritaires en excès.
 - V est le volume de l'échantillon

L'intensité de cathodoluminescence I_{CL} peut être affectée par [13] :

la température T de l'échantillon [14 , 15] qui fait varier l cl suivant la relation:

$$I_{CL} \sim \frac{1}{T^3} \cdot e^{\left(\frac{E_{gap}(T)}{kT}\right)}$$
 (28)

avec [16]
$$E_{gap}(T) = E_{gap}(T=0) - \frac{\alpha_g T^2}{T + \beta_g}$$
 (29)



 $\begin{tabular}{ll} \hline Figure 1 : Courbes expérimentales d'intensité de cathodoluminescence \\ I_{CL} en fonction du dopage N : \\ \hline \end{tabular}$

type n: 1 - dopé Te

2 - dopé Se

3 et 4 - dopé Sn

type p: 5 - dopé Cd

6 - dopé Zn

Les courbes 1,3,5 ont été obtenues à 300K et les courbes 2,4,6 à 77K. [18]

Pour GaAs : E_{gap} (T = 0) = 1,519 eV ;
$$\alpha_g$$
 = 5,405 . 10 ⁻⁴ eV / K et β_g = 204 K

- le dopage [17, 18] (figure 1) : l'intensité de cathodoluminescence commence par augmenter avec la concentration d'impuretés à cause d'une décroissance de la durée de vie radiative. Puis elle diminue, à cause, à la fois des transitions non radiatives dûes à une augmentation de la densité de défauts et précipités (dépassement de la limite de solubilité), mais également à une plus grande probabilité de transitions non radiatives donneurs - accepteurs.

4 <u>Profondeurs de pénétration des électrons incidents. Fonctions de génération des paires électron - trou</u>

La connaissance de la fonction de génération des paires électron - trou est primordiale dans la résolution de l'équation de continuité (4). De nombreuses études ont été réalisées pour décrire les interactions électron - solide [1]:

Le faisceau incident subit une série de collisions élastiques et inélastiques dans un matériau (cf § 1) et la profondeur de pénétration R_p des électrons traduit le résultat de ces évènements ; R_p est une fonction de la tension d'accélération E_o et de la densité ρ (en g / cm 3) du matériau :

$$R_{p} = \frac{k \cdot E_{o}^{\alpha}}{\rho} \tag{30}$$

k et α dépendent du n° atomique Z du matériau et de E_o.

Cette expression dérive de la relation perte d'énergie de Bohr - Bethe et n'est valable que dans une gamme d'énergie limitée. Les formes les plus courantes dans la littérature sont (avec E_o est exprimée en keV) :

$$R_{pG} = \frac{4.5 * E_o^{1.75}}{\rho * 100} \quad (\mu m) \quad \text{proposée par Gruen [19]}$$
 (31)

$$R_{\rho EH} = \frac{4 * E_o^{1,75}}{\rho * 100} \qquad (\mu m) \qquad \text{proposée par Everhart et Hoff [20]}$$
 (32)

$$R_{p KO} = \frac{0,0276 * A * E_o^{1,67}}{\rho * Z_o^{9}} (\mu m) \text{ proposée par Kanaya et Okayama [21]} (33)$$

A étant la masse atomique.

$$R_{pW} = \frac{25.6}{\rho} * \left(\frac{E_o}{30}\right)^{1.7} \quad (\mu m) \quad \text{proposée par Wittry [22]}$$
 (34)

La profondeur de pénétration utilisée dans nos calculs est celle de Gruen.

On considère généralement qu'une paire électron - trou est créée dans le matériau chaque fois qu'un électron incident perd une énergie égale à environ trois fois celle du gap, c'est à dire :

$$g(x,y,z) = \frac{dE(x,y,z)}{3.E_g}$$
 (35)

La répartition spatiale dE (x, y, z) de l'énergie cédée par le faisceau électronique incident est complexe. Elle peut être obtenue à partir de simulations de trajectoires par la méthode de Monte Carlo, en tenant compte des diffusions élastiques et inélastiques de l'électron incident. Plusieurs expressions de la perte d'énergie en fonction de la profondeur z ont été proposées dans la littérature :

- sous forme d'un polynôme par Everhart et Hoff [20] :

$$\lambda \left(\frac{z}{R_{pEH}}\right) = 0.62 + 6.10 \left(\frac{z}{R_{pEH}}\right) - 12.26 \left(\frac{z}{R_{pEH}}\right)^2 + 5.65 \left(\frac{z}{R_{pEH}}\right)^3$$
 (36)

- sous forme d'une gaussienne modifiée par Wu et Wittry [23] :

$$\phi (u) = A \exp \left\{ -\left(\frac{u - u_0}{\Delta u}\right)^2 \right\} - B \exp \left\{ -\frac{b u}{u_0} \right\}$$
 (37)

avec

$$u = \rho \frac{z}{R_{pW}}$$
 (38)

 u_{o} , Δu , b et B / A varient suivant la nature de la cible. Pour GaAs $\,:\,$

$$u_0=0,125$$
 ; $\Delta u=0,35$; $b=4$; B/A=0,4.

Ces répartitions ne décrivent pas les phénomènes de transport latéraux car elles sont développées à une dimension. Donolato [24] propose une fonction de génération sous forme de gaussienne projetée dans le plan x z ; elle s'écrit :

$$g(x-x_{o},z) = \frac{1,14}{2\pi\sigma^{2}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_{o})^{2} + (z-z_{o})^{2}}{2\sigma^{2}} \right\}$$
 (39)

où z_o et σ sont reliés à la profondeur de pénétration R_p des électrons incidents par :

$$Z_{o} = 0.3 R_{p}$$
 et $\sigma = \frac{R_{p}}{\sqrt{15}}$ (40)

D'autres fonctions ont été proposées sous forme de gaussiennes à trois dimensions [25] ou sous des formes différentes suivant les trois dimensions x, y et z [26].

Nous avons utilisé, pour notre étude (cf chap IV et V), la fonction de génération analytique proposée par Akamatsu et al [19], et qui a été établie d'après des simulations de trajectoires de Monte Carlo. Elle s'écrit en coordonnées réduites :

$$\frac{dE(X,Y,Z)}{dXdYdZ} = \frac{a}{65} (1,1+7,13 Z) \cdot \left\{ exp(-\frac{X^2+Y^2+Z^2)}{2} \right)$$
 (41)

$$+3,4 \cdot \exp\left[-\left(\frac{9 \times^2 + 9 \times^2 + 4 \times^2}{2}\right)\right] + 96 \cdot \exp\left[-\left(\frac{81 \times^2 + 81 \times^2 + 16 \times^2}{2}\right)\right]$$

$$= g(r,z)$$

avec
$$X = \frac{x}{(R_p/3)}$$
 $Y = \frac{y}{(R_p/3)}$ $Z = \frac{z}{(R_p/3)}$ (42)

La première gaussienne représente l'effet du faisceau direct, la deuxième, les premières diffusions de l'électron primaire et la troisième, celui de l'électron primaire après diffusion multiple.

R_p : profondeur de pénétration de Gruen.

a : constante qui tient compte de l'énergie perdue par les électrons rétrodiffusés et qui s'exprime grâce à la relation :

$$\int_{V} g(r,z,R_{p}).dr = g_{0}$$
 (43)

g₀ est le facteur de génération total (en s⁻¹).

5 Caractérisation d'un semiconducteur par cathodoluminescence

Une interprétation rigoureuse des mesures de contraste de cathodoluminescence effectuées sur des défauts ne peut se faire que si les paramètres physiques caractérisant localement l'échantillon sont déterminés au préalable. Ces paramètres sont, outre la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès :

- le coefficient d'absorption optique α
- la vitesse de recombinaison en surface V_s.
- l'épaisseur $Z_{\rm dl}$ d'une couche non radiative à la surface de l'échantillon, appelée " dead layer ", qui peut être soit une zone désertée en porteurs libres ou une zone écrouie $\{11, 27, 28\}$.
- les vitesses de recombinaisons aux interfaces dans le cas d'hétérostructures.

Des calculs de variation d'intensité de cathodoluminescence I_{CL} en fonction de la tension d'accélération E_o ont été effectués essentiellement sur des échantillons massifs [11, 27 - 34] .Cette technique simple et locale permet, à puissance $P = E_o \cdot I_{b_o}$ constante (I_{b_o} étant le courant de faisceau incident), de déterminer non seulement L et V_S , mais également le coefficient d'absorption optique α et l'épaisseur de la dead layer Z_{dl} . Il est toutefois recommandé de connaître au préalable L ou V_S par une autre technique, car plusieurs jeux des

paramètres (L , V_S) peuvent donner des courbes similaires. Cette technique n'est applicable que sur des échantillons dont la luminescence est homogène afin de pouvoir considérer que le rendement quantique interne est constant (cf éq (2)). Elle n'a, en revanche, jamais été utilisée dans le cas d'hétérostructures sauf dans un cas très particulier de double hétérostructure possédant des vitesses de recombinaison infinies aux interfaces [35] ; c'est pourquoi il nous a semblé important de développer une méthode plus générale de caractérisation des couches épitaxiées (chap IV).

6 Autres techniques de caractérisation

Différentes méthodes permettant de déterminer L et V_S ont été utilisées dans la littérature [36 - 41] et notamment des mesures de photocourant dans l'échantillon massif et dans les hétérostructures. Toutefois ces techniques sont souvent difficiles à mettre en oeuvre et nécessitent des transformations de l'échantillon (dépôts de contacts, biseautage etc...) . De plus, elles ne permettent pas, contrairement à l'EBIC et à la cathodoluminescence, l'observation des défauts présents dans le matériau.

6 - 1 détermination de la longueur de diffusion L

La longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès dans des semiconducteurs massifs a été, pendant longtemps, le paramètre des semiconducteurs le plus étudié. Les méthodes développées pour la mesurer utilisent le plus souvent un bombardement d'electrons ou de photons comme source excitatrice pour produire les porteurs en excès. La technique EBIC est, de loin, la plus utilisée [3, 31, 42 - 54].

Elle nécessite l'élaboration sur le semiconducteur d'une diode de Schottky (ou d'une jonction p-n) qui crée un champ électrique interne intense dans la zone désertée (ou zone de charge d'espace) de la barrière de Schottky. Ce champ sépare les paires électrons-trous et permet la collecte des porteurs minoritaires en excès dans la zone désertée et ceux créés en moyenne à une longueur de diffusion du bas de cette zone. Il en résulte un courant induit dans un circuit extérieur. La géométrie la plus pratique est celle pour laquelle la jonction est perpendiculaire au faisceau car elle permet l'observation des défauts et les mesures des paramètres L et V_S .

Pour déterminer expérimentalement la longueur de diffusion L, on mesure le courant induit en fonction :

- de la profondeur de pénétration de l'excitation R_p ou
- de la distance d'entre la source d'excitation et la diode.

De nombreux travaux ont été effectués dans l'échantillon massif. Pour des distances d (diode - faisceau) grandes comparées à L, et pour une source de génération ponctuelle située près de la surface, la décroissance du courant EBIC I_{cc} avec d peut s'exprimer par [51]:

$$I_{\infty}(d) = A \cdot \frac{e^{-d/L}}{d^{3/2}}$$
 (44)

Cette équation est valable si l'on fait l'hypothèse d'une vitesse de recombinaison en surface infinie.

Cette méthode n'est valable que dans le cas d'échantillons homogènes et ne présentant pas de variations locales de L. Etendue au cas de couches minces par Dimitriadis [55] la décroissance du courant EBIC peut s'écrire :

$$I_{\infty} = \pi q G \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n \sin(n \pi R_{p}/e)}{(n^{2}\pi^{2} + e^{2}/L^{2})^{1/2}} \exp \left\{-\left[\frac{1}{L^{2}} + \left(\frac{n \pi}{e}\right)^{2}\right]^{1/2} d\right\}$$
(45)

avec :

e : épaisseur de la couche.

q : charge électroniqueG : taux de génération

La pente de la courbe Ln (I_{cc}) = f (d) quand d augmente permet d'atteindre la longueur de diffusion L_{eff} dans la couche. Cette dernière s'écrit :

$$\frac{1}{L_{\text{eff}}^2} = \frac{1}{L^2} + \frac{\pi^2}{e^2} \tag{46}$$

6 - 2 Détermination de la vitesse de recombinaison en surface $V_{\rm S}$

La technique EBIC permet de calculer précisément des longueurs de diffusion même très faibles, mais elle est le plus souvent incapable d'estimer la vitesse de recombinaison en surface quand le seul paramètre qui varie expérimentalement est la profondeur de pénétration de la source excitatrice [23]; un modèle a cependant été établi pour une diode Schottky perpendiculaire au faisceau permettant de calculer la longueur de diffusion des porteurs minoritaires,

mais également la vitesse de recombinaison à l'interface métal - semiconducteur [56].

Lorsque l'on ajoute, comme paramètre, la distance d entre la source excitatrice et la jonction, dans le cas d'une jonction p-n (ou la distance source - diode dans le cas d'une diode Schottky), il est possible de déterminer la longueur de diffusion, mais également la vitesse de recombinaison en surface V_S [57].

L'utilisation d'une source ponctuelle de génération fournit une méthode simple pour la détermination de V_S en EBIC, aboutissant à la formule suivante :

$$\frac{V_S}{D} = \frac{\partial}{\partial z} \operatorname{Ln}(I_{\infty}) \tag{47}$$

quand Eo tend vers 0 et à d constant

avec

Icc : courant EBIC collecté.

D : coefficient de diffusion ; D = $\frac{L^2}{\tau}$

E_o : tension d'accélération des électrons incidents

d : distance faisceau électronique - grille (ou faisceau - jonction)

La pente de la courbe Ln (I $_{cc}$) = f (R $_p$) nous fournit la valeur du rapport $\frac{V_S}{D}$. La connaissance de V_S nécessite donc la connaissance de τ par une autre technique.

Cette méthode, valable quelle que soit la géométrie, a été utilisée dans le cas d'échantillons massifs mais également dans des couches minces. Elle est pourtant criticable pour des épaisseurs de couche du même ordre que la profondeur de pénétration, car la génération des paires électron - trou ne se fait plus uniquement dans la couche supérieure et il faut donc impérativement tenir compte des couches inférieures. La pente de la courbe Ln (I_{cc}) = f (R_p) est difficile à estimer et entraı̂ne une erreur assez importante sur la valeur calculée de V_S /D.

L'utilisation de ces techniques de décroissance du courant EBIC en fonction de la distance d (jonction - faisceau) sont délicates expérimentalement dans la mesure où il est impératif de toujours prendre au même endroit le profil du courant induit ; c'est pourquoi une grande homogénéité dans les valeurs de L et V_S est requise. De plus, seule la zone se trouvant sous la diode peut être visualisée sur l'écran d'un microscope électronique à balayage, et la présence de défauts éventuels sur la zone balayée hors de la diode ne peut être observée qu'en cathodoluminescence.

7 Contraste de cathodoluminescence des dislocations

L'uniformité des propriétés électroniques est essentielle dans la réalisation des composants électroniques et la caractérisation des défauts électriquement actifs qui perturbent cette uniformité est d'une grande importance dans la réalisation industrielle des composants optoélectroniques. Des types variés de défauts, tels que les dislocations par exemple, agissent comme des centres de recombinaison non radiatifs. De nombreux travaux, basés sur des études de contraste de dislocations en EBIC et en cathodoluminescence, ont été réalisés pour déterminer les propriétés électriques de ces dislocations dans les semiconducteurs; le contraste C (en %) d'un défaut est défini en cathodoluminescence par :

$$C = \frac{I_{CL_0} - I_{CL_d}}{I_{CL_0}} = \frac{\delta I_{CL}}{I_{CL_0}}$$
 (48)

avec

- I_{CL_0} : intensité de cathodoluminescence quand le faisceau incident est loin du défaut.
- I $_{\text{CL}_{\mathbf{d}}}$: intensité quand le faisceau incident est à l'aplomb du défaut.

En imagerie de cathodoluminescence, le contraste est dû, en général, à une augmentation des recombinaisons sur des types variés d'irrégularités dans le cristal. Les défauts tels que les dislocations et précipités se comportent comme des centres efficaces pour la capture des porteurs minoritaires et leur recombinaison avec les porteurs majoritaires; ils apparaissent noirs sur fond clair.

La résolution spatiale en cathodoluminescence est de l'ordre du micron. Celle ci dépend principalement du volume de génération des paires électron trou mais également de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en excès, du diamètre de la sonde des électrons incidents et de la géométrie de l'échantillon (position des surfaces, position et largeur des zones déplétées, profondeur des dislocations) [1,58]. La résolution peut être améliorée, en cathodoluminescence, par l'utilisation d'un champ magnétique [59].

Plusieurs théories basées sur des études de contraste en EBIC ont été développées pour expliquer les phénomènes de recombinaison aux dislocations. Deux grandes tendances s'en sont dégagées suivant que l'on s'intéresse aux effets géométriques des dislocations ou à leur effets de recombinaison :

- Donolato [60] et Pasemann [61] calculent le contraste EBIC d'une dislocation en la considérant comme un cylindre dans lequel la durée de vie des porteurs minoritaires est réduite comparée à celle du bulk. Une force au défaut est associée à la dislocation et des solutions de l'équation de diffusion sont proposées.
- les théories de Figielski [62] ou de Labusch [63] traitent les processus de recombinaison au niveau de la dislocation mais, comme les précédentes, elles ne tiennent pas compte de l'influence de la température sur le contraste EBIC.

Wilshaw [64 - 67] a développé un modèle EBIC de contraste de dislocations en tenant compte des processus de recombinaison à la dislocation, des conditions expérimentales (température, courant de faisceau injecté) mais ne tenant pas compte des phénomènes de diffusion. Chaque type de défaut introduit localement une perturbation de la structure de bande du semiconducteur [64] (cf chap I figure 7). Dans un semiconducteur de type n, les états accepteurs introduits correspondent à un niveau d'énergie sous le niveau de Fermi; ces états sont donc occupés, donnant une ligne chargée négativement. Cette ligne de charge est écrantée par une zone de charge d'espace de rayon r_d autour de la dislocation, où les trous libres peuvent être capturés. Cette capture implique une durée de vie réduite des porteurs minoritaires dans la zone de charge d'espace [65]. Une saturation du processus de recombinaison à la dislocation peut se produire, même pour un courant de faisceau correspondant à un régime d'injection faible.

Le contraste de cathodoluminescence des dislocations a été moins étudié et aucun modèle quantitatif n'a été développé. La tendance actuelle est d'étudier simultanément les contrastes EBIC et de cathodoluminescence des défauts [68 - 72] car celà permet de séparer les effets géométriques des effets dûs à un changement local dans la force de recombinaison, ce qui n'est pas possible si l'on n'utilise que l'une ou l'autre méthode. En effet les deux signaux (cathodoluminescence et EBIC) sont affectés différemment par les défauts du cristal. Si les paramètres physiques caractérisant localement un échantillon sont connus (L, $V_{\rm S}$ et α), le rapport des deux contrastes permet de trouver la position du défaut sous la surface. Une fois encore, les effets de température et d'injection ne sont pas pris en compte.

BIBLIOGRAPHIE - CHAPITRE II

- [1] YACOBI B.G., HOLT D.B., J. Appl. Phys. 59, R1, (1986).
- [2] MATHIEU H., Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, 419, édité chez MASSON, (1987).
- [3] BERZ F. and KUIKEN H.K., Sol. State. Electron., 19, 437, (1976).
- [4] KYSER D.F., WITTRY D.B., Proc. of The Electron Microprobe, 691, éd by Wiley and Sons, London, Sidney, (1964).
- [5] VON ROOS O., J. Appl. Phys., 54, 1390, (1983).
- [6] VON ROOS O., J. Appl. Phys., 54, 2495, (1983).
- [7] ETTENBERG M., Appl. Phys. Lett., 30, 207, (1977)
- [8] AKAMATSU B., HENOC J. and HENOC P., J. Appl. Phys., **52**, 7245, (1981)
- [9] KOCH F. and OELGART G., Phys. Stat. Sol. (a), 104, 931, (1987)
- [10] BOULOU M., thèse de 3ème cycle à l'Université de Lyon, 40, (1979).
- [11] HERGERT W., RECK P., PASEMANN L. and SCHREIBER J., Phys. Stat. Sol (a), **101**, 611, (1987).
- [12] ABRAMOVITZ M. and STEGUN I.A. "Handbook of mathemetical functions", edited by Abramovitz and Stegun, Dover Publications. Inc., New York., (1965).
- [13] BALK L.J., MENZEL E. and KUBALEK E., Proc. 8th Intern. Congress on X ray optics and microanalyze, Boston, 613, 18-24 August 1977. Edited by D.R. BEAMAN, R.E. OGILVIE and D.B. WITTRY.
- [14] GARLICH G.F.J., Brit. J. Appl. Phys., 13, 541, (1962).

- [15] KLASDIS D.I. and EUTHYIMION P.C., J. Appl. Phys., 45, 2775, (1974).
- [16] DUSSAC M., thèse de 3ème cycle. Université de Grenoble (1985).
- [17] SPIVAK G.V., PETROV V.I. and ANTONSHIN M.K., Sov. Phys. Usp., 29, 364, (1986).
- [18] CUSANO D.A., Solid State Comm., 2, 353, (1964).
- [19] AKAMATSU B., HENOC P. and MARTINS R.B., J. Microsc. Spectr. Electron., 14, 12 a, (1989).
- [20] EVERHARDT T.E. and HOFF P.H., J. Apll. Phys., 42, 5837, (1971).
- [21] KANAYA K. and OKAYAMA S., J. Phys. D: Appl. Phys., 5, 43, (1972).
- [22] WITTRY D.B. and KYSER D.F., J. Appl. Phys., 38, 375, (1967).
- [23] WU C.J. and WITTRY D.B., J. Appl. Phys, 49, 2827, (1978).
- [24] DONOLATO C., Solid State Electron., 25, 1077, (1982).
- [25] LEVY D. and SCHACHAM S.E., J. Apll. Phys., **64**, 5230, (1988).
- [26] CLOSAS L.L. and RUBIO J.F., Phys. Stat. Sol. (a), **105**, 541, (1988).
- [27] ACHOUR S., Phil. Mag. Lett., 59, 205, (1989).
- [28] MIKHEEV N.N., Sov. Phys. Semicond., 21, 226, (1987).
- [29] HERGERT W. and HILDEBRANDT S., Phys. Stat. Sol. (a), 103, K145, (1987).

- [30] HILDEBRANDT S., SCHREIBER J., HERGERT W. and PETROV V.I., Phys. Stat. Sol. (a), 110, 283, (1988).
- [31] RAO-SAHIB T.S. and WITTRY D.B., J. Appl. Phys., 40, 3745, (1969).
- [32] VAN OPDORP C., Philips Research Report, 32, 192, (1977).
- [33] AKAMATSU B., HENOC P. and PAPADOPOULO A.C., Scanning Electron Microscopy , 1579 , (1983).
- [34] HOLT D.B., Microsc. Semicond. Mater. Conf., Oxford, (1981), 165. Inst. Phys. Conf. Ser. n° 60.
- [35] KONNIKOV S.G and al, Soviet Phys. Semicond., 20, 661, (1986).
- [36] GAROZZO M., PARRETA A., MALETTA G, ADONCECCHI V. and GENTILI M., Solar Energy Mater., 14, 29, (1986).
- [37] KAMIYA T., HIROSE S. and YANAI H., J. Luminescence, 18 / 19, 910 (1979).
- [38] ETTENBERG M., KRESSEL H. and GILBERT S.L., J. Apll. Phys., 44, 827, (1973).
- [39] MÜLLER J., BERNT H. and REICHL H., Sol. State Elect., **21**, 999, (1978).
- [40] ASHLEY K.L. and BEAL S.W., Appl. Phys. Lett., 32, 375, (1978).
- [41] HWANG C.J., J. Appl. Phys., 40, 3731, (1969).
- [42] VAN ROOSBROECK W., J. Appl, Phys, 26, 380, (1955).
- [43] JASTRZEBSKI L., LAGOWSKI J. and GATOS H.C., Appl. Phys. Lett., 27, 537, (1975).
- [44] SHEA S.P., PARTAIN L.D. and WARTER P.J., Proc. 11th Ann. SEM Symp. IITRI, Chicago, 435, (1978).
- [45] FUYUKI T., MATSUNAMI H. and TANAKA T., J. Phys. D, 13, 1093, (1980).

- [46] AKAMATSU B., HENOC J. and HENOC P., J. Appl. Phys., **52**, 7245, (1981).
- [47] FUYUKI T. and MATSUNAMI H., Japan J. Apll. Phys., 20, 745, (1981).
- [48] OELGART G., FIDDICKE H. and REULKE R., Phys. Stat. Sol. (a), 66 283, (1981).
- [49] BURK D.E. and SUNDARESAN R., Solid State Electron., 27, 59, (1984).
- [50] BRESSE J.F., Proc. 5th Ann. SEM Symp. IITRI, Chicago, 105, (1972).
- [51] IOANNOU D.E and DAVIDSON S.M, J. Phys. D., 12, 1339, (1979).
- [52] HACKETT W.H., J. Appl. Phys., 42, 3249, (1971).
- [53] HACKETT W.H., J. Apll. Phys., 43, 1649, (1972).
- [54] PAZ O. and BORREGO J.M., Appl. Phys. Lett., 42, 958, (1983).
- [55] DIMITRIADIS C., J. Phys. D, 14, 2269, (1981).
- [56] TABET N. and TARENTO R.J., Phil. Mag. B, 59, 243, (1989).
- [57] WATANABE M., ACTOR G. and GATOS H.E., IEEE Trans. Electron. Dev. ED 24, 1172, (1977).
- [58] BOOKER G.R., Microsc.Semicond. Mater. Conf. Oxford, 203, (1981). Inst. Phys. Conf. Ser n° 60.
- [59] WADA K., KOZEN A., FUSHIMI H. and INOUE N., Japan. J. Appl. Phys., 27, L1952, (1988).
- [60] DONOLATO C., Optik, **52**, 19, (1978).
- [61] PASEMANN L., Ultramicroscopy, 6, 237, (1981).
- [62] FIGIELSKI T., Solid State Electron., 21, 1403, (1978).

- [63] LABUSCH R., J. Physique, 40, C6-81, (1979).
- [64] WILSHAW P.R. and FELL T.S., Int. Symp. on Struct. Prop. Disloc. Semicond., Oxford, 1989, 85. Inst. Phys. Conf. Ser n° 104.
- [65] WILSHAW P.R. and BOOKER G.R., Microsc. Semicond. Mater. Conf. Oxford, 329, (1985). Inst. Phys. Conf. Ser n° 76.
- [66] WILSHAW P.R. and FELL T.S., Int. Symp. on Struct. Prop. Disloc. Semicond., Oxford, 1989, 227. Inst. Phys. Conf. Ser no 104.
- [67] WILSHAW P.R., OURMAZD A. and BOOKER G.R., Journal de Physique, Colloque C4, supplément au n°9, tome 44,445, (1983).
- [68] JAKUBOWICZ A., J. Appl. Phys., 59, 2205, (1986).
- [69] BODE M., JAKUBOWICZ A. and HABERMEIER H.U., Defect Recognition and Image Processing in III-V Compounds II, 1987, 155, edited by E.R. Weber Elsevier Science Publishers.
- [70] JAKUBOWICZ A., BODE M. and HABERMEIER H.U., Microsc. Semicond. Mater. Conf., Oxford, 1987, 763. Inst. Phys. Conf. Ser n° 87.
- [71] ECKSTEIN M., JAKUBOWICZ A., BODE M. and HABERMEIER H.U., Appl. Phys. Lett., **54**, 2659, (1989).
- [72] SCHREIBER J. and HERGERT W., Int. Symp. on Struct. Prop. Disloc. Semicond., Oxford, 1989, 97. Inst. Phys. Conf. Ser n° 104.

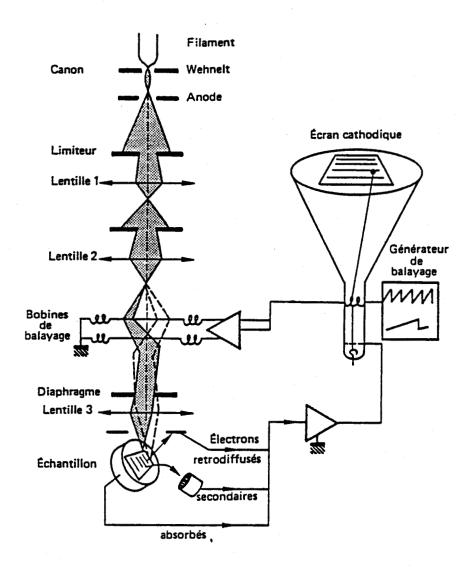
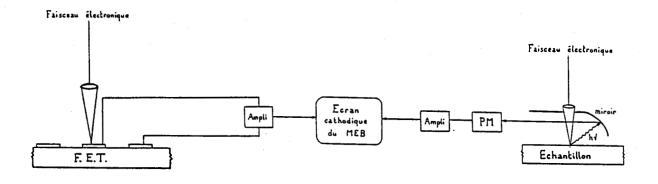


Figure 1: Schéma de principe d'un microscope électronique à balayage.



<u>Figure 2</u>: Dispositif expérimental en modes EBIC et cathodoluminescence.

CHAPITRE III

TECHNIQUES EXPERIMENTALES

Le microscope électronique à balayage est un outil privilégié pour l'observation des matériaux. Ses différents modes (électrons secondaires et rétrodiffusés, cathodoluminescence, EBIC) contribuent à la caractérisation morphologique, chimique et électrique de différents matériaux organiques et inorganiques.

1 Microscope Electronique à Balayage (MEB)

En haut de la colonne du microscope électronique à balayage, les électrons sont émis par un filament de tungstène chauffé, et sont accélérés par le champ électrique régnant entre le filament polarisé négativement et l'anode reliée à la masse (figure 1).

L'échantillon à observer, placé dans la chambre, est bombardé par le faisceau électronique focalisé sur sa surface; une plage carrée de l'échantillon est balayée ligne par ligne.

Dans la chambre du microscope se trouve, outre l'échantillon, les collecteurs des différents signaux émis et en particulier le système de collecte du signal photonique. En mode cathodoluminescent, la résolution spatiale est de l'ordre du micron; elle dépend :

- du volume de génération
- de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires
- du diamètre de la sonde à forts courants de faisceau

Le MEB utilisé dans nos expériences est de marque CAMBRIDGE modèle 250 Mk3.Une cage de Faraday amovible placée au dessus de l'échantillon et reliée à un électromètre KEITHLEY permet de mesurer le courant de faisceau I bo envoyé sur l'échantillon.

2 Système de collecte en mode cathodoluminescent et EBIC

En mode cathodoluminescent, les photons émis par l'échantillon sous l'effet du faisceau électronique incident, sont collectés par un miroir ellipsoïdal, détectés et transformés en signal électrique par un photomultiplicateur. Le signal

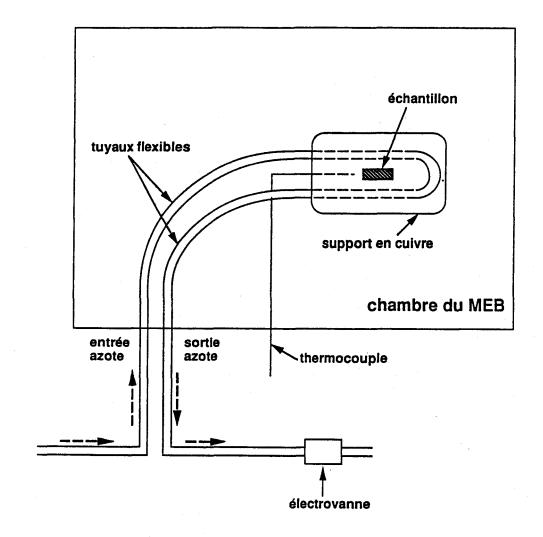


Figure 3: Montage basse température (77 K).

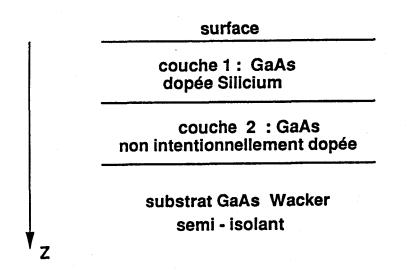


Figure 4: Configuration des homojonctions GaAs / GaAs / GaAs

est ensuite amplifié avant d'être envoyé sur l'écran cathodique du MEB (figure 2). Ce signal module point par point, pendant le balayage de la sonde électronique, le balayage de l'écran du MEB ce qui permet d'obtenir une image. En EBIC, l'échantillon est le détecteur et le courant induit est envoyé dans un circuit extérieur. Le courant collecté étant inférieur au microampère, il est nécessaire de l'amplifier au préalable (figure 2).

3 Platine basse température (77 K)

Nous avons réalisé un montage dans le MEB afin d'effectuer des expériences à la température de 77 K. L'échantillon est collé sur un support de cuivre à l'intérieur duquel un circuit d'azote liquide est réalisé. Une bouteille d'azote gazeux permet de pousser (à la pression de 0,5 bar) l'azote liquide dans des tuyaux flexibles jusqu'au support. Aprés avoir circulé dans celui ci, l'azote liquide ressort de la chambre par un tuyau flexible au bout duquel est installée une électrovanne permettant de régulariser le débit d'azote dans l'installation (figure 3). Un thermocouple Chromel - Alumel est placé dans le support juste sous l'échantillon afin de donner sa température avec un maximum de précision.

4 Préparation des échantillons

4 - 1 Homojonctions GaAs / GaAs / GaAs

Les échantillons ont été réalisés au Centre d'Hyperfréquences et de Semiconducteurs de Villeneuve d'Ascq (C.H.S). La configuration de ces homojonctions est représentée sur la figure 4. Pour chacune d'elles, des plaquettes de deux pouces orientées (100) ont été élaborées à partir d'un substrat Wacker de 350 µm d'épaisseur. Les différentes couches ont été déposées par MBE (Molécular Beam Epitaxy). La couche supérieure de chaque homojonction est dopée avec du Silicium.

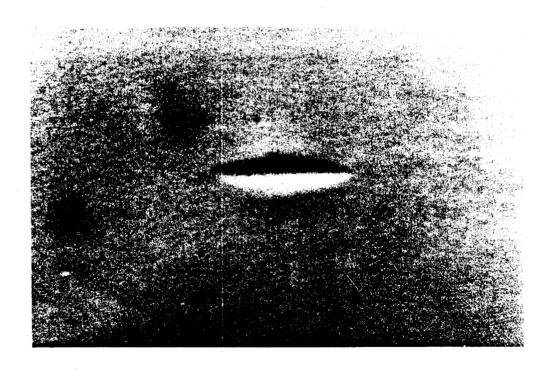
La couche de GaAs non intentionnellement dopée et les couches supérieures différemment dopées ont été épitaxiées dans les mêmes conditions :

- à une vitesse d'épitaxie de 1 μm / h.
- pour une température de substrat T_S de 580°C; deux homojonctions ont été épitaxiées à T_S = 550°C et à T_S = 620°C (N_D =4.10¹⁷ cm⁻³ dans les deux cas) afin d'étudier l'influence de T_S sur les paramètres des couches.

Les caractéristiques de chaque homojonction sont reportées dans le tableau 1. Outre l'influence de T_S sur les paramètres, celle de l'épaisseur de la couche supérieure ($e_1 = 2 \mu m$ et 0,1 μm), de la deuxième couche ($e_2 = 1 \mu m$ et 0,3 μm) et du dopage ($N_D = 4.10^{17}$ et 2.10^{18} cm $^{-3}$) ont été étudiées.

N _D (cm ⁻³)	1.10 ¹⁶	4.10 ¹⁷	2.10 ¹⁸
e ₁ = 2 μm e ₂ = 1 μm	MBE1-1	MBE1-2	MBE1-3
e ₁ = 0,1 μm e ₂ = 1 μm	MBE2-1	MBE2-2	MBE2-3
e ₁ = 1 μm e ₂ = 1 μm		MBE 3	
e ₁ = 0,1 μm e ₂ = 0,3 μm		MBE 4	·

<u>Tableau 1</u>: Caractéristiques et noms des différentes homojonctions GaAs utilisées dans nos expériences.



<u>Figure 5</u>: Figure d'attaque obtenue sur la face (001) d'une homojonction GaAs / GaAs / GaAs dopée [Si] $N_D = 2.10^{18} \, \text{cm}^{-3}$.

4 - 2 Hétérojonction InP / GalnAs / InP

Sa géométrie est la même que celle des homojonctions GaAs (fig 4). Elle a été élaborée par Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) au LCR Thomson - CSF à Orsay. La température de substrat est $T_S = 530\,^{\circ}$ C et le dopage en Silicium de la couche supérieure ($e_1 = 2\,\mu\text{m}$ - InP) est $N_D = 2.10^{16}\,\text{cm}^{-3}$.

4 - 3 Introduction de sources de dislocations

Il est impératif, pour tout échantillon étudié en mode cathodoluminescent, d'avoir un excellent état de surface afin de minimiser les recombinaisons non radiatives en surface, très efficaces dans GaAs. Sur deux des plaquettes étudiées, des éprouvettes de 20 mm sur 5 mm ont été prélevées par clivage suivant les directions <110> afin d'y faire des indentations. Ces dernières permettent d'introduire dans l'échantillon, une faible densité de sources de dislocations fraîches (α et β) en vue d'une étude de contraste de cathodoluminescence. Dans notre cas, les indentations sont appliquées avec une force de 50 grammes sur la face (001). L'énergie nécessaire au glissement des dislocations a été produite thermiquement.

Les indentations effectuées sur nos échantillons sont distantes de 250 μm . Les recuits ont tous été effectués sous air à la température de 360°C pendant une heure, suivis d'un refroidissement lent ($50^{\circ}C$ / h). La mobilité des α étant supérieure à celle des β , celà se traduit en principe par une longueur de bras de type α supérieure à celle des bras de type β , et la mesure des longueurs des bras d'indentation devrait donner une information sur la nature des dislocations [1]. Pourtant, ceci n'a pas été systématiquement observé sur les bras d'indentations réalisés sur l'homojonction fortement dopée Silicium ($N_D=2.10^{18}~cm^{-3}$) pour laquelle quelques bras α sont plus courts que les bras β ; c'est pourquoi il est indispensable, en cas de doute, d'effectuer des figures d'attaque afin de s'affranchir de la nature des bras d'indentations (α ou β).

Avant indentation, une partie de chaque éprouvette a été prélevée afin d'y effectuer des figures d'attaque. La partie restante a été utilisée pour effectuer les mesures de contraste de cathodoluminescence des dislocations.

L'obtention de figures d'attaque sur la face (001) a permis de déterminer sans ambigüité les directions [110] et [110]; c'est à dire respectivement les

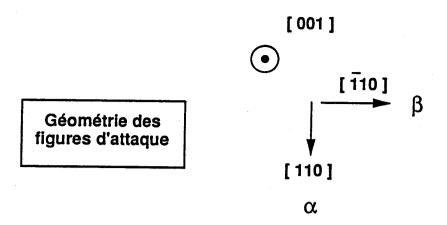


Figure 6: Géométrie des figures d'attaque sur une face (001) [1]. Le grand côté indique la direction [$\overline{1}10$] (β) et le petit côté la direction [110] (α).

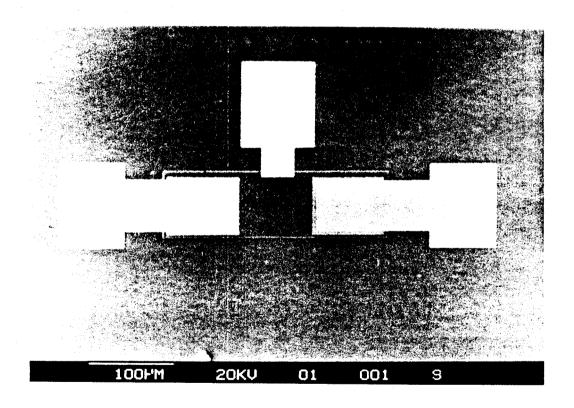


Figure 7: Transistor à effet de champ (électrons secondaires - MEB)

dislocations de type α et β (figure 5). La solution d'attaque est la suivante :

$$5 \text{ g CrO}_3 + 5 \text{ ml HF} + 5 \text{ ml HCl} + 10 \text{ ml H}_2\text{O}$$
 (désionisée)

La cinétique d'attaque est différente selon la nature des plans { 111 } attaqués. Elle est plus lente pour les plans de type Ga que pour les plans de type As. Les figures d'attaque obtenues ont donc des géométries qui dépendent de l'orientation du matériau. Sur les faces { 001 }, elles sont rectangulaires et leurs côtés sont parallèles aux directions < 110 >. Sur la face (001), le grand côté est parallèle à la direction [110] (figure 6).

Une fois clivée, chaque éprouvette est collée une fois pour toute sur un support qui s'adapte à la fois sur le microscope optique utilisé pour indenter et dans la chambre du microscope électronique à balayage. Ceci permet d'éviter des manipulations d'échantillons et des nettoyages intermédiaires susceptibles de polluer la surface.

5 Réalisation de transistors à effet de champ

Un transistor à effet de champ consiste essentiellement en un barreau conducteur, appelé canal, dont les deux extrémités portent des électrodes appelées respectivement "source" et "drain".

Sur l'homojonction MBE1-1 (épaisseur de couche supérieure $e_1=2~\mu m$), des séries de transistors à effet de champ à barrière de Schottky (MESFET) ont été réalisés au Centre d'Hyperfréquences et Semiconducteurs.

Les FET ont été réalisés grâce à quatre masques (figure 7); l'épaisseur de la couche supérieure dopée Silicium ($N_D=4.10^{17}\,\mathrm{cm}^{-3}$) est de 2 μm dans les canaux. Nous verrons dans les chapitres IV et V que cette épaisseur importante par rapport à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires nous a autorisé à utiliser les techniques EBIC décrites dans le chapitre II (cf § 6).

Le contact ohmique est déposé sur la même face de l'homojonction que la grille car le substrat est semi-isolant. Les contacts sont pris sur la grille et sur l'un des deux contacts ohmiques (source ou drain).

La grille est réalisée par évaporation de 500 A de Titane ; elle a une largeur de 100 μ m et une longueur de 50 μ m. Les canaux séparant la grille des deux contacts ohmiques ont une largeur de 100 μ m et une longueur de 20 μ m.

Ces dimensions ne sont pas celles utilisées habituellement dans la fabrication industrielle des transistors à effet de champ, mais elles nous permettent d'avoir une surface de canal suffisante pour effectuer des mesures d'intensité de cathodoluminescence et des observations de défauts. Il est en effet nécessaire, dans nos mesures, de recueillir l'intensité de cathodoluminescence

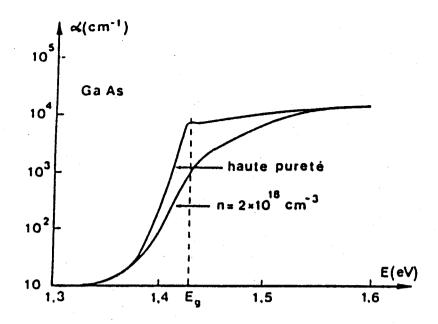


Figure 8: Coefficient d'absorption de GaAs à la température ambiante d'après Casey [4].

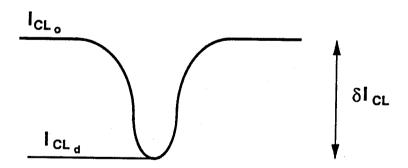


Figure 9 : Profil d'intensité de cathodoluminescence suivant un balayage ligne passant par le centre du défaut.

maximale compte tenu de l'angle limite de réfraction $\,\theta_{c}\,$ (16° pour GaAs) ; une longueur de canal faible risquerait de donner une intensité de cathodoluminescence sous-estimée du fait des pertes photoniques sous la grille et les contacts ohmiques.

Ces transistors ont été utilisés dans nos expériences en EBIC en tant que diodes à barrière de Schottky, ce qui nous a permis d'effectuer des mesures de vitesses de recombinaison en surface [2] et des mesures de longueurs de diffusion dans la couche supérieure [3].

6 Expériences effectuées en mode cathodoluminescent

6-1 Mesures de I $_{CL} = f(E_o)$

Les expériences ont été menées à deux températures différentes : à la température ambiante et à 77 K. Les courbes expérimentales d'intensité de cathodoluminescence en fonction de la tension d'accélération ont été obtenues en cathodoluminescence polychromatique. Les valeurs de coefficient d'absorption α données dans le chapitre IV ne sont donc que des valeurs moyennes, car la variation de α est très grande lorsque l'énergie des transitions est celle du gap comme c'est le cas ici (figure 8). Nous avons donc supposé ce coefficient d'absorption égal dans les différentes couches d'un même échantillon de GaAs. Le signal de cathodoluminescence est recueilli à puissance $P=E_{\rm o}$. $I_{\rm bo}$ constante . A chaque tension d'accélération $E_{\rm o}$, le courant de faisceau I $_{\rm bo}$ est ajusté afin que la condition précédente soit réalisée et que l'on se trouve toujours en injection faible.

Les limites en gain de notre amplificateur ne nous ont pas permis de garder la même puissance pour des échantillons dont le dopage de couche supérieure était différent. Il n'a également pas été possible de garder, pour une homojonction donnée, la même puissance entre les expériences menées à température ambiante et à 77 K. En effet, le signal de cathodoluminescence augmente lorsque la température diminue et cette augmentation est d'autant plus forte que l'on s'approche de la température de l'azote liquide.

6 - 2 Mesures du contraste de cathodoluminescence des dislocations

Nous avons mesuré le contraste de cathodoluminescence (C) et la résolution (W = demi - largeur à mi - hauteur), en fonction de la tension d'accélération E_o des électrons incidents, à 300K et à 77K sur des dislocations provenant des homojonctions :

- MBE1-2 ($e_1 {=} 2 \; \mu m$; $N_D {=} 4.10^{17} \; cm^{-3}$; $T_S {=} 580 ^{\circ} C$).
- MBE1-3 ($e_1 = 2 \mu m$; $N_D = 2.10^{18} cm^{-3}$; $T_S = 580^{\circ}C$).

Le faisceau électronique incident balaye l'échantillon suivant une ligne passant par le centre du défaut à étudier. Le profil d'intensité de cathodoluminescence suivant cette ligne est obtenu sur une table traçante raccordée au microscope électronique à balayage (figure 9).

Les mesures de contraste ont été effectuées à puissance P = E_o . I $_{bo}$ constante sur des dislocations de croissance et sur les dislocations fraîches que sont les demi-boucles à front α et à front β obtenues après indentation et recuit (cf chap I § 3).

BIBLIOGRAPHIE - CHAPITRE III

- [1] WARREN P.D., PIROUZ P. and ROBERTS S.G., Phil. Mag A, 50, L23, (1984).
- [2] WATANABE M, ACTOR G and GATOS H.E, IEEE. Trans. Electron. Dev. ED 24, p 1172, (1977).
- [3] DIMITRIADIS C.A, J. Phys D: Apil. Phys., 14, p 2269, (1981).
- [4] CASEY H.C., SELL D.D., WECHT K.W., J. Appl. Phys., 46, 250, (1975).

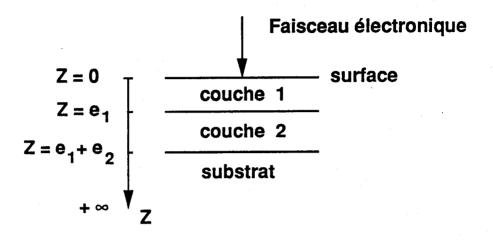


Figure 1 : Géométrie des échantillons. L'origine est à la surface (z = 0).

CHAPITRE IV

CARACTERISATION DES COUCHES EPITAXIEES PAR CATHODOLUMINESCENCE

1 POSITION DU PROBLEME

De nombreux modèles EBIC ont été utilisés pour évaluer localement la longueur de diffusion dans les échantillons massifs [1 - 16] , quelque soit la position de la jonction par rapport à la surface bombardée par le faisceau incident d'un microscope électronique à balayage. Le nombre de modèles utilisant la cathodoluminescence dans ces échantillons massifs est plus limité [17 - 20]. Son développement récent est dû au grand intérêt porté aux composants opto-électroniques tels que les composés III-V et II-VI. La cathodoluminescence présente l'avantage, contrairement à l'EBIC, de ne pas nécessiter la préparation de barrières électriques.

Actuellement, la technologie des lasers et des transistors à effet de champ (FET) n'utilise les échantillons massifs que comme substrats sur lesquels on dépose des couches minces.

2 MODELE

Nous présentons un modèle permettant la caractérisation de couches épitaxiées; le calcul est appliqué au cas de deux couches déposées sur un substrat, cette géométrie étant représentative d'un transistor à effet de champ. La variation de l'intensité de cathodoluminescence I_{CL} est modélisée en fonction de la tension d'accélération E_o . Ceci est applicable à toute homo ou hétérostructures car les conditions aux limites sur les densités et les flux de porteurs minoritaires sont très générales, contrairement à certains auteurs [21]. Le modèle a été testé sur des homojonctions de GaAs obtenues par MBE (Molecular Beam Epitaxy) et sur une hétérojonction InP / GaInAs / InP obtenue par MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition). Les valeurs de longueurs de diffusion et de vitesses de recombinaison en surface, données par ce modèle, ont également été calculées en EBIC (cf chap II § 6).

La géométrie des échantillons est schématisée sur la figure 1. Le faisceau électronique incident est perpendiculaire à la surface et aux interfaces; il est parallèle à l'axe z et l'origine est à la surface.

Les couches sont infinies dans les directions x et y. Les densités de

porteurs minoritaires dans la première $(0 < z < e_1)$ et dans la seconde $(e_1 < z < e_2)$ couche sont notées respectivement $\Delta p_1(\mathbf{r})$ et $\Delta p_2(\mathbf{r})$. $\Delta p_3(\mathbf{r})$ est la densité de porteurs minoritaires dans le substrat. Les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires correspondantes sont notées L_1 , L_2 et L_3 .

Nous avons vu, dans le chapitre II (cf § 3 b) que le signal de cathodoluminescence émis par l'échantillon, est proportionnel à la densité de porteurs minoritaires en excès Δ p (\mathbf{r}); I $_{\text{CL}}$ est donnée par :

$$I_{CL} \sim \frac{\tau}{\tau_r} \cdot \int_{V} A(z) \cdot \Delta p(r) \cdot d^3r$$
 (1)

V est le volume de l'échantillon.

$$\eta = \frac{\tau}{\tau_r}$$
 est le rendement quantique interne.

Le modèle que nous avons développé fait l'hypothèse d'un rendement quantique interne η constant, ce qui n'est donc valable que pour des zones homogènes de l'échantillon.

Sous l'effet du faisceau électronique incident, il y a accumulation des porteurs minoritaires et déplétion des porteurs majoritaires dans les zones de charge d'espace situées près de la surface libre et des interfaces jusqu'à ce qu'on atteigne un régime de bandes plates.

On a vu dans le chapitre II (§ 3 a) que la densité de porteurs minoritaires Δ p (\mathbf{r}) satisfait à l'équation de diffusion qui, sous injection faible, en absence de champ électrique et à l'état stationnaire, s'écrit :

div. grad
$$[\Delta p(r)] - \frac{\Delta p(r)}{L^2} = \frac{g(r)}{D}$$
 (2)

De plus : $\Delta p(r) = \sum_{i} \Delta p_{i}(r)$

avec i =1,2,3 : indice caractérisant la couche.

Les conditions aux limites auxquelles doit satisfaire $\Delta p_i(r)$ sont les suivantes :

- en surface (z = 0):

$$D_{1} \frac{\partial \Delta p_{1}(\mathbf{r})}{\partial z} = V_{S_{01}} \Delta p_{1}(\mathbf{r})$$
 (3)

 $V_{S_{01}}$ est la vitesse de recombinaison en surface.

- à la première interface ($z = e_1$) :

Les flux à l'interface provenant des couches 1 et 2 peuvent être reliés aux densités locales par :

$$D_2 \frac{\partial \Delta p_2(\mathbf{r})}{\partial z} - D_1 \frac{\partial \Delta p_1(\mathbf{r})}{\partial z} = V_{S_{12}} \Delta p_1(\mathbf{r}) = V_{S_{21}} \Delta p_2(\mathbf{r}) \quad (4)$$

 $V_{S_{12}}$ est la vitesse de recombinaison à l'interface 1 de la couche 1 vers la couche 2 ; $V_{S_{21}}$ est la vitesse de recombinaison à l'interface 1 de la couche 2 vers la couche 1. Nous faisons ici l'hypothèse que $V_{S_{12}} = V_{S_{21}}$; celà nous conduit à la continuité de Δ p (\mathbf{r}) à l'interface :

$$\Delta p_1(\mathbf{r}) = \Delta p_2(\mathbf{r}) \tag{5}$$

- à la deuxième interface ($z = e_2$) :

De la même manière que pour l'interface 1, on peut écrire:

$$D_3 \frac{\partial \Delta p_3(r)}{\partial z} - D_2 \frac{\partial \Delta p_2(r)}{\partial z} = V_{S_{23}} \Delta p_2(r) = V_{S_{32}} \Delta p_3(r)$$
 (6)

et

$$\Delta p_2(\mathbf{r}) = \Delta p_3(\mathbf{r}) \tag{7}$$

 $V_{S_{23}}$ et $V_{S_{32}}$ sont les vitesses de recombinaison à l'interface 2 de la couche 2 vers la couche 3 , et de la couche 3 vers la couche 2 respectivement.

- en z
$$\rightarrow$$
 + ∞ :
 $\Delta p_3(\mathbf{r}) = 0$ (8)

La symétrie de révolution du système nous permet de prendre la transformée de Fourier à deux dimensions de l'équation de continuité (2) dans le plan x y :

$$\frac{\partial^2 \Delta p(k,z)}{\partial z^2} - K^2 \cdot \Delta p(k,z) = -\frac{g(k,z)}{D}$$
 (9)

$$K^2 = k^2 + \frac{1}{L^2}$$
 (10)

et

$$\Delta p(k,z) = \int_0^{+\infty} \Delta p(r,z) e^{ikr} d^2r \qquad (11)$$

g (k, z) est la transformée de Fourier à deux dimensions de g (r, z) :

$$g(k,z) = \int_{0}^{+\infty} \int_{0}^{2\pi} g(r,z) \cdot e^{i \cdot k \cdot r} \cdot d^{2}r$$
 (12)

$$= \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} g(r,z) \cdot e^{ikr\cos\theta} \cdot r \cdot dr \cdot d\theta \qquad (13)$$

d 'où

$$= 2\pi \int_{0}^{+\infty} g(r,z) . J_{0}(kr).r.dr$$
 (14)

 J_o (k r) est la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre zéro [22]. Les conditions aux limites pour Δ p (r) restent valables pour Δ p (k , z) qui peut être écrit comme la somme d'une solution générale et d'une solution particulière:

$$\Delta p(k,z) = \Delta p_0(k,z) + \Delta p_1(k,z) \qquad (16)$$

où $\Delta p_1(k, z)$ est solution de (9) et peut s'écrire :

$$\Delta p_1(k,z) = \int_0^e \chi_1(k,z,z') \frac{g(k,z')}{D} dz'$$
 (17)

où e est l'épaisseur de la couche et :

$$\chi_1(k,z,z') = e^{-K|z-z'|}$$
 (18)

est la fonction de Green de l'équation (9) pour un milieu infini, qui satisfait l'équation suivante :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - K^2\right) \chi_1(k, z, z') = -\delta(z - z') \tag{19}$$

D'où Δp_0 (k,z) est solution de (20) :

$$\frac{\partial^2 \Delta p_0(k,z)}{\partial z^2} - K^2 \Delta p_0(k,z) = 0$$
 (20)

et est donné par :

$$\Delta p_0(k,z) = A e^{Kz} + B e^{-Kz}$$
 (21)

On peut donc écrire la solution finale de l'équation (9) qui est la somme de la solution générale et de la solution particulière.

Δ p (k, z) devient pour chaque couche:

$$\Delta p_{i}(k,z) = A_{i}e^{K_{i}z} + B_{i}e^{-K_{i}z} + \frac{1}{2K_{i}}\int_{0}^{+\infty} e^{-K_{i}|z-z'|} \cdot \frac{g(k,z')}{D} dz'$$
(22)

avec i = 1,2,3.

L'expression de Δ p $_i$ (k , z) est générale et a été obtenu en prenant l'hypothèse d'un milieu infini en x et y .

La fonction de génération g(r) choisie (cf chap II § 4) est adaptée au cas des couches GaAs sur substrat GaAs que nous avons étudiées expérimentalement [23] :

$$g(r,z) = \frac{a}{65} \cdot (1,1 + 7,13 \cdot \frac{3z}{R_p}) \cdot \{e^{-\frac{r^2}{\sigma_1^2}} \cdot e^{-\frac{z^2}{\sigma_1^2}} + 3,4 \cdot e^{-\frac{r^2}{\tau_1^2}} \cdot e^{-\frac{z^2}{\sigma_2^2}}$$

$$-\frac{r^{2}}{\tau_{2}^{2}} - \frac{z^{2}}{\sigma_{3}^{2}} + 96 \cdot e^{-\frac{r^{2}}{\tau_{2}^{2}}} \cdot e^{-\frac{r^{2}}{\sigma_{3}^{2}}}$$

avec

$$\sigma_{1} = \sqrt{2} \frac{R_{p}}{3} \qquad \sigma_{2} = \sqrt{2} \frac{R_{p}}{6} \qquad \sigma_{3} = \sqrt{2} \frac{R_{p}}{12}$$

$$\tau_{1} = \sqrt{2} \frac{R_{p}}{9} \qquad \tau_{2} = \sqrt{2} \frac{R_{p}}{27}$$
(24)

Sa transformée de Fourier s'écrit :

$$g(k,z) = 2\pi \int_{0}^{+\infty} g(r,z) . J_{0}(kr).r.dr$$
 (25)

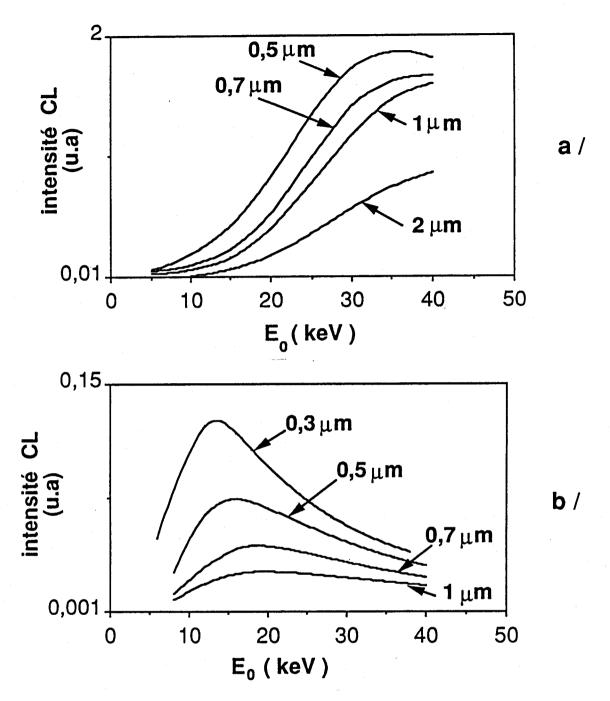


Figure 2: courbes théoriques I $_{C L} = f (E_0)$; influence de la longueur de diffusion L_1 dans la couche supérieure. Les simulations ont été faites avec des vitesses de recombinaison à la surface et aux interfaces identiques et telles que $V_{S_{01}} = V_{S_{12}} = V_{S_{23}} = +\infty$; les coefficients d'absorption optique dans les couches sont tels que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 10^3$ cm $^{-1}$.

a / configuration 1 : Les longueurs de diffusion L_2 et L_3 dans les couches inférieures prennent n'importe quelle valeur.

b / configuration 2 : $L_2 = L_3 = L_1$.

On observe qu'une décroissance de L_1 augmente l'intensité de cathodoluminescence et déplace le maximum vers les basses énergies. De plus, ce maximum se déplace vers les basses énergies quand l'épaisseur de la couche supérieure décroît.

en rappelant que [24] :

$$\int_{0}^{+\infty} x \cdot e^{-\alpha \cdot x^{2}} \cdot J_{0}(\beta \cdot x) \cdot dx = \frac{1}{(2\alpha)^{2}} \cdot e^{-\beta^{2}/4\alpha}$$
 (26)

D'où

$$g(k,z') = 2\pi \frac{a}{65} (1,1 + 7,13 \cdot \frac{3z}{R_p}) \cdot \left\{ e^{-\frac{z'^2}{\sigma_1^2}} \frac{\sigma_1^4}{4} e^{-\frac{k^2\sigma_1^2}{4}} + e^{-\frac{z'^2}{\sigma_2^2}} \frac{\tau_1^4}{4} e^{-\frac{k^2\tau_1^2}{4}} + e^{-\frac{z'^2}{\sigma_3^2}} \frac{\tau_2^4}{4} e^{-\frac{k^2\tau_2^2}{4}} \right\}$$

Les différentes étapes du calcul des Δ p $_{i}$ (k , z) sont détaillées dans l'annexe II .

3 RESULTATS NUMERIQUES

3 - 1 Influence des longueurs de diffusion

Les courbes qui sont présentées ci-dessous ont été calculées pour le jeu de paramètres suivant:

coefficient d'absorption $\alpha = 10^3$ cm ⁻¹

vitesse de recombinaison à la surface $V_{S_{01}}$ et vitesse de recombinaison aux interfaces $V_{S_{12}} = V_{S_{23}}$ infinies.

avec

$$S_{ij} = \frac{V_{S_{ij}} \tau}{L_j}$$
 (28)

* longueur de diffusion L₁ de la couche supérieure

La figure 2 montre des courbes typiques d'intensité de

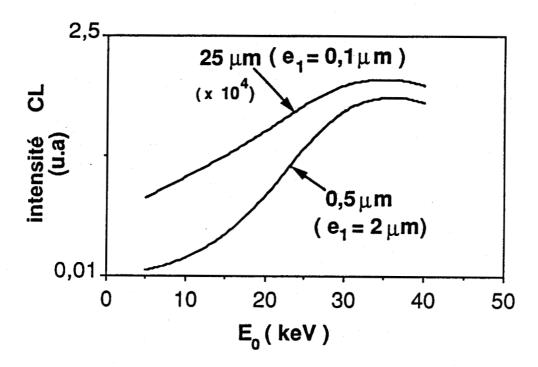


Figure 3 : courbes théoriques I $_{CL} = f(E_o)$; influence de l'épaisseur e_1 de la couche supérieure sur la longueur de diffusion L_1 .

- configuration 1 (e₁=2 μm): L₂ et L₃ prennent n'importe quelle valeur.
- configuration 2 ($e_1 = 0,1 \mu m$) : $L_2 = L_3 = L_1$.

Les autres paramètres sont les mêmes que pour la figure 2.

cathodoluminescence en fonction de la tension d'accélération simulées pour les deux configurations étudiées. Tout d'abord, on remarque qu'une augmentation de L $_1$ provoque une diminution de l'intensité recueillie, et ceci quelle que soit l'épaisseur de la couche supérieure. La valeur de L $_1$ influe essentiellement sur la position en énergie d'un maximum de la courbe I $_{CL}$ = f (E_o). Plus L $_1$ est grande, plus le maximum se déplace vers les fortes tensions d'accélération. Le déplacement est d'autant plus important que la couche est épaisse; une variation de L $_1$ de 0,3 à 1 μ m déplace le maximum de 14 à 20 keV pour la configuration 2 (e_1 = 0,1 μ m) , et de 25 à 52 keV pour la configuration 1 (e_1 = 2 μ m).

A valeur de L_1 constante, le maximum apparaît à une tension d'accélération d'autant plus élevée que la couche supérieure est plus épaisse. Pour une même position en énergie du maximum, une variation de l'épaisseur de la couche supérieure provoque une très grande variation de la longueur de diffusion L_1 ; par exemple, un maximum situé à 35 keV correspond à $L_1=0,5~\mu m$ et à 25 μm pour les configurations 1 et 2 respectivement (figure 3).

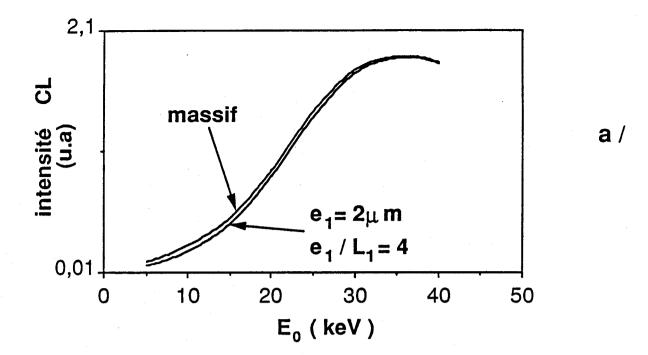
La sensibilité sur la détermination de L_1 augmente avec l'épaisseur de la couche supérieure. En effet, comme le montre la figure 2 dans laquelle les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ ont été calculées pour des valeurs de L_1 , une variation de 1 keV sur la position en énergie du maximum correspond à une variation de L_1 de 30 % pour la configuration 2 (épaisseur de la couche supérieure $e_1 = 0,1$ μ m), tandis qu'elle n'est que de 15 % pour la configuration 1 ($e_1 = 2 \mu$ m).

* longueurs de diffusion L2 et L3 des couches inférieures

Nous avons limité notre étude au cas $L_2 = L_3$ afin de resteindre le nombre de paramètres.

La valeur du rapport e_1 / L_1 conditionne l'accès à la détermination de la longueur de diffusion L_2 , et encore plus à celle de L_3 . La figure 4 montre que si ce rapport est supérieur à 4, la courbe l $_{CL}$ = f (E_o) est alors comparable à celle obtenue dans le cas d'un semiconducteur massif. Il a été vérifié que dans le cas de la configuration 1, L_2 et L_3 n'ont aucune influence sur la courbe l $_{CL}$ = f (E_o) lorsque L_1 est inférieure au micron (e_1 / $L_1 \ge 2$).

Dans la configuration 2, L_2 et L_3 n'ont aucune influence sur la position du maximum de la courbe si leurs valeurs sont supérieures ou égales à L_1 . En revanche, le maximum se déplace vers les basses tensions lorsque le couple (L_2 , L_3) devient inférieur à L_1 . Par exemple, pour une valeur de L_1 de 0,5 μ m, le maximum de la courbe se déplace de 1 keV si L_2 (et L_3) passe de 0,5 à 0,3 μ m (figure 5). Seule la partie de la courbe avant le maximum est affectée



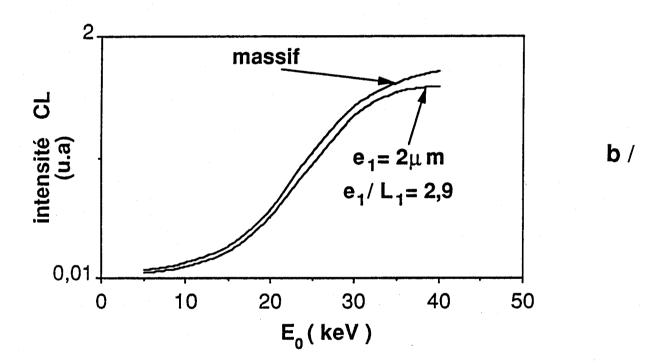


Figure 4 : courbes théoriques $I_{CL} = f(E_0)$; influence du rapport e_1 / L_1 . a / $L_1 = 0.5 \, \mu m$; $L_2 \, et \, L_3$ prennent n'importe quelle valeur. b / $L_1 = 0.7 \, \mu m$; $L_2 \, et \, L_3$ prennent n'importe quelle valeur. Les autres paramètres sont ceux utilisés pour la figure 2. Quand le rapport e_1 / L_1 augmente, les courbes simulées pour les couches épitaxiées sont semblables à celles simulées dans l'échantillon massif.

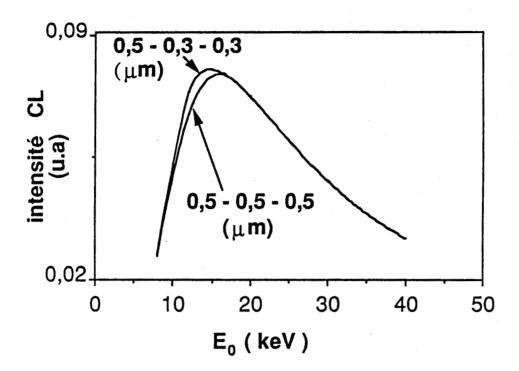


Figure 5 : courbes théoriques $I_{CL} = f(E_0)$; influence, pour la configuration 2 ($e_1 = 0,1 \mu m$), des longueurs de diffusion des couches inférieures L_2 et L_3 Valeurs des triplets $L_1 - L_2 - L_3$. Les autres paramètres sont ceux utilisés pour la figure 2.

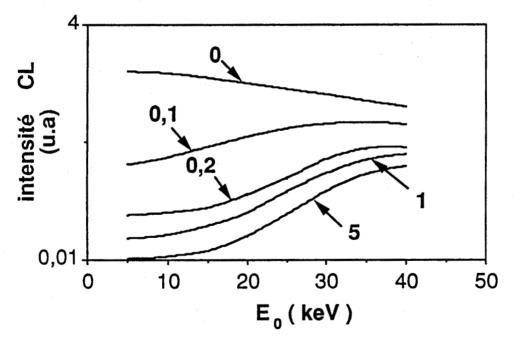
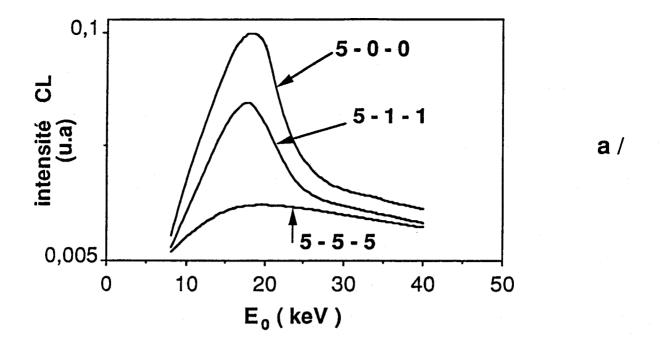


Figure 6: courbes théoriques I $_{CL}$ = f (E $_{o}$); influence, pour la configuration 1 (e $_{1}$ = 2 μ m), de la vitesse de recombinaison en surface $V_{S_{01}}$ (x 10 6 cm / s) simulée avec L $_{1}$ = 1 μ m; L $_{2}$ et L $_{3}$ ainsi que $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$ prennent n'importe quelle valeur; α_{1} = α_{2} = α_{3} =10 3 cm $^{-1}$. Il n'y a pas de maximum quand $V_{S_{01}}$ =0; le maximum se déplace vers les basses énergies quand $V_{S_{01}}$ augmente.



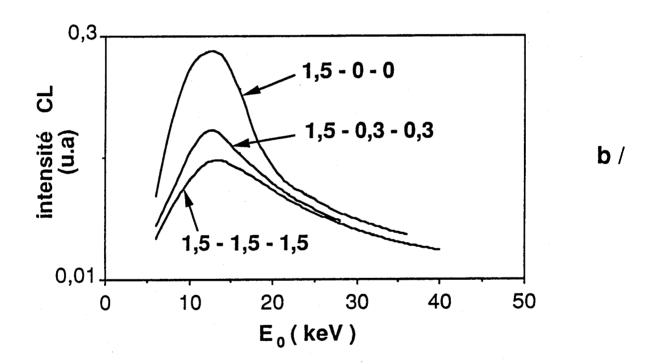


Figure 7: courbes théoriques I $_{CL}$ = f (E $_{o}$) pour la configuration 2 (e $_{1}$ =0,1 μ m); influence des vitesses de recombinaison aux interfaces $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$ simulée avec $V_{S_{01}}$ = + ∞ ; α_{1} = α_{2} = α_{3} =10 3 cm $^{-1}$; Les valeurs des triplets $V_{S_{01}}$ - $V_{S_{12}}$ - $V_{S_{23}}$ (x 10 6 cm / s) sont indiquées pour : a / L_{1} = L_{2} = L_{3} = 1 μ m. b / L_{1} = L_{2} = L_{3} = 0,3 μ m.

par une variation de (L_2, L_3) .

3 - 2 Influence des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces

st vitesse de recombinaison à la surface $\,{ m V}_{{ m S}_{01}}$

La vitesse de recombinaison en surface joue essentiellement sur la présence d'un maximum de la courbe I $_{CL}$ = f (E_o) (figure 6) : celui-ci disparaît totalement lorsque la vitesse est nulle. La partie basse tension des courbes I $_{CL}$ = f (E_o) est évidemment la plus affectée par un changement de $V_{S_{01}}$. On peut également noter qu'une augmentation de $V_{S_{01}}$ provoque un déplacement du maximum vers les fortes tensions; la figure 6 illustre que le maximum passe de 37 à 42 keV lorsque $V_{S_{01}}$ varie de 1 . 10⁶ à 3 . 10⁶ cm / s . Dans la configuration 1, il y a une grande différence entre les courbes obtenues avec $V_{S_{01}}$ =0,1 . 10⁶ cm / s et $V_{S_{01}}$ = 0.

La valeur $V_{S_{01}}=5$. $10^6\, cm$ / s correspond à un cas limite, car toute allure de courbe obtenue avec $V_{S_{01}}>5$. $10^6\, cm$ / s se confond avec celle tracée pour $V_{S_{01}}=5$. $10^6\, cm$ / s.

* vitesses de recombinaison aux interfaces $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$

L'influence des vitesses de recombinaison aux interfaces sera illustrée avec la configuration 2, pour laquelle nous avons choisi $V_{S_{12}}$ égale à $V_{S_{23}}$ afin de restreindre le nombre de paramètres.

Une augmentation des vitesses de recombinaison aux interfaces provoque une diminution de l'intensité de cathodoluminescence sur toute la gamme d'énergie et ce, d'autant plus que celle-ci est proche de son maximum (figure 7); celui-ci se trouve alors légèrement déplacé vers les hautes tensions (il passe de 12 à 14 keV lorsque $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$ varient de 1 .106 à 5 . 10 6 cm/s pour $L_1 = L_2 = L_3 = 0,3~\mu\text{m}$).

3 - 3 Influence du coefficient d'absorption

Nous illustrerons l'influence du coefficient d'absorption sur les courbes

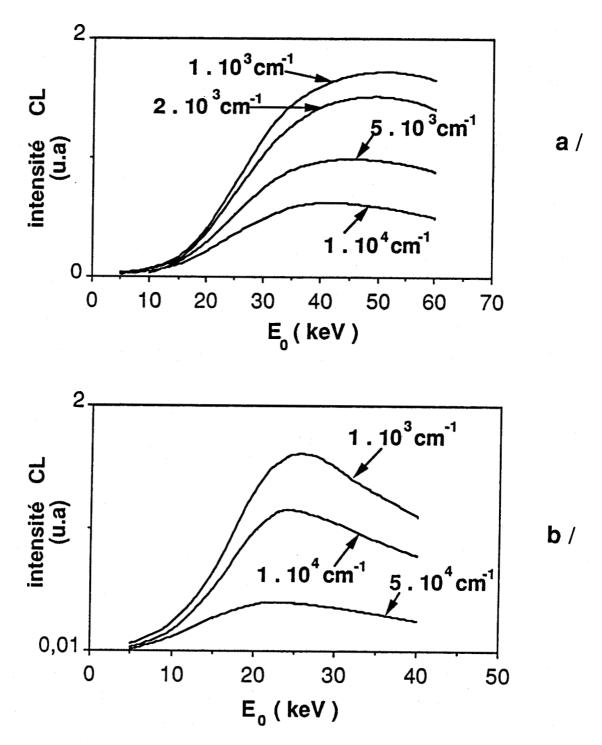


Figure 8 : courbes théoriques I $_{CL}$ = f (E $_{0}$); influence, pour la configuration 1 (e_{1} =2 μ m), du coefficient d'absorption α tel que α_{1} = α_{2} = α_{3} , simulée avec $V_{S_{01}}$ = + ∞ ; $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$ peuvent prendre n'importe quelle valeur. a / L_{1} = 1 μ m; L_{2} et L_{3} peuvent prendre n'importe quelle valeur. b / L_{1} = 0,3 μ m; L_{2} et L_{3} peuvent prendre n'importe quelle valeur. Une décroissance de α provoque une augmentation de l'intensité de cathodoluminescence.

 $I_{CL} = f(E_0)$ dans le cas de la configuration 1.

Une augmentation de α diminue l'intensité de cathodoluminescence et déplace le maximum vers les basses tensions; et ce d'autant plus que la longueur de diffusion L_1 est grande (figure 8). Il passe de 52 keV à 40 keV quand α varie de 1.10 3 à 1.10 4 cm $^{-1}$ pour une longueur de diffusion L_1 = 1 μ m dans la configuration 1.

3 - 4 Discussion des courbes $I_{CL} = f(E_o)$

Nous avons regroupé dans le tableau 1 les effets des différents paramètres sur l'intensité du signal de cathodoluminescence, sur la présence et la position en énergie d'un maximum, ainsi que sur l'allure générale de la courbe.

La présence du maximum n'est influencée que par la vitesse de recombinaison en surface $V_{S_{01}}$. Il est évident que, dans les cas réalistes pour lesquels $V_{S_{01}}$ prend des valeurs allant de 10 ⁴ (InP) à 10 ⁷ (GaAs) cm/s, la courbe I _{CL} = f (E_o) présente toujours un maximum (figure 6).

Que la couche supérieure soit "épaisse" ou "mince", la position en énergie du maximum est principalement déterminée par la longueur de diffusion L_1 dans cette couche (figure 2). Le coefficient d'absorption et la vitesse de recombinaison à la surface (si $V_{\rm S_{01}} > 1.10^5$ cm / s) influencent un peu la position de ce maximum dans tous les cas de figures (figures 8 et 6); les longueurs de diffusion des couches 2 et 3 ainsi que les vitesses de recombinaison aux interfaces 2 et 3 jouent également un rôle sur la position du maximum dans le cas d'une couche épitaxiée "mince" (configuration 2 : figures 5 et 7).

L'intensité de cathodoluminescence est principalement déterminée, quelle que soit E_o , par les valeurs de L_1 , de $V_{S_{01}}$, et de α (figures 2 , 6 et 8). Il faut noter que ($V_{S_{12}}$, $V_{S_{23}}$) influencent quand même notablement l'intensité de cathodoluminescence sur toute la gamme d'énergie (figure 7). Quant à (L_2 , L_3), leurs influences se font sentir essentiellement avant le maximum (figure 5).

Cette méthode de caractérisation de couches épitaxiées ne permet d'accéder qu'à la valeur d'un couple (L_1 , $V_{S_{01}}$) de la couche supérieure, si l'on ne connait pas par avance l'un des deux paramètres. Mais le plus souvent, $V_{S_{01}}$ est connu et la détermination de L_1 est possible sans ambiguité; ceci sera illustré dans le § IV dans le cas de GaAs et dans celui d' InP. Si l'on ne connaît pas $V_{S_{01}}$, il sera nécessaire de déterminer L_1 localement par une autre technique, comme

paramètres Influence	L ₁	(L ₂ ,L ₃)	V _{S₀₁}	(V _S , V _S)	α
présence d'un maximum	non	non	oui	non	non
position du maximum	forte	faible (*)	forte	faible (*)	forte
début de courbe	faible	faible (*)	forte	faible (*)	non
Intensité de catho doluminescence I _{C L}	forte	forte près du max (*)	forte	forte près du max (*)	forte

Tableau 1: Influence des différents paramètres sur les courbes théoriques $I_{Cl}(E_o)$ (présence, position et déplacement du maximum). Les flèches correspondent à un déplacement vers les hautes (\rightarrow) ou basses (\leftarrow) énergies suite à une augmentation du paramètre. L'astérisque (*) indique une influence seulement dans la configuration 2 ($e_1 = 0.1 \ \mu m$)

épaisseur couche 1 paramètre	2 μ m	1 μ m	0,5 μ m	0,1 μm
L ₁ max (μm)	0,7	0,9	10	30
L ₁ (μ m) (avec max à 25 keV)	0,3	0,4	2	5

Tableau 2 : Influence de l'épaisseur de la couche supérieure sur :

- la longueur de diffusion L_1 maximale accessible expérimentalement dans la gamme de tension $0 < E_o < 40 \text{ keV}$.
- la longueur de diffusion L₁ donnant un maximum de la courbe à
 25 keV.

Les autres paramètres sont $V_{S_{01}} = + \infty$ et $\alpha = 10^3$ cm ⁻¹ .

l'EBIC par exemple; les courbes I $_{CL} = f(E_o)$ nous permettrons alors de déterminer la vitesse de recombinaison en surface.

Tout d'abord, on peut noter que la valeur maximale de la longueur de diffusion L_1 de la couche supérieure, à laquelle on peut accéder, dépend principalement de l'épaisseur de cette couche. Nous avons vu précédemment qu'une variation de L_1 affecte plus les courbes $I_{CL} = f(E_0)$ des couches épitaxiées 'épaisses' (type configuration 1) que celles des couches épitaxiées 'minces' (type configuration 2). Des hétérogénéités de luminescence dues à de faibles variations de L_1 seront donc plus facilement détectables dans des couches épaisses que dans des couches minces. Mais encore faut-il pouvoir, expérimentalement, déterminer L_1 .

En effet, la plus grande limitation expérimentale à la détermination de L_1 par cathodoluminescence, réside dans l'étendue des tensions d'accélération accessibles sur les microscopes électroniques à balayage : $0 < E_o < 40 \text{ keV}$. Les ajustements des courbes expérimentales par les courbes théoriques ne peuvent aboutir à un résultat fiable que si elles présentent un maximum. Il en résulte donc qu'il n'est pas possible par cette méthode, de déterminer n'importe quelle valeur de L_1 dans une couche d'épaisseur quelconque. Cette limitation est illustrée dans le tableau 2.

En combinant les restrictions imposées

- par la sensibilité sur la détermination de L_1 à partir de l'ajustement des courbes expérimentales
 - par la présence d'un maximum détectable expérimentalement,

nous pouvons conclure que l'analyse de la variation de l'intensité de cathodoluminescence avec la tension d'accélération ne permet de déterminer que des longueurs de diffusion L_1 inférieures au micron. Ceci est valable également pour L_2 et L_3 .

Un résultat important des calculs que nous avons développés est qu'il est possible, dans le cas d'une couche supérieure 'mince' (configuration 2), de déterminer les vitesses de recombinaison aux interfaces $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$. De plus, la variation de chaque type de paramètres (L, $V_{S_{01}}$, α) modifie différemment la courbe I $_{CL}$ = f (E_{o}); il est donc possible de déterminer, de façon certaine, l'origine d'éventuelles hétérogénéités locales de luminescence.

T dopage	300 K 77 K					
N _D (cm ⁻³)	L ₁ (μ m)	V _{S₀₁} x 10 ⁶ (cm / s)	α (cm ⁻¹)	L ₁ (μ m)	V _{S₀₁} x 10 ⁶ (cm/s)	α (cm -1)
1.10	0,23 ±0,02	1,15	3.10 ⁴	0,23 ±0,02	1,15	3.10 ⁴
4.10 ¹⁷	0,25 ± 0,02	1,25	2.10 ⁴	0,23 ±0,02		2.10 ⁴
2.10 ¹⁸	0,23 ±0,02	1,15		0,2 ±0,02	1	

Tableau 3 : Résultats expérimentaux pour la configuration 1 ($e_1 = 2 \, \mu m$) à T=300 K et T=77 K en fonction du dopage en Silicium de la couche supérieure.

T	300 K			77 K		
N _D (cm ⁻³)	L (μ m)	V _{S₀₁ x 10⁶ (cm / s)}	α (cm ⁻¹)	L (μ m)	V _{S₀₁} x 10 ⁶ (cm/s)	α (cm -1)
1.10	0,25 ± 0,02	0,25 ± 0,02	3.10 ⁴	0,25 ±0,02	1,25	3.10 ⁴
4.10			2.10 ⁴			2.10 ⁴
2.10 ¹⁸				0,23 ±0,02	1,15	

Tableau 4 : Résultats expérimentaux pour la configuration 1 ($e_1 = 2 \mu m$) à 300K et 77 K en fonction du dopage en Silicium de la couche supérieure après un recuit de 360°C pendant une heure.

4 RESULTATS EXPERIMENTAUX

Nous avons testé notre modèle sur des homojonctions GaAs préparées par MBE (Molecular Beam Epitaxy). La configuration 1 a été étudiée pour trois dopages différents de la couche supérieure (homojonctions notées MBE1 - cf chap III - tableau 1) et la configuration 2 a été étudiée pour deux dopages différents de la couche supérieure (homojonctions notées MBE2 - même tableau). Une configuration intermédiaire ($e_1 = 1 \mu m$) a également été observée (MBE 3 - même tableau). L'influence de l'épaisseur de la couche 2 a également été évaluée grâce à MBE 4 ($e_1 = 0.1 \mu m$; $e_2 = 0.3 \mu m$ - même tableau).

Dans tous les échantillons, la deuxième couche est non intentionnellement dopée et la troisième est un substrat semi isolant. Expérimentalement, la valeur de l'intensité de cathodoluminescence a été relevée tous les 2 keV et tous les keV à proximité du maximum.

4 - 1 Configuration 1

Les résultats obtenus à T = 300 K et à T = 77 K sont résumés dans le tableau 3. Compte tenu de l'épaisseur importante de la couche supérieure qui limite l'application du modèle, seuls ont pu être évalués :

- la longueur de diffusion dans la couche 1.
- la vitesse de recombinaison en surface $\,V_{S_{01}}\,.\,$ On prendra, pour nos calculs, une valeur de durée de vie $\,\tau\,$ de 1 ns bien que celle ci n'ait pas été déterminée expérimentalement.
- le coefficient d'absorption α moyen .

* vitesse de recombinaison en surface $V_{S_{01}}$

Le soin apporté dans la préparation des échantillons, et notamment dans la préparation des surfaces, nous autorise à modéliser nos courbes expérimentales en prenant l'hypothèse d'une dead - layer $Z_{\rm d,l}$ nulle.

Dans tous les cas, la vitesse de recombinaison en surface est infinie comme on l'admet généralement pour GaAs [3 , 25].

Les valeurs reportées dans le tableau 3 sont moyennées à partir de nombreuses mesures effectuées sur des zones différentes de chaque plaquette (centre et bords) et il faut noter, sur un même échantillon, l'uniformité des résultats obtenus.

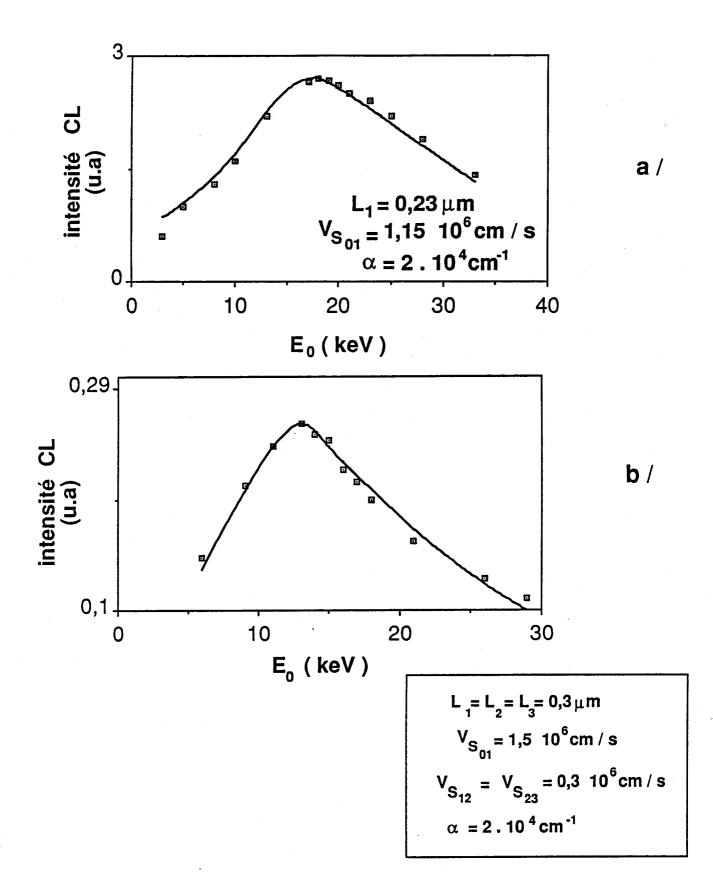


Figure 9 : courbes expérimentales I $_{CL}$ = f (E $_{o}$) à 77 K obtenues sur des couches homojonctions de GaAs dopées Silicium (N_{D} = 4.10 17 cm $^{-3}$). Les traits continus représentent les courbes théoriques. a / couche " épaisse " (e_{1} = 2 μm ; échantillon MBE 1-2) ; l'ajustement est réalisé pour L_{1} = 0,23 μm ; $V_{S_{01}}$ = 1,15.10 6 cm / s ; α = 2.10 4 cm $^{-1}$. b / couche "mince " (e_{1} = 0,1 μm - échantillon MBE 2-2) ; l'ajustement est réalisé pour L_{1} = L_{2} = L_{3} = 0,3 μm ; $V_{S_{01}}$ =1,5.10 6 cm / s ; $V_{S_{12}}$ = $V_{S_{23}}$ = 0,3. 10 5 cm / s et pour la même valeur de α que dans a /.

* longueurs de diffusion L1

Il apparaı̂t nettement que la longueur de diffusion de la couche 1 ne dépend pas de son dopage. Elle est égale à 0,23 μ m \pm 0,02 μ m à 300 K (cf figure 9 - a).

Il semble que la longueur de diffusion calculée à 77 K soit légèrement inférieure à celle calculée à 300 K : elle passe de 0,23 μm à 0,2 μm pour l'échantillon MBE1-3. Ce résultat doit être nuancé par l'erreur expérimentale et par les limites de précision du modèle théorique utilisé.

Des recuits sous air à 360°C pendant une heure ont été effectués sur chaque homojonction et les paramètres L_1 , $V_{S_{01}}$ et α ont été mesurés avant et après recuit à 300K et à 77K (tableau 4). Les zones à étudier sont repérées avant recuit par une série d'indentations.

On note, dans tous les cas, une légère augmentation de la longueur de diffusion de la couche 1 après recuit de l'échantillon : elle passe de 0,23 μm à 0,25 μm . Une fois encore, ces valeurs de L_1 , calculées sur différentes zones de l'homojonction, sont très voisines.

Afin de tester la validité des résultats obtenus en ce qui concerne L_1 et $V_{S_{01}}$, des mesures de ces paramètres ont été effectuées en EBIC [16 , 26]. Pour celà, une série de transistors à effet de champ a été élaborée à partir de l'homojonction MBE1-1. Rappelons que la surface importante des canaux (cf chap III § 5) nous a permis d'y effectuer des mesures de signal de cathodoluminescence. Nous y avons déterminé en EBIC, la longueur de diffusion L_1 dans la couche supérieure ainsi que la vitesse de recombinaison en surface $V_{S_{01}}$ suivant les techniques développées dans le chapitre II (cf § 6). Des mesures ont été effectuées sur trois zones différentes et reportées dans le tableau 5 ainsi que les valeurs calculées en cathodoluminescence dans les mêmes zones (dans le canal). Pour l'obtention de $V_{S_{01}}$, une durée de vie de 1 ns a été introduite sans la calculer expérimentalement. Les valeurs obtenues par les deux méthodes sont assez voisines :

- L_1 = 0,25 μ m \pm 0,2 μ m et $V_{S_{01}}$ = 1,2. 10⁶ cm / s en cathodoluminescence à 300K.
- L $_1$ = 0,3 μm \pm 0,4 μm et $V_{S_{01}}$ > 1,5 . 10 6 cm / s $\,$ en EBIC à la même température.

zone		zone 1		zone 2		zone 3	
technique		L ₁ (µm)	V _{S 01} (10 ⁶ cm/s)	L ₁ (μm)	V _S 01 (10 ⁵ cm/s)	L ₁ (μm)	V _{S₀₁ (10⁵cm/s)}
CL		0,23	1,15	0,25	1,25	0,25	1,25
EBIC	7 keV	0,26	1,66	0,26	1,56	0,31	2,17
EBIC	10 keV	0,31	1,98	0,32	1,92	0,34	2,38

4 - 2 Configuration 2

Contrairement à la configuration 1, nous avons pu atteindre non seulement les valeurs des longueurs de diffusion L_2 et L_3 des couches inférieures, mais également les vitesses de recombinaison aux interfaces $V_{S_{12}}$ et $V_{S_{23}}$. Ces valeurs, calculées à température ambiante et à 77 K, sont reportées dans le tableau 6. Un exemple d'ajustement de courbe est illustré sur la figure 9 - b. Il faut noter la grande homogénéïté des résultats obtenus pour différentes zones d'une même plaquette.

Les limites du modèle théorique et l'incertitude expérimentale nous permettent d'évaluer les longueurs de diffusion L_2 et L_3 si elles sont suffisamment différentes de L_1 ; il en est de même pour les vitesses de recombinaison aux interfaces qui doivent être suffisamment différentes de la vitesse de recombinaison en surface. Nous ne donnons ici que des segments de valeurs possibles pour L_2 et L_3 .

Nous n'avons pas constaté de différences significatives dans les valeurs des longueurs de diffusion L_1 , L_2 , et L_3 d'un même échantillon. Comme dans le cas de la configuration 1, la longueur de diffusion ne dépend pas du dopage et semble diminuer entre la température ambiante et 77 K; elle ne varie pas avec la température à laquelle a été effectuée l'épitaxie.

Si les vitesses de recombinaison en surface sont infinies sur tous les échantillons étudiés, les vitesses de recombinaison aux interfaces sont différentes suivant la température à laquelle a été effectuée l'épitaxie. Une valeur faible de vitesse de recombinaison à l'interface laisse présumer, localement, d'un bon état structural de l'interface. Il apparaît que la température d'épitaxie a une influence sur la qualité des interfaces réalisées. Les différences sont nettes lorsque l'on descend sous la température de $T_S = 580\,^{\circ}\text{C}$. Celle ci semble être la plus adaptée à la réalisation d'homojonctions GaAs / GaAs / GaAs comportant des interfaces de bonne qualité; une température inférieure à $580\,^{\circ}\text{C}$ semble altérer les interfaces.

4 - 3 Autres configurations

L'homojonction notée MBE3 présente une épaisseur e₁ intermédiaire par rapport aux deux configurations précédentes. Les paramètres obtenus sont sensiblement les mêmes que dans le cas des configurations 1 et 2. Si l'on compare, à température et à puissances égales, les courbes expérimentales obtenues à partir des échantillons MBE1-2, MBE2-2 et MBE3 qui ont même dopage, même paramètres physiques mais des épaisseurs e₁ de couche 1 différentes. Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau 7 ; on constate que

N _p (cm ⁻³) paramètres	1.10 ¹⁶ 580°C	4.10 ¹⁷ 550°C	4.10 ¹⁷ 580°C	4.10 ¹⁷ 620°C			
L ₁ (µm)		0,3 <u>+</u> 0,1					
L ₂ = L ₃ (μm)	0,3 - 1						
V _{S₀₁} (x 10 ⁶ cm/s)	1,5						
$V_{S_{12}} = V_{S_{23}}$ (x 10 ⁵ cm/s)	0,9 à 1,5	1,5	0,3 à 0,9	0,9 à 1,5			
$\alpha (10^4 \text{cm}^{-1})$	3	2					

a /

N _p (cm ⁻³) paramètres	1.10 ¹⁶ 580°C	4.10 ¹⁷ 550°C	4.10 ¹⁷ 580°C	4.10 ¹⁷ 620°C		
L ₁ (μm)		0,2 ±	0,05			
L ₂ = L ₃ (μm)	0,2 - 1					
V _{S 01} (x 10 ⁶ cm/s)	1					
$V_{S_{12}} = V_{S_{23}}$ $(x \cdot 10^6 \text{cm/s})$	0,2 à 0,6	1	0,2	0,2 à 0,6		
α (10 ⁴ cm ⁻¹)	3 2					

b /

a/ à 300 K.

b/ à 77 K.

le signal de cathodoluminescence diminue quand l'épaisseur de la première couche diminue. Ce résultat est en accord avec nos calculs numériques. Comme dans le cas de la configuration 1, il n'est pas possible d'atteindre de faibles variations des vitesses de recombinaison aux interfaces et des longueurs de diffusion des couches 2 et 3 à cause de l'épaisseur trop importante de la couche 1. Les paramètres obtenus sont sensiblement les mêmes que dans le cas des deux configurations précédentes.

L'homojonction notée MBE 4 présente l'intérêt d'avoir une épaisseur e_2 inférieure à celle de la configuration 2. Les paramètres sont reportés dans le tableau 7. Les résultats sont proches de ceux obtenus pour la configuration 2, dans les mêmes conditions de dopage et d'épitaxie. Il faut noter qu'à épaisseur de couche supérieure e_1 égale, et dans les mêmes conditions, l'intensité de cathodoluminescence I_{CL} diminue quand l'épaisseur de la deuxième couche diminue; ceci est confirmé par le modèle théorique.

4 - 4 Hétérojonction InP / GalnAs / InP

Notre modèle a également été testé sur une hétérojonction dont la configuration est représentée sur la figure 10. L'épaisseur importante de la première couche ne nous permet pas d'évaluer précisément les paramètres des couches inférieures; seules les valeurs de L_1 , de $V_{S_{01}}$ et de α ont été déterminées:

$$L_1 = (0.6 \pm 0.1) \mu m$$

 $V_{S_{01}} = (4.2 \pm 0.6) \cdot 10^4 \text{ cm/s}$
 $\alpha = 3.10^4 \text{ cm}^{-1}$

Comme on pouvait s'y attendre [24] , la vitesse de recombinaison en surface est très faible dans le cas d'InP. La longueur de diffusion L_1 est supérieure à celles calculées pour GaAs.

4 - 5 Discussion

En modélisant des allures d'intensité de cathodoluminescence I_{cl} en fonction de la tension d'accélération E_o d'un faisceau électronique dans un microscope électronique à balayage, nous avons pu caractériser localement des couches épitaxiées, alors que les modèles existant dans la littérature ne s'appliquent qu'au cas de l'échantillon massif. L'accès aux paramètres des couches inférieures dépend du rapport e_1 / L_1 de l'épaisseur de la couche supérieure sur la longueur de diffusion dans cette même couche . Une originalité du modèle est d'exprimer quantitativement des vitesses de recombinaison aux

échantillon	ME	BE 3	MI	BE 4
T (K) paramètres	300	77	300	77
L ₁ (μm)	0,25 ± 0,02	0,23 ±0,02	0,3 ±0,2	
(L ₂ , L ₃) (μm)			0,3 - 3	
V _{S 01} (x 10 ⁶ cm / s)	1,15	1,25	1,5	
V _{S12} = V _{S23} (x 10 ⁶ cm/s)			1,5	0,9 à 1,5
α (10 ⁴ cm ⁻¹)	2			

 $\begin{array}{c} \underline{\text{Tableau} \ 7}: & \text{R\'esultats exp\'erimentaux à 300K et à 77 K pour les \'echantillons}: \\ & -\text{MBE 3 } (e_1 = 1 \mu\text{m }; e_2 = 1 \mu\text{m }; N_D = 4.10^{17} \,\text{cm}^{-3} \,\text{ [Si]}; T_S = 580^{\circ}\text{C}). \\ & -\text{MBE 4 } (e_1 = 0,1 \,\,\mu\text{m }; e_2 = 0,3 \,\,\mu\text{m }; N_D = 4.10^{17} \,\,\text{cm}^{-3} \,\text{ [Si]}; T_S = 580^{\circ}\text{C}). \end{array}$

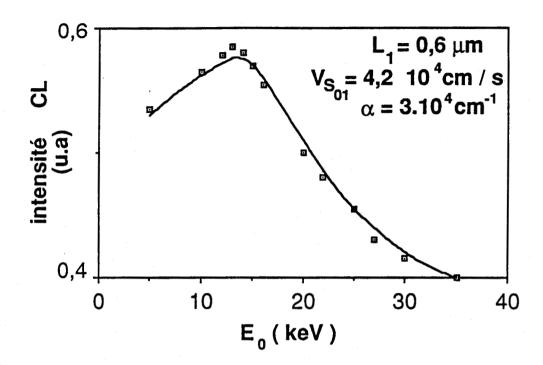
interfaces alors que la plupart des travaux effectués sur ces interfaces se contentent d'utiliser la cathodoluminescence comme technique d'imagerie.

Appliqué au cas d'une hétérostructure InP /GaInAs / InP, nous avons pu mettre en évidence une faible vitesse de recombinaison en surface.

Dans le cas d'homojonctions GaAs, le modèle nous a permis d'établir l'indépendance de la longueur de diffusion vis à vis du dopage de la couche dans laquelle elle est calculée. Ce résultat est en accord avec d'autres travaux effectués sur GaAs massif dopé Te (type n) [27] et dans des couches GaAs dopées Ge (type p) et Sn (type n) [28]. Ceux ci montrent que pour un dopage inférieur à 1 ou 2.10¹⁸ cm⁻³, la longueur de diffusion des porteurs minoritaires est relativement constante, alors qu'elle diminue fortement pour des dopages supérieurs à 2.10¹⁸ cm⁻³ à cause de l'augmentation des centres de recombinaison radiatifs.

Nous avons également montré que la longueur de diffusion n'est pas affectée par une variation de la température de substrat T_S . En revanche, les vitesses de recombinaison aux interfaces calculées sur des couches " minces " semblent varier avec cette température T_S . Celle ci est un paramètre de croissance très important au même titre que la pression du flux d'arsenic [29 , 30]. Elles déterminent non seulement la qualité des surfaces (présence de défauts ovals), mais elles influencent également l'incorporation d'impuretés et de défauts. Bien qu'une température $T_S = 580\,^{\circ}\text{C}$ donne une meilleure vitesse de recombinaison aux interfaces, il faut toutefois noter que ces dernières sont, dans tous les cas étudiés, très élevées; ceci laisse présumer que de nombreux défauts dûs à des problèmes d'épitaxie, sont présents à l'interface.

Cette étude n'est qu'une première étape dans la caractérisation des interfaces; conjugué à des techniques d'imagerie (topographie X, , microscopie électronique en transmission), ce modèle permettra une meilleure compréhension des états d'interface d'homo et d'hétérostructures.



<u>Figure 10</u>: courbes expérimentales $I_{CL} = f(E_o)$ obtenues à 300K sur une hétérojonction InP / GaInAs / InP dopée Silicium 2.10¹⁶ cm⁻³. Le trait continu représente la courbe théorique. L'ajustement est réalisé pour $L_1 = 0.6 \ \mu m$, $V_{S_{01}} = 4.2 \cdot 10^4 \ cm$ / s et $\alpha = 3.10^4 \ cm^{-1}$.

BIBLIOGRAPHIE - CHAPITRE IV

- [1] BERZ F. and KUIKEN H.K., Sol. State. Electron., 19, 437, (1976).
- [2] VAN ROOSBROECK W., J. Appl, Phys, 26, 380, (1955).
- [3] JASTRZEBSKI L., LAGOWSKI J. and GATOS H.C., Appl. Phys. Lett., **27**, 537, (1975).
- [4] SHEA S.P., PARTAIN L.D. and WARTER P.J., Proc. 11th Ann SEM Symp. IITRI, Chicago, 435, (1978).
- [5] FUJUKI T., MATSUNAMI H. and TANAKA T., J. Phys. D, 13, 1093, (1980).
- [6] AKAMATSU B., HENOC J. and HENOC P., J. Appl. Phys., **52**, 7245, (1981).
- [7] FUYUKI T. and MATSUNAMI H., Japan J. Apil. Phys., 20, 745, (1981).
- [8] OELGART G., FIDDICKE H. and REULKE R., Phys. Stat. Sol. (a), 66, 283, (1981).
- [9] BURK D.E. and SUNDARESAN R., Solid State Electron., 27, 59, (1984).
- [10] BRESSE J.F. , Proc. 5th Ann. SEM Symp. IITRI , Chicago , 105 , (1972).
- [11] VAN OPDORP C., Philips Res. Repts, **32**, 192, (1977).
- [12] IOANNOU D.E. and DAVIDSON S.M., J. Phys. D, 12, 1339, (1979).
- [13] DONOLATO C., Solid State Electron., 25, 1077, (1982).
- [14] HACKETT W.H., J. Appl. Phys., 42, 3249, (1971).

- [15] HACKETT W.H, J. Apll. Phys., 43, 1649, (1972).
- [16] DIMITRIADIS C., J. Phys. D, 14, 2269, (1981).
- [17] HERGERT W., RECK P., PASEMANN L. and SCHREIBER J., Phys. Stat. Sol. (a), 101, 611, (1987).
- [18] HERGERT W. and HILDEBRANDT S., Phys. Stat. Sol. (a), 103, K145, (1987).
- [19] HILDEBRANDT S., SCHREIBER J., HERGERT W. and PETROV V.I., Phys. Stat. Sol. (a), 110, 283, (1988).
- [20] ACHOUR S., Phil. Mag. Lett., 59, 205, (1989).
- [21] KONNIKOV S.G and al, Soviet Phys. Semicond., **20**, 661, (1986).
- [22] ABRAMOVITZ M. and I.A. STEGUN, Handbook of Mathematical Functions, 358, edited by ABRAMOVITZ and STEGUN, Dover Publications Inc., New York, (1965).
- [23] AKAMATSU B., HENOC P. and MARTINS R.B., J. Microsc. Spectr. Electron., 14, 12 a, (1989).
- [24] GRADSHTEYN I.S. and RYZHIK I.M., Tables of Integrals Series and Products, 717, edited by A. JEFFREY, Academic Press, (1965).
- [25] HOFFMAN C.A., GERRITSEN H.J. and NURMIKKO A.V., J. Appl. Phys, **51**, 1603, (1980).
- [26] WATANABE M., ACTOR G. and GATOS H.E., IEEE. Trans. Electron. Dev. ED 24, 1172, (1977).
- [27] HWANG C.J., J. Appl. Phys., 40, 3731, (1969).
- [28] CASEY H.C., MILLER B.I. and PINKAS E., J. Appl. Phys., 44, 1281 (1973).
- [29] MISSOUS M. and SINGER K.E., Appl. Phys. Lett., 50, 694, (1987).

[30] WANG Y.H., LIU C., CHANG C.Y. and LIAO S.A., J. Vac. Sci. Technol. B, 4, 30, (1986).

CHAPITRE V

CONTRASTE DE CATHODOLUMINESCENCE DES DISLOCATIONS

Nous avons étudié le contraste de cathodoluminescence de dislocations :

- de croissance.
- introduites par microindentations dans des couches de GaAs dopées silicium épitaxiées sur un substrat GaAs semi-isolant.

Les dislocations sont perpendiculaires à la surface d'homojonctions dont l'épaisseur de couche supérieure est égale à $e=2~\mu m$, ce qui nous permet de considérer ces deux homojonctions comme des échantillons massifs (cf chap IV - § 3 - 1). De plus, les calculs effectués dans le chapitre IV ont montré que la vitesse de recombinaison en surface de ces couches peut être considérée comme infinie; cette condition aux limites est identique à celle qui décrit, en mode EBIC, la collecte des porteurs minoritaires par la zone de charge d'espace d'une diode de Schottky parallèle à la surface. Nous avons donc pu adapter à la cathodoluminescence la théorie du contraste EBIC des dislocations perpendiculaires à la surface développée dans le cas d'échantillons massifs [1].

I RESULTATS EXPERIMENTAUX

I - 1 Procédure expérimentale

Le contraste C (%) et la résolution W (μm) ont été étudiés, en cathodoluminescence polychromatique, en fonction de la tension d'accélération E_o des électrons incidents (et donc de leur profondeur de pénétration R_p) à 300K et à 77K sur des dislocations de croissance, et sur des dislocations (α et β) introduites par microindentations (cf chap III) dans deux homojonctions dopées Silicium 4.10^{17} cm⁻³ et 2.10^{18} cm⁻³ pour les

E _o (keV)	5	6	7	8	9	10	20	30
R _p (μm)	0,14	0,19	0,25	0,32	0,39	0,48	1,62	3,3

N _p (cm ⁻³)	4.10 ¹⁷	2.10 ¹⁸
300	P = 1.10 ⁻⁵ W	P = 1.10 ⁻⁶ W
77	P = 3.10 ⁻⁶ W	P = 7.10 ⁻⁷ W

<u>Tableau 2</u>: Puissances expérimentales $P = E_o$. I_{bo} en fonction du dopage et de la température.

T dopage	300 K			77 K		
N _D (cm ⁻³)	L ₁ (μm)	V _{S₀₁} x 10 ⁶ (cm/s)	α (cm ⁻¹)	L ₁ (μm)	V _{S₀₁} x 10 ⁶ (cm/s)	α (cm ⁻¹)
4.10	0,25	1,25	2.10 ⁴	0,25 ±0,02	1,25	2.10 ⁴
2.10	±0,02	.,20		0,23 ±0,02	,	2.10

Tableau 3: Valeurs expérimentales des paramètres physiques (L_1 , $V_{S_{01}}$, et α) des homojonctions dont le contraste CL des dislocations a été étudié (MBE1-2 et MBE1-3).

échantillons notés MBE1-2 et MBE1-3 respectivement. Nous appelons résolution la demi largeur à mi hauteur du profil d'intensité de cathodoluminescence lors d'un balayage ligne passant par le centre du défaut (cf figure 9 chap III).

Les tensions d'accélération que nous avons utilisées sont : 5, 6, 7, 8, 9, 10, 20 et 30 keV. Les profondeurs de pénétration de Gruen R_p correspondantes (cf chap II) sont indiquées dans le tableau 1.

Les mesures ont été effectuées, pour chaque échantillon, à puissance $P=E_o$. I_{b_o} constante (tableau 2). La puissance choisie correspond à la puissance minimale (et donc au courant de faisceau minimal) permettant de faire des mesures de contraste sur toute la gamme de tension d'accélération ($5~\text{keV} \leq E_o \leq 30~\text{keV}$). Ceci permet ,d'une part, de se placer dans des conditions d'injection faible, et d'autre part de limiter la contamination sur l'échantillon.

Il n'a pas été possible, expérimentalement, de conserver la même puissance à 300K et à 77K sur toute la gamme d'énergie; en effet, la gamme d'utilisation de notre amplificateur ne permet pas de mesurer la forte augmentation de l'intensité de cathodoluminescence dûe à une diminution de température de 300K à 77K . De plus, les puissances minimales accessibles expérimentalement sont différentes sur les deux homojonctions différemment dopées, car l'intensité de cathodoluminescence augmente quand le dopage $N_{\rm D}$ passe de 4.10^{17} à 2.10^{18} cm⁻³.

Les dislocations de croissance sont distantes du réseau d'indentations de plusieurs centaines de microns. Les dislocations α et β choisies appartiennent à différentes rosettes d'indentation, et sont toutes situées en bout de bras.

Préalablement aux mesures de contraste et de résolution, nous avons effectué des mesures d'intensité de cathodoluminescence en fonction de E_o près des dislocations étudiées afin de déterminer la longueur de diffusion L dans la couche supérieure (cf chapitre IV). Les valeurs des différents paramètres sont reportées dans le tableau 3. La longueur de diffusion est de 0,25 μ m sur les deux homojonctions. Aucune différence significative sur sa valeur à l'intérieur et à l'extérieur des bras des rosettes n'a pu être mis en évidence.

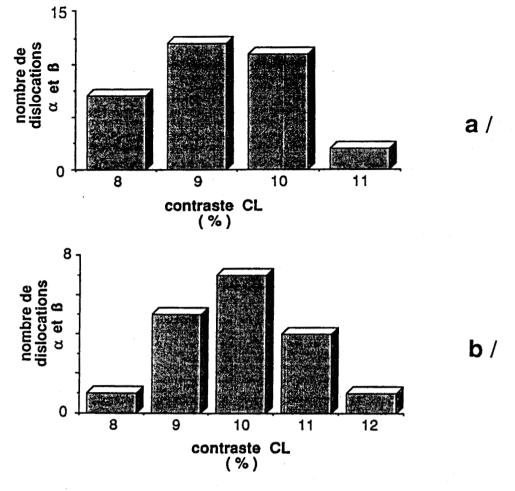


Figure 1 : Histogramme expérimental du contraste de cathodoluminescence en fonction du nombre de dislocations α et β étudiées pour un dopage N_D =4.10¹⁷ cm⁻³ à 30 keV. a / 300K

Le contraste des α est égal à celui des β.

b / 77K

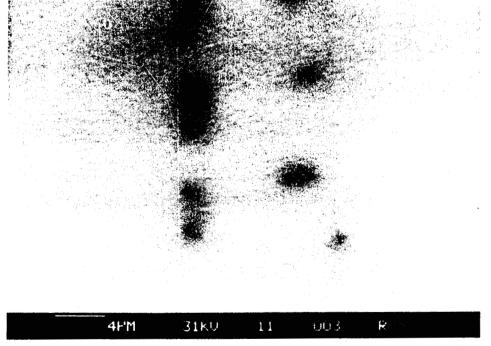


Figure 2: Hâlo entourant des dislocations α sur l'homojonction dopée [Si] $N_D = 4.10^{17}$ cm⁻³. Mode cathodoluminescent à 30 keV et 300 K.

I - 2 contraste et résolution des dislocations

Les valeurs de contraste et de résolution obtenues expérimentalement sur les trois types de dislocations dépendent de la température, du dopage de l'échantillon, de la tension d'accélération E_o ainsi que du courant de faisceau I_{bo} utilisé. Pour un même type de dislocation, des comparaisons s'avèrent difficiles à des températures différentes et sur des homojonctions différemment dopées puisque les puissances utilisées sont différentes. Il nous a toutefois été possible de dégager un comportement global à 30 keV pour les deux types de dislocations α et β en fonction du dopage du matériau.

Seules les valeurs de contraste relevées à 30 keV sur ces dislocations sont indiquées, car elles correspondent aux taux d'injection les plus faibles (c'est à dire aux courants de faisceau les plus bas). La résolution est également étudiée à 300K. Les valeurs obtenues sont le résultat d'une étude statistique menée sur un grand nombre de dislocations.

Dans les mêmes conditions de température, de dopage et de puissance, les valeurs de contrastes obtenues sur les dislocations "fraîches" α ou β sont très voisines d'une dislocation α (ou β) à une autre. En revanche, il n'en est pas de même pour les dislocations de croissance. Dans les mêmes conditions expérimentales et pour les deux dopages étudiés, on peut avoir :

```
- C_{croissance} \le C_{\alpha} (ou C_{\beta}) ou - C_{croissance} \ge C_{\alpha} (ou C_{\beta})
```

suivant la dislocation de croissance choisie.

I - 2 - 1 Echantillon dopé $N_D = 4.10^{17}$ cm⁻³

Les valeurs de contraste obtenues à 300 K et à 77 K sur les dislocations α et β de l'échantillon dopé $N_D=4.10^{17}$ cm⁻³ sont données dans le tableau 4. La dénomination C_{max} correspond à la valeur la plus souvent observée expérimentalement, c'est à dire aux valeurs maxima des histogrammes donnant le nombre de dislocations ayant le même contraste (figure 1 par exemple).

Le contraste des dislocations α est sensiblement égal à celui des dislocations β , et ceci aux deux températures étudiées.

En ce qui concerne la résolution à 300K, celle des dislocations ß est

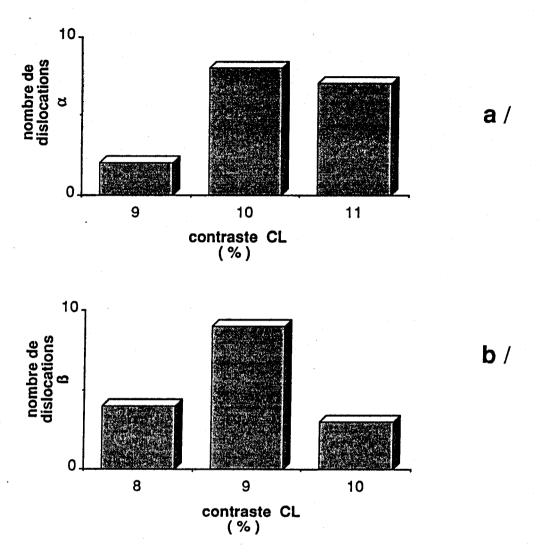


Figure 3 : Histogrammes expérimentaux du contraste de cathodoluminescence en fonction du nombre de dislocations α et β étudiées pour un dopage N_D =2.10¹⁸ cm⁻³ à 300K et 30 keV. a / dislocations α b / dislocations β

Le contraste des α est supérieur à celui des β .

toujours inférieure à celle des dislocations α à 300K et à 77 K. On a :

$$W_{\beta} = 1.4 \, \mu m$$
 et $W_{\alpha} = 1.2 \, \mu m$

Il faut noter la présence d'un hâlo grisatre entourant systématiquement les dislocations (figure 2).

T (K)	$\mathbf{C}_{\alpha} = \mathbf{C}_{\beta}$ (%)	C _{max}
300	8 à 11	9
77	8 à 12	10

Tableau 4: Valeurs expérimentales du contraste de cathodoluminescence des α et β en fonction de la température à 30 keV pour un dopage $N_D = 4.10^{17}$ cm⁻³. La valeur C_{max} correspond au sommet des histogrammes représentés ci contre (voir fig 1).

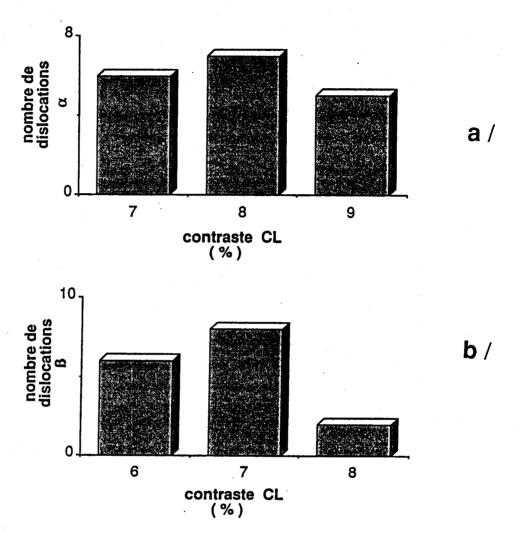
l-2-2 Echantillon dopé $N_D = 2.10^{-18}$ cm⁻³

Les valeurs de contraste obtenues à 300K et à 77 K sur les dislocations α et β sont reportées dans le tableau 5 ainsi que les valeurs C_{max} des dislocations α et β correspondant aux maxima de leurs histogrammes respectifs (figures 3 et 4). On observe, comme dans l'échantillon dopé $N_D=4.10^{17}$ cm $^{-3}$, la présence d'un hâlo grisatre autour des dislocations.

A 300K et à 77 K, le contraste des dislocations α est majoritairement supérieur à celui des β .

Comme dans le cas précédent, $W_{\mbox{\scriptsize B}}$ est toujours supérieur à $\,W_{\alpha}\,$ à 300K :

$$W_{\beta} = 1.3 \, \mu \text{m}$$
 et $W_{\alpha} = 1.1 \, \mu \text{m}$.



Histogrammes expérimentaux du contraste de cathodoluminescence er Figure 4: fonction du nombre de dislocations α et β étudiées pour un dopage $N_D=2.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ à 77K et 30 keV}.$ a / dislocations α

b / dislocations ß

Le contraste des $\,\alpha\,$ est supérieur à celui des $\,\beta.$

T (K)	C _α (%)	C _β	C _α max (%)	C _β max (%)
300	9 à 11	8 à 10	10	9
77	7 à 9	6 à 8	8	7

Tableau 5: Valeurs expérimentales du contraste de cathodoluminescence des α et β en fonction de la température à 30 keV pour un dopage $N_D = 2.10^{18}$ cm $^{-3}$. La valeur C_{max} correspond au sommet des histogrammes représentés ci contre (voir fig 2 et 3).

On peut donc résumer les tendances observées sur les deux échantillons différemment dopés par le tableau 6. Une légère différence de contraste entre les dislocations α et β est observée pour un dopage [Si] $N_D=2.10^{-18}$ cm $^{-3}$ alors qu'elle n'apparaît pas pour un dopage [Si] $N_D=4.10^{-17}$ cm $^{-3}$. En revanche, pour ces deux dopages, la résolution des β est toujours inférieure à celle des α . Les tendances observées sont indépendantes de la température de mesure.

T (K)	4.10 ¹⁷	2.10 ¹⁸
300	$C_{\alpha} = C_{\beta}$	$C_{\alpha} \geqslant C_{\beta}$
77	$W_{\beta} > W_{\alpha}$	$W_{\beta} > W_{\alpha}$

Tableau 6: Comportement expérimental du contraste de cathodoluminescence des dislocations α et β en fonction du dopage et de la température à 30 keV.

II INTERPRETATION

II - 1 Position du problème

Alors que la nature extrinsèque de la recombinaison des porteurs minoritaires aux joints de grains est maintenent bien établie [2 - 6], il n'en est pas de même pour les dislocations où la nature intrinsèque ou extrinsèque n'est pas clairement mise en évidence.

La recombinaison intrinsèque se produit au coeur du défaut quand des niveaux légers ou profonds sont présents dans la bande interdite. Ils sont associés aux liaisons pendantes ou à des reconstructions de coeur ou encore à des imperfections telles que les solitons [7] ou les décrochements [8].

La recombinaison extrinsèque se produit par l'intermédiaire d'impuretés électriquement actives ou de défauts ponctuels qui décorent le coeur du défaut ou qui ont ségrégé autour de lui. Ces impuretés forment des précipités ou ont la forme d'une atmosphère de Cottrell.

Le premier modèle proposé pour l'évaluation de Δ p ($\bf r$), proposé par Donolato, décrit la dislocation comme un cylindre dans lequel la durée de vie des porteurs est réduite par rapport à celle du matériau sans défaut. Cette description aboutit à caractériser l'efficacité de recombinaison de la dislocation par un paramètre phénoménologique appelé la " force " de recombinaison γ au défaut. Mais que la modification apportée par la dislocation à la densité de porteurs soit prise en compte [9] ou non [10] , ce modèle ne décrit que qualitativement la variation du contraste EBIC avec la tension d'accélération des électrons incidents. De plus, il ne peut expliquer correctement les variations du contraste en fonction du courant de faisceau et de la température.

Pour remédier à ces problèmes, un modèle physique de la recombinaison à la dislocation a été proposé par Wilshaw [11]. L'équation de diffusion n'est pas résolue, mais il est tenu compte de la modification de la structure de bande par la dislocation. La recombinaison est limitée :

- par la capture des porteurs minoritaires qui dépend de la charge de la dislocation
- par la capture des porteurs majoritaires au dessus de la barrière de potentiel.

Ce modèle permet de déduire, des variations du contraste avec la température et le courant de faisceau, le niveau d'énergie associé à la dislocation ainsi que la densité d'états. Les simulations en fonction de la

température et du courant de faisceau décrivent parfaitement les observations faites sur les dislocations dans le Silicium. Malheureusement, elles ne sont que qualitatives, car le contraste EBIC est exprimé en fonction du paramètre phénoménologique γ .

Un troisième modèle proposé par Farvacque et Sieber [1] fait l'hypothèse d'une recombinaison intrinsèque à la dislocation. Celle - ci est décrite comme un cylindre déserté en porteurs libres; les porteurs minoritaires qui diffusent jusqu'à sa surface sont instantanément attirés par le champ électrique radial jusqu'à la ligne de dislocation où ils se recombinent avec les porteurs majoritaires. Contrairement aux modèles précédents, il n'y a donc à l'intérieur du cylindre, aucune diffusion des porteurs minoritaires. De plus, il est tenu compte de la modification apportée par la dislocation à la densité de porteurs en excès. L'efficacité de recombinaison à la dislocation est symbolisée par le rayon R de la zone d'écran, dont la valeur est déduite du niveau de la dislocation et de la densité de porteurs libres.

Nous avons adapté ce modèle, développé en EBIC [1] , au contraste de cathodoluminescence des dislocations, afin de proposer un mécanisme de recombinaison à la dislocation pour nos homojonctions GaAs / GaAs / GaAs.

II - 2 Théorie du contraste de cathodoluminescence d'une dislocation perpendiculaire à la surface

Nous avons établi un modèle physique de contraste de cathodoluminescence associé à la charge de la dislocation; celle - ci est perpendiculaire à la surface. Le contraste de cathodoluminescence d'une dislocation peut s'exprimer par (cf chap II):

$$C = \frac{\delta I_{CL}}{I_{CL_0}}$$
 (1)

 I_{CL_0} étant l'intensité de cathodoluminescence loin du défaut et δI_{CL} la variation de cette intensité dûe au mécanisme de recombinaison sur la dislocation.

$$I_{CL_o} = \frac{\tau}{\tau_r} \int_{V} A(z) \Delta p_o(r) d^3r \qquad (2)$$

La connaissance de I_{CL_o} et de δI_{CL} nécessite donc la résolution de l'équation de continuité (cf chap II). Loin du défaut, celle ci s'écrit :

$$\Delta \cdot \Delta p_o(r) = \frac{\Delta p_o(r)}{L^2} - \frac{g(r)}{D}$$
 (3)

Cette équation peut être résolue en utilisant le formalisme des fonctions de Green χ (\mathbf{r} , \mathbf{r} ') :

$$\Delta p_o(r) = \int_V \chi(r,r') \frac{g(r')}{D} d^3r' \qquad (4)$$

V étant le volume semi-infini de l'échantillon.

I CL, devient donc :

$$I_{CL_o} = \frac{\tau}{\tau_r} \int_{V} \rho(z) \frac{g(r')}{D} d^3r' \qquad (5)$$

avec

$$\rho(z) = \int_{V} A(z) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r'}) d^{3}\mathbf{r}$$
 (6)

La forme de la fonction χ (r , r') est obtenue par la méthode des images et son expression dans le cas d'une recombinaison infinie à la surface est [12] :

$$\chi(r,r') = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\exp[-|r-r'|/L]}{|r-r'|} - \frac{\exp[-|r-r''|/L]}{|r-r''|} \right) (7)$$

 \bm{r} ' et \bm{r} " sont respectivement les coordonnées du point source et de son image par rapport à la surface. Le calcul de la fonction ρ (z) aboutit finalement à l'expression :

$$\rho(z) = \int_{0}^{\theta_{c}} \frac{\exp(-\beta z) - \exp(-z/L)}{1 - L^{2} \beta^{2}} L^{2} \sin \theta d\theta$$
 (8)

$$\beta = \frac{\alpha}{\cos \theta}$$
 et α : coefficient d'absorption

Les calculs en EBIC et en cathodoluminescence sont pratiquement les mêmes mis à part le fait que la fonction ρ (z) en cathodoluminescence remplace la fonction exp (-z/L) en EBIC [1].

Pour tenir compte de la recombinaison à la dislocation, on introduit dans l'équation de diffusion un champ électrique de dislocation $\mathbf{E}(\mathbf{r})$:

D div. grad
$$\Delta p(\mathbf{r}) = \frac{\Delta p(\mathbf{r})}{\tau} - g(\mathbf{r}) + \frac{1}{e} \operatorname{div}[\sigma \mathbf{E}(\mathbf{r})]$$
 (9)

Comme précédemment, nous pouvons résoudre l'équation (9) à l'aide des fonctions de Green χ (\mathbf{r} , \mathbf{r} ') en remplaçant \mathbf{g} (\mathbf{r}) / D par

$$\frac{g(r)}{D} - \frac{1}{eD} \operatorname{div} [\sigma E(r)]$$
 (10)

On obtient:

$$\Delta p(\mathbf{r}) = \frac{1}{D} \int_{V} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(g(\mathbf{r}') - \frac{1}{e} \operatorname{div} [\sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}')] \right) d^{3}\mathbf{r}' (11)$$

On voit donc que l'on peut exprimer $\delta 1_{Cl}$ par :

$$\delta I_{CL} = \frac{\tau}{\tau_r D e} \int_{V} \rho (z) \operatorname{div} [\sigma E(r)] d^3 r \qquad (12)$$

Le champ électrique n'existe qu'à l'intérieur du cylindre de recombinaison de la dislocation de rayon R et de volume V_d . On peut donc écrire:

$$\delta I_{CL} = \frac{\tau}{\tau_r D e} \int_{V_d} \rho(z) \operatorname{div}[\sigma E(r)] d^3r \qquad (13)$$

La densité de porteurs minoritaires en excès peut s'écrire en présence de la dislocation :

$$\Delta p(r) = \Delta p_o(r) + \delta p(r)$$
 (14)

 Δ p $_{o}$ (\mathbf{r}) est la densité de porteurs en absence de défaut (solution de l'équation de continuité (3)) et δ p (\mathbf{r}) est la modification apportée par le défaut à Δ p $_{o}$ (\mathbf{r}).

L'équation (9) nous permet d'écrire :

div [
$$\sigma$$
 E(r)] = e $\left\{ \text{D div grad} \left[\delta p(r) \right] - \frac{\Delta p(r)}{\tau} + \frac{\Delta p_o(r)}{\tau} \right\}$ (15)
D'après (13):

$$\delta I_{CL} = \frac{1}{\tau_r D} \int_{V_d} \rho(z) \left[\Delta \rho_o(r) - \Delta \rho(r) \right] d^3 r$$

$$+ \frac{\tau}{\tau_r} \int_{V_d} \rho(z) \text{ div } \text{grad } \left[\delta \rho(r) \right] d^3 r$$
(16)

Or

$$\rho (z) \text{ div } \operatorname{grad} [\delta p(r)] = \operatorname{div} [\rho (z) \operatorname{grad} \delta p(r)]$$

$$- \operatorname{grad} \delta p(r) \operatorname{grad} \rho (z)$$

$$(17)$$

De plus, la conservation du courant électrique total à l'intérieur et à l'extérieur du cylindre de la dislocation nous permet d'utiliser le théorème d'Ostrogradsky. On obtient donc pour δ l $_{\rm Cl}$:

$$\delta I_{CL} = \frac{1}{\tau_r} \int_{V_d} \rho(z) [\Delta p_o(r) - \Delta p(r)] d^3 r$$

$$+ \frac{\tau}{\tau_r} \int_{S_d} \rho(z) \operatorname{grad} \delta p(r) dS \qquad (18)$$

$$+ \frac{\tau}{\tau_r} \int_{D_e} \operatorname{grad} \rho(z) \delta j_d d^3 r$$

 S_d représente la surface de la dislocation où la vitesse de recombinaison y est considérée comme infinie. Tout porteur minoritaire atteignant cette surface est immédiatement recombiné sur la ligne chargée de la dislocation ($V_{S_d} = + \infty$). Dans le cylindre de la dislocation les termes Δ p (\mathbf{r}) et δ \mathbf{j} \mathbf{d} (\mathbf{r}) sont donc nuls. On obtient finalement pour δ I $_{CL}$:

$$\delta I_{CL} = \frac{1}{\tau_r D} \int_{V_d} \rho(z) \Delta \rho_o(r) d^3 r + \frac{\tau}{\tau_r} \int_{S_d} \rho(z) \operatorname{grad} \delta \rho(r) dS$$
(19)

$$\delta I_{CL} = \delta I_{CL_1} + \delta I_{CL_2}$$
 (20)

Le terme δI_{CL_1} est équivalent à celui donné par Donolato [9] mais sans l'introduction de force au défaut. Le terme δI_{CL_2} provient de la modification apportée par le défaut à la densité de porteurs minoritaires en excès.

Le calcul des termes δI_{CL_1} et δI_{CL_2} est reporté dans l'annexe III.

Nous appellerons C_1 le terme correspondant à δI_{CL_1} :

$$C_1 = \frac{\delta I_{CL_1}}{I_{CL_2}} \tag{21}$$

		300 K		77 K		
E _d (eV)	R (Å)	n _t D	V _o (V)	Ŗ (A)	$\frac{n_t}{D}$	V _o (V)
0,1	343	0,59	-1,4	347	0,60	- 1,44
0,2	331	0,55	-1,3	336	0,57	-1,33
0,4	308	0,47	-1,1	312	0,49	-1,13
0,6	281	0,4	-0,9	285	0,41	-0,93
0,8	251	0,32	-0,69	256	0,33	-0,72

<u>Tableau 7</u>: Valeurs du rayon R d'une dislocation, de sa charge n_t / D et du potentiel en son coeur données par le modèle de Read pour un dopage N_D =4.10¹⁷ cm⁻³ à 300K et 77 K.

		300 K		77 K		
E _d	R (A)	n _t	V _o (V)	R (A)	$\frac{n_t}{D}$	V _o (V)
0,1	170	0,73	-1,42	171	0,74	-1,44
0,2	165	0,68	-1,32	166	0,69	-1,34
0,4	154	0,59	-1,12	154	0,60	-1,14
0,6	141	0,50	-0,92	142	0,51	-0,93
0,8	127	0,40	-0,72	127	0,41	-0,73

<u>Tableau 8</u>: Valeurs du rayon R d'une dislocation, de sa charge n_{t} / D et du potentiel en son coeur données par le modèle de Read pour un dopage N_{D} =2.10¹⁸ cm⁻³ à 300K et 77 K.

et C_2 le terme correspondant à δI_{CL_2} :

$$C_2 = \frac{\delta I_{CL_2}}{I_{CL_0}} \tag{22}$$

II - 3 Calcul du rayon R de la dislocation

Les valeurs de contraste obtenues expérimentalement doivent nous permettre de déterminer des valeurs de rayons R de dislocations puis, grâce au modèle développé par Read, en déduire la position $E_{\rm d}$ en énergie par rapport à la bande de valence (choisie comme origine) du niveau associé à la dislocation. En effet, d'après le modèle de Read on peut écrire :

$$W(n_t) = \frac{n_t e^2}{2 \pi \epsilon_0 \epsilon_r Db} \left[ln(\frac{R}{b}) - 0,866 \right]$$
 (23)

- n_t est la densité volumique de porteurs en excès captés par la ligne de dislocation.
- W (n t) est la dérivée par rapport à n t de l'augmentation d'énergie électrostatique d'interaction appelée " déplacement rigide "(figure 5).
- D est le nombre total de sites sur la dislocation par unité de volume.
- b est l'espacement entre deux états voisins.

R est donné par la condition de neutralité :

$$\pi R^2 N_D = \frac{n_t}{D b} = f$$
 (24)

D'où

$$R = \sqrt{\frac{f}{\pi N_D}}$$
 (25)

f est le taux d'occupation de la dislocation.

Les rayons calculés par le modèle de Read à 300K et 77K sont reportés dans les tableaux 7 et 8 pour les deux dopages en Silicium étudiés

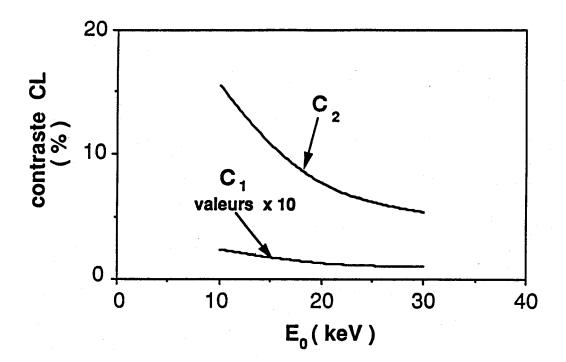


Figure 6 : Courbes théoriques des termes de contraste de cathodo - luminescence C_1 et C_2 en fonction de la tension d'accélération E_o pour les paramètres suivants : $R = 500 \text{ A} \; ; L = 0,25 \; \mu\text{m} \; \text{ et } \; \alpha = 2.10^4 \; \text{cm}^{-1}.$

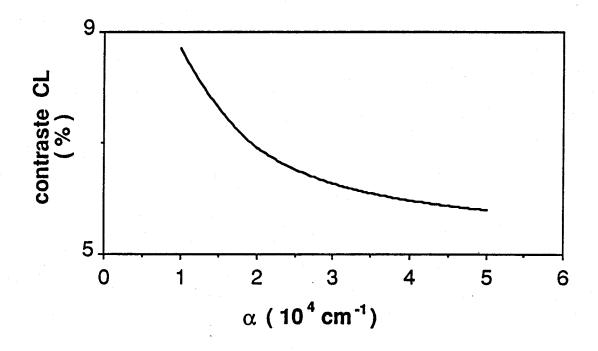


Figure 7 : Courbe théorique $C = f(\alpha)$ à $E_o = 30$ keV avec : R = 850 A et L = 0,25 μm .

potentiel d'écrantage au coeur de la dislocation V_o sont également indiqués. Dans le cas de forts dopages, le niveau de Fermi, et donc l'état de charge varie peu avec la température [13].

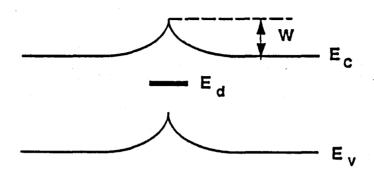


Figure 5 : Décalage des bandes d'énergie au voisinage d'une dislocation.

II - 4 Courbes théoriques

Les courbes théoriques de contraste d'une dislocation perpendiculaire à la surface ont été tracées en fonction :

- des paramètres α et L de l'échantillon
- du rayon R de la dislocation
- de la tension d'accélération E_o des électrons incidents.

Les courbes sont calculées à puissance constante $P = E_o$. $I_{b_o} = 10^{-6} W$.

Dans tous les cas de figure et quelles que soit les valeurs des paramètres, le terme C_2 est toujours nettement supérieur au terme C_1 et il contribue très largement à la valeur totale du contraste. Celà est vérifié dans le cas du contraste de cathodoluminescence (figure 6) mais également dans le cas du contraste EBIC.

La figure 7 montre l'influence du coefficient d'absorption α sur le contraste de cathodoluminescence de la dislocation à L et R constants et pour une tension d'accélération E_o = 30 keV. La même allure est obtenue pour des valeurs de L, R et E_o différentes; le contraste augmente quand le coefficient d'absorption augmente. L'influence de la longueur de diffusion L sur le contraste

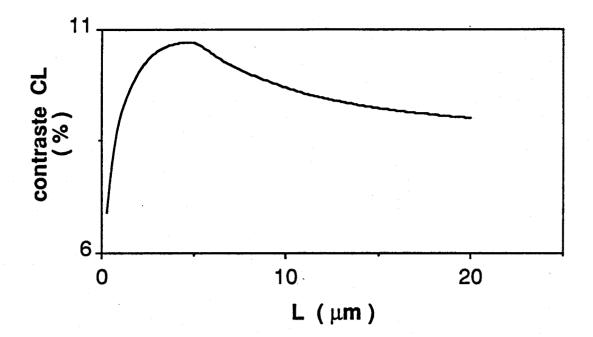


Figure 8 : Courbe théorique C = f (L) à E_o = 30 keV avec : R = 850 A et α = 10 ⁴ cm ⁻¹

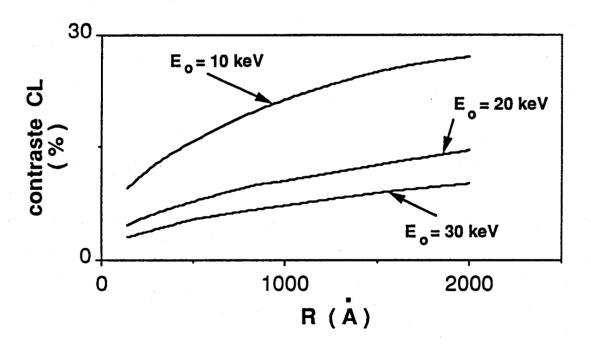


Figure 9 : Courbes théoriques C = f (R) à E_o = 10 , 20 et 30 keV avec les paramètres : L = 0,25 μ m et α = 2. 10 4 cm $^{-1}$.

à R, α et E_o constants est représentée sur la figure 8. La courbe passe par un maximum dont la position varie suivant les paramètres utilisés.

L'influence du rayon R de la dislocation sur le contraste de cathodoluminescence est représentée sur la figure 9 à L et α constants et pour E_o = 10 , 20 et 30 keV. Le contraste augmente avec le rayon de la dislocation.

Nous avons également tracé les courbes de contraste de cathodoluminescence en fonction de la tension E_o pour différentes valeurs du rayon R de la dislocation, dans les conditions expérimentales que nous avons rencontrées (L=0,25 μ m et α = 2.10 4 cm⁻¹) (figure 10). En effet, dans le modèle exposé ci - dessus, l'efficacité de recombinaison de la dislocation est représentée par la valeur du rayon R du cylindre.

Nous avons vu dans le chapitre I (§ 4) que la dislocation de type α avait un niveau d'énergie dans le gap situé à 0,2 eV au dessus de la bande de valence alors que la dislocation de type ß devait avoir un niveau situé vers le milieu de la bande interdite (0,4 $\,$ - 0,6 eV). Ceci est confirmé par des études de contraste EBIC [14] . Les valeurs des rayons correspondant sont (tableaux 7 et 8)

- pour la dislocation α à 300 K :

 $R_{\alpha} \cong 340 \text{ A}$ pour un dopage $N_D = 4.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ $R_{\alpha} \cong 165 \text{ A}$ pour un dopage $N_D = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$

- pour la dislocation ß:

 $R_{B} \cong 280 \text{ A}$ pour un dopage $N_{D} = 4.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ $R_{B} \cong 140 \text{ A}$ pour un dopage $N_{D} = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$

D'après les courbes théoriques (cf figure 10), ces rayons donneraient des valeurs de contraste à 30 keV comprises entre 3 et 5 % . Ces valeurs sont nettement inférieures à celles obtenues expérimentalement (9 à 10 %), et ceci est vérifié à toute tension d'accélération $E_{\rm o}$.

On peut calculer les rayons des dislocations α et β ($R_{1\alpha}$ et $R_{1\beta}$ respectivement) qui correspondraient à nos valeurs expérimentales de contraste. A 30 keV et 300 K, on obtient :

pour l'homojonction dopée $N_D = 4.10^{17} cm^{-3}$: 1500 A $\leq R_{1_{\alpha}}$, $R_{1_{\dot{B}}} \leq$ 2500 A

Pour l'homojonction dopée $N_D = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$:

900 A \leq R_{1 α} \leq 1500 A et 600 A \leq R_{1 β} \leq 900 A

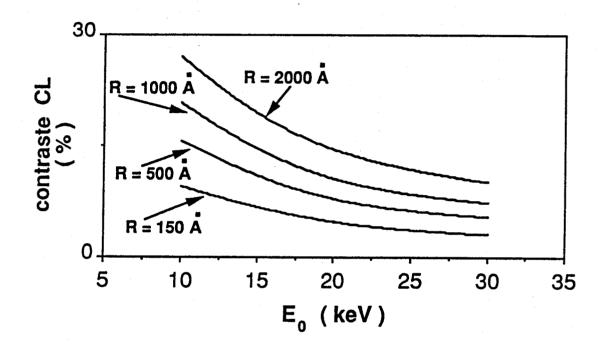


Figure 10 : Courbes théoriques C = f (E_o) en fonction de R , avec les paramètres : $L = 0.25 \, \mu m$ et $\alpha = 2.10 \, ^4 \, cm^{-1}$.

Ces valeurs de rayon ne peuvent donc correspondre à une recombinaison des porteurs par le champ électrostatique associé à la ligne chargée.

III DISCUSSION

L'extension du champ électrique de la zone d'écran associée à la ligne chargée est trop faible pour justifier les contrastes expérimentaux des dislocations dans les échantillons dopés 4.10¹⁷ et 2.10¹⁸ cm⁻³. Or, des expériences récentes de contraste EBIC sur des dislocations introduites dans les mêmes conditions dans des échantillons dopés 5. 10¹⁶ cm⁻³, ont montré que la recombinaison des porteurs de charge a lieu dans cette zone d'écran [14].

Une recombinaison des porteurs via les impuretés segrégées autour de la dislocation est envisageable dans nos échantillons, d'autant plus que leur présence dans le voisinage des dislocations est tout à fait notable (figure 2). Ceci signifie que si seul ce champ électrique associé à la ligne chargée est considéré, la recombinaison des porteurs passe progressivement d'une nature intrinsèque à extrinsèque, lorsque le dopage augmente. Un calcul élémentaire montre qu'il faut en effet une densité réaliste d'impuretés si l'on admet que celles ci sont réparties dans un cylindre dont le rayon est de l'ordre de grandeur de la longueur de Debye - Hückel [15]. Cependant, si l'on rapporte ce nombre d'impuretés à l'extension du nuage de Cottrell qui est de l'ordre de quelques distances atomiques, cette densité devient complètement irréaliste. Par conséquent, même si la recombinaison via les impuretés reste un mécanisme possible, celui ci ne peut expliquer à lui seul l'ordre de grandeur des contrastes expérimentaux.

Un mécanisme de recombinaison intrinsèque doit nécessairement être envisagé, même si une participation des impuretés ne peut être tout à fait exclue. Dans le modèle de contraste proposé dans le § II - 2, seule l'extension du champ électrique associé à la ligne de dislocation est considéré pour évaluer la zone de capture des porteurs minoritaires. Lorsque le dopage augmente, la largeur de cette zone diminue et conduit à des contrastes trop faibles par rapport aux valeurs observées expérimentalement. En fait, les dislocations créent d'autres champs électriques que celui associé à la ligne chargée. Dans le cas des composés III - V, ces champs proviennent du couplage piézoélectrique et du potentiel de déformation.

En effet, dans un cristal quelconque, l'application d'une contrainte entraîne une déformation des ions. Du fait du caractère composé des semiconducteurs

III - V , il en résulte une polarisation induite à laquelle est associé un potentiel piézoélectrique. De plus, les variations locales des paramètres du réseau dans le matériau déformé entraînent l'existence d'un potentiel de déformation qui résulte des champs de déformation hétérogènes dans le cristal [16 , 17]. Ces champs se superposent au champ créé par la ligne de charge de la dislocation. Ce dernier peut s'exprimer par (modèle de Read) :

$$E_{Read}(r) = \frac{N_d e}{\epsilon_0 \epsilon_1} \left(\frac{R}{r} - 1 \right)$$
 (26)

R est le rayon d'écran donné par l'équation (25).

L'expression du champ piézoélectrique E (r, θ) est la suivante [18]:

$$E_{pi\acute{e}zo}(r,\theta) = \frac{A}{4\pi^{2}} \left\{ f_{4}(\theta) . I_{4}(\frac{r}{\lambda_{G}}) + f_{2}(\theta) . I_{2}(\frac{r}{\lambda_{G}}) \right\} . \frac{1}{r}$$
(27)

avec:

$$f_4(\theta) = \frac{1}{4} \sin(4\theta) + \frac{5}{4\sqrt{2}} \cos(4\theta)$$
 (28)

$$f_2(\theta) = \frac{1-2\nu}{2} \sin(2\theta) + \frac{1+\nu}{\sqrt{2}} \cos(2\theta)$$
 (29)

$$A = \frac{2 \pi b_c e_{14}}{\varepsilon_o \varepsilon_L \sqrt{6} (1 - v)}$$
 (30)

 θ est l'angle que fait le champ avec la ligne de dislocation

 λ_G est la longueur d'écrantage de Debye - Hückel

 b_c est la composante coin du vecteur de Burgers

v est le coefficient de Poisson

e 14 est la constante piézoélectrique du matériau (=0,16 pour GaAs).

Les fonctions I_i , calculées numériquement, peuvent être approximées par des fonctions de la forme [18]:

$$I_{i}\left(\frac{r}{\lambda_{G}}\right) = \frac{1}{1+a_{i}\left(\frac{r}{\lambda_{G}}\right)+b_{i}\left(\frac{r}{\lambda_{G}}\right)^{2}}$$
(31)

$$a_2 = 0.04$$
; $b_2 = 0.2$; $a_4 = 0.01$; $b_4 = 0.064$

De même, le champ $E_{d\acute{e}f}$ (r) associé au potentiel de déformation peut s'exprimer par [18] :

$$E_{déf}(r) = \frac{B}{4\pi^2} \sin(\theta) \cdot I\left(\frac{r}{\lambda_G}\right)$$
 (32)

avec :

$$B = \frac{Z e N b_c (1-2v)}{4\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_1 (1-v)}$$
 (33)

Z est le nombre d'électrons de valence (en pratique, on prend Z = 4). N est le nombre total d'atomes.

I, calculé numériquement, peut être approximé par :

$$I\left(\frac{r}{\lambda_G}\right) = \frac{1}{a+b\left(\frac{r}{\lambda_G}\right)+c\left(\frac{r}{\lambda_G}\right)^2}$$
 (34)

$$a = 1.03$$
; $b = 0.283$; $c = 0.72$

Ces deux derniers champs possèdent les propriétés suivantes :

- ils ont généralement une amplitude plus faible que le champ coulombien associé à la charge de la dislocation.
- bien que ces champs soient, comme dans le cas du champ de la ligne chargée, écrantés par les porteurs libres, leurs extensions suivent directement l'extension

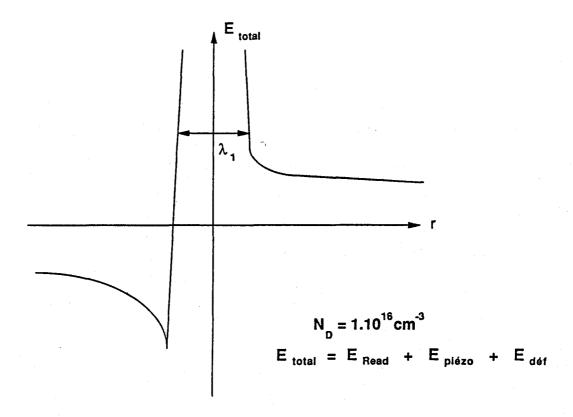


Figure 11: Allure du champ total en fonction de la distance r par rapport à la ligne de dislocation pour un dopage $N_D=1.10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$. $\theta=90\,^{\circ}$. La largeur de barrière λ_1 est grande et le champ coulombien (E_{Read}) réduit l'efficacité de recombinaison des champs associés au champ de déformation .

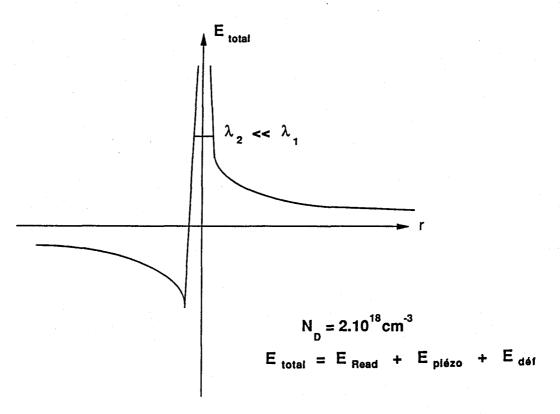


Figure 12 : Allure du champ total en fonction de la distance r par rapport à la ligne de dislocation pour un dopage $N_D=2.10^{18}$ cm⁻³. $\theta=90$ ° La largeur de barrière λ_2 est beaucoup plus petite que λ_1 ce qui rend possible l'effet tunnel . L'efficacité de recombinaison de la dislocation augmente quand le dopage augmente.

du champ de déformation élastique, et sont ainsi quasiment indépendantes de l'efficacité d'écran.

- leur signe dépend de la position angulaire (θ) autour de la ligne de dislocation. Les potentiels qu'ils induisent sont donc alternativement positifs et négatifs et donc globalement attractifs pour les électrons et pour les trous.

Si seuls ces champs existaient, les dislocations attireraient efficacement les paires électron - trou et devraient donc être des centres de recombinaison efficaces. En fait, cette efficacité est compensée par l'existence du champ coulombien de symétrie cylindrique, répulsif pour les porteurs majoritaires. Comme le montre la figure 11 obtenue pour un dopage $N_D=1.10^{16}\ cm^{-3}$, le champ total est toujours répulsif sur une distance égale à la zone d'écran spécifique à la ligne chargée (rayon de Read). Si, en dehors de cette zone d'écran, les champs associés à l'effet piézoélectrique et au potentiel de déformation attirent les paires électron - trou, celles - ci ne peuvent se recombiner que si les porteurs majoritaires franchissent thermiquement la barrière répulsive. Dans ce cas, les champs associés au champ de déformation de la dislocation peuvent être négligés, ce qui justifie l'utilisation du modèle donné dans le paragraphe II - 2.

Cependant, lorsque le dopage augmente, la largeur de cette barrière devient extrêmement faible (figure 12) et peut progressivement être franchie par effet tunnel, ce qui augmente l'efficacité de recombinaison de la dislocation. Dans ce cas, la zone de capture efficace des porteurs minoritaires tend progressivement vers la zone d'extension des champs associés au champ de déformation de la dislocation. Un ordre de grandeur de la portée de capture de ces champs est obtenu en admettant qu'ils sont efficaces jusqu'au dixième de leur valeur maximale. Les calculs numériques conduisent, dans ce cas, à des portées de capture de l'ordre de 1000 à 2000 A, valeurs requises pour justifier les contrastes observés expérimentalement.

Ce mécanisme intrinsèque suggéré pour la première fois, permet en particulier d'expliquer la différence de résolution observée systématiquement entre les dislocations α et β ($W_{\alpha} < W_{\beta}$).

Pour celà, nous admettons que les dislocations observées sont toutes deux des dislocations parfaites. Ainsi, l'extension de leurs champs électriques, associés à la déformation du réseau, est identique ; la même quantité de porteurs minoritaires devrait ainsi être capturée, et si tous les porteurs étaient recombinés, les résolutions des deux types de dislocations devraient être identiques. Cependant, la recombinaison des porteurs minoritaires est proportionnelle à la probabilité de transition tunnel à travers la barrière de potentiel provoquée par la ligne chargée. Ces barrières sont de l'ordre de grandeur de E_F - E_d . Le niveau E_d de la dislocation α étant plus proche de la bande de valence que celui de la

dislocation ß [14 , 19] , la barrière de potentiel associée à la dislocation α est supérieure à celle de la dislocation ß; par conséquent, la probabilité de transition tunnel est plus grande pour la dislocation ß. Cette dernière peut donc recombiner une plus grande fraction des porteurs minoritaires capturés par la portée des champs associés à la déformation. Par conséquent, la résolution des dislocations ß est plus faible que celle des dislocations α . Notons cependant que ce modèle implique, si seul ce mécanisme intrinsèque est en cause, que le contraste C_{β} doit être supérieur au contraste C_{α} ; ce qui est contraire aux résultats expérimentaux ($C_{\alpha} < C_{\beta}$).

Ainsi, le mécanisme intrinsèque que nous proposons, permet d'expliquer l'ordre de grandeur des contrastes observés ainsi que les différences de résolution des dislocations α et β ; mais il ne permet pas, à lui seul, de comprendre l'origine des différences de contraste entre les deux types de dislocations.

BIBLIOGRAPHIE - CHAPITRE V

- [1] FARVACQUE J.L. and SIEBER B., Rev. Phys. Appl., (Avril 1990).
- [2] BATTISTELA F. and ROCHER A., Semicond. Sci. Technol., 2, 226, (1987).
- [3] ROCHER A., Revue Phys. Appl., 22, 591, (1987).
- [4] MAURICE J.L., Revue Phys. Appl., 22, 613, (1987).
- [5] BARY A. and NOUET G., J. Appl. Phys., 63, 435, (1988).
- [6] CHARI A., de MIERRY P., MENIKH A. and AUCOUTURIER M., Revue Phys. Appl., 22, 655, (1987).
- [7] HEGGIE M.I. and JONES R., J. de Physique C4, 43, (1984).
- [8] HIRSCH P.B., J. de Physique C6, 27, (1979).
- [9] DONOLATO C., Optik, **52**, 19, (1978/79).
- [10] PASEMANN L., Ultramicroscopy, 6, 237, (1981).
- [11] WILSHAW P.R. and BOOKER G.R., Microsc. Semicond. Mater. Conf., Oxford, 329, (1985). Inst. Phys. Conf. Ser. n° 76.
- [12] MORSE P.M. and FESHBACH, Methods of Theoretical Physics, Mc Graw Hill., New York, chapter 7 and 9, (1953).
- [13] OURMAZD A., Crystal Res. and Technol., 16, 137, (1981).
- [14] CARTON P. et SIEBER B., communication personnelle.
- [15] AKAMATSU B., JEAN LOUIS A.M., PAPADOPOULO A.C. and HENOC P., Phys. Stat. Sol. (a), 95, 557, (1986).
- [16] FARVACQUE J.L. and LENGLART P., Phys. Stat. Sol (b), 80, 361, (1977).

- [17] FARVACQUE J.L. and LENGLART P., Phys. Stat. Sol. (b), 80, 433, (1977).
- [18] VIGNAUD D., thèse d'Etat, Université de Lille, (1989).
- [19] FARVACQUE J.L., VIGNAUD D., DEPRAETERE E., SIEBER B. and LEFEBVRE A., Int. Symp. on Struct.Prop. Disloc. Semicond., Oxford, 141, (1989). Inst. Phys. Conf. Ser. n° 104.

CONCLUSION

Au cours de ce travail, nous avons caractérisé, par cathodoluminescence, des couches épitaxiées d'arséniure de gallium, et étudié le contraste des dislocations dans ces couches. Nous avons établi un modèle d'intensité de cathodoluminescence adapté aux couches épitaxiées, permettant de calculer les paramètres physiques que sont les longueurs de diffusion dans les différentes couches ainsi que les vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces. Il faut cependant noter que les paramètres des couches inférieures sont accessibles s'ils sont suffisamment différents de ceux de la couche supérieure et si le rapport $\rm e_1$ / $\rm L_1$ (de l'épaisseur de la couche supérieure sur la longueur de diffusion dans cette même couche) est faible. De plus la méthode n'est applicable qu'aux faibles longueurs de diffusion (L < 1 μm).

Nous avons ainsi pu mettre en évidence, dans des homojonctions GaAs, l'indépendance de la longueur de diffusion avec le dopage et la dépendance de la température de croissance sur la qualité des interfaces.

Nous avons également étudié le contraste de cathodoluminescence de dislocations de croissance et de dislocations α et β fraîchement introduites dans des couches GaAs dopées Silicium $N_D = 4.10^{17}$ et 2.10^{18} cm⁻³. Un modèle physique de contraste associé à la charge de la dislocation ne permet pas d'expliquer nos valeurs expérimentales. Après avoir écarté un mécanisme unique de recombinaison extrinsèque aux dislocations, nous avons considéré, pour la première fois, l'effet des champs électriques associés aux champs de déformation. Dans nos échantillons fortement dopés, la barrière répulsive du champ coulombien a une faible largeur, et l'effet tunnel est alors possible. La zone efficace de capture des porteurs minoritaires est alors étendue à l'extension des champs associés au champ de déformation. L'augmentation de l'efficacité de recombinaison de la dislocation avec le dopage et des portées de capture de l'ordre de 2000 A expliquent les fortes valeurs de contraste de cathodoluminescence obtenues expérimentalement. La différence des hauteurs de barrière de potentiel des dislocations α et β permet d'expliquer les différences expérimentales de résolution. En revanche, ce nouveau modèle de recombinaison ne permet pas, à lui seul, de justifier les différences de contraste observées entre les dislocations α et β . Un calcul théorique d'effet tunnel s'avère donc nécessaire.

Une étude de cathodoluminescence résolue en longueur d'onde devrait nous permettre de déterminer la nature des impuretés ségrégées ainsi que leur

participation aux mécanismes de recombinaison.

Une étude simultanée en cathodoluminescence et en EBIC, techniques complémentaires, permettrait également une meilleure compréhension de ces phénomènes.

La recombinaison à la dislocation est une propriété très locale qui dépend de la présence de crans, de décrochements, de fautes de reconstruction des liaisons pendantes (solitons) sur la ligne. Une corrélation entre la structure cristallographique et les contrastes obtenus en EBIC et en cathodoluminescence sur des lames minces pourrait nous permettre de mieux cerner l'origine physique des niveaux associés aux dislocations.

ANNEXE I

Calcul de
$$\chi_1(k,z,z')$$

On a vu dans le chapitre IV (§ 2) que $\,\chi_{\,_1}$ (k , z , z ') vérifie l'équation :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathbf{K}^2\right) \chi_1(\mathbf{k}, \mathbf{z}, \mathbf{z}') = -\delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}') \tag{1}$$

on prend pour $\chi_{\,_{1}}^{\,}$ (k , z , z ') la forme suivante :

$$\chi_1(k,z,z') = \beta e^{u|z-z'|}$$
(2)

qui devient, après dérivation suivant z :

$$\frac{\partial \chi_1(k,z,z')}{\partial z} = \beta.u.e^{u|z-z'|}.sign(z-z')$$
 (3)

D'où:

$$\frac{\partial^2 \chi_1(k,z,z')}{\partial z^2} = \beta . u^2 . e^{u|z-z'|} . sign^2(z-z')$$

+
$$\beta$$
. u. e $\frac{u \cdot z - z'}{\partial z}$ sign $(z - z')$

Or,

$$\frac{\partial}{\partial z} \operatorname{sign}(z-z') = \\ + \infty \quad \operatorname{Si} \quad z = z'$$

d'où

$$\frac{\partial}{\partial z} \operatorname{sign}(z-z') = 2 \cdot \delta(z-z') \qquad \forall z \qquad (5)$$

(1) devient:

$$\beta$$
. u^2 . $e^{u!z-z'!}$ + 2. β . u . $e^{u!z-z'!}$. δ (z-z') - K^2 . β . $e^{u!z-z'!}$
= - δ (z-z') (6)

On obtient donc le système d'équations suivant :

$$\beta \cdot u^2 = K^2 \cdot \beta \tag{7}$$

$$2.\beta.u = -1 \tag{8}$$

d'après (7): $u = \pm K$

on choisit arbitrairement u = - K

En remplaçant dans (8):

$$\beta = \frac{1}{2 \mathbf{K}} \tag{9}$$

 $\chi_1(k,z,z')$ peut finalement s'écrire :

$$\chi_1(k,z,z') = \frac{1}{2K} e^{-K|z-z'|}$$
 (10)

Annexe II

On a ou dans le chapitre II que l'on pouvait écrire:

$$q(k,z') = 2\pi \frac{a}{65} (1,1+7,13z') \cdot \left\{ \frac{54}{4} e^{-k^2 5_1^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_1^2} + \frac{54}{4} e^{-k^2 5_1^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_2^2} + \frac{54}{4} e^{-k^2 5_2^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_3^2} \right\}$$

$$+ \frac{54}{4} e^{-k^2 5_1^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_2^2} + \frac{54}{4} e^{-k^2 5_2^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_3^2}$$

$$+ \frac{54}{4} e^{-k^2 5_1^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_2^2} + \frac{54}{4} e^{-k^2 5_2^2 / 4} e^{-z'^2 / 5_3^2}$$

De même on a ou que Api s'écrivait:

$$\Delta p_{i}(k,z) = A_{i}e^{k_{i}z} + B_{i}e^{-k_{i}z} + \frac{1}{2k_{i}} \int_{0}^{e_{1}} e^{-k_{i}|z-z'|} q \frac{(k,z')}{D_{i}} dz'$$

QUEC
$$k_1^2 = R^2 + \frac{1}{L_1^2}$$

les 6 conditions aux lumites s'écrivent:

$$+ \Delta \rho_{s}(k,0) = \frac{D_{1}}{v_{s}} \frac{\partial \Delta \rho_{1}}{\partial z} (k,0) \qquad (2)$$

*
$$\Delta P_{1}(k,e_{1}) = \Delta P_{2}(k,e_{1})$$
 (3)

*
$$D_1 = \frac{\Delta \Delta P_1}{\Delta z} (k_1 e_1) = D_2 = \frac{\Delta \Delta P_2}{\Delta z} (k_1 e_1) - v_{5i2} \Delta P_1 (k_1 e_1)$$
 (4)

$$\star \Delta P_2 (k_1 e_2) = \Delta P_3 (k_1 e_2) \tag{5}$$

*
$$\mathcal{D}_{2} = \frac{\Delta \Delta p_{2}}{\Delta z} (k_{1} e_{2}) = \mathcal{D}_{3} = \frac{\Delta \Delta p_{3}}{\Delta z} (k_{1} e_{2}) - v_{23} \Delta p_{2} (k_{1} e_{2})$$
 (6)

$$* \Delta P_3(k,+\infty) = 0 \tag{7}$$

$$\Gamma_{1} = \int_{0}^{e_{1}} q \frac{(k_{1}z')}{D_{1}} e^{-k_{1}z'} dz' \qquad (9)$$

$$\Gamma_2 = \int_{-\infty}^{e_A} q \frac{(k_1 z')}{D_A} e^{k_A z'} dz' \qquad (10)$$

$$\Gamma_{1}' = \int_{0}^{e_{z}} q(k,z') e^{-k_{z}z'} dz' \qquad (11)$$

$$\Gamma_{2}^{\prime} = \int_{e_{1}}^{e_{2}} q(k, z') e^{k_{2}z'} dz'$$
 (12)

$$T_{A}^{"} = \int_{-\infty}^{+\infty} q \frac{(k, z')}{D_{3}} e^{-k_{3}z'} dz' \qquad (13)$$

$$\Gamma_{2}^{"} = \int_{e_{3}}^{+\infty} q(\frac{k_{1}z'}{D_{3}}) e^{k_{3}z'} dz' \qquad (14)$$

des équations (2) à (7) devienment

$$A_{1}(1-8_{0}k_{1})+B_{1}(1+8_{0}k_{1})=\frac{\Gamma_{1}}{2}\left(8_{0}-\frac{1}{k_{1}}\right) \tag{15}$$

$$A_{1}e^{k_{1}e_{1}} + B_{1}e^{-k_{1}e_{1}} = A_{2}e^{k_{2}e_{2}} + B_{2}e^{-k_{2}e_{1}} - \frac{r_{2}}{2k_{1}}e^{-k_{1}e_{1}} + \frac{r_{1}'}{2k_{1}}e^{k_{2}e_{1}}$$

$$+ \frac{r_{1}'}{2k_{1}}e^{k_{2}e_{1}}$$

$$(16)$$

-
$$A_1 e^{k_1 e_1} (8_1 k_1 + 1) + B_1 e^{-k_1 e_1} (1 - 8_1 k_1) = A_2 e^{k_2 e_1} 8_2 k_2$$

- $B_2 e^{-k_2 e_1} 8_2 k_2 - \frac{M_2}{2 k_1} e^{-k_1 e_1} + \frac{M_1'}{2} 8_2 e^{k_2 e_1} + \frac{M_2 8_1}{2} e^{-k_1 e_1}$ (17)

•
$$A_3 e^{k_3 \omega} + B_3 e^{-k_3 \omega} + \frac{1}{2k_3} \int_{e_2}^{+\infty} e^{-k_3 |z-z'|} q \frac{(k_1 z')}{D_3} dz' = 0$$
 (20)

Calculons d'absord A, et B, enz fonction de Az et Bz. D'apries (16) et (17):

$$\begin{cases} A_{1} e^{k_{1}e_{1}} + B_{1}e^{-k_{1}e_{1}} = A_{2}e^{k_{2}e_{1}} + B_{2}e^{-k_{2}e_{1}} \frac{\Gamma_{2}}{2k_{1}}e^{-k_{1}e_{1}} + \frac{\mu_{1}'}{2k_{2}}e^{k_{2}e_{1}} \\ A_{1}e^{k_{1}e_{1}} (\lambda_{1}k_{1}+\lambda) + B_{1}e^{-k_{1}e_{1}} (\lambda_{1}-\lambda_{1}k_{1}) = A_{2}e^{k_{2}e_{1}}\lambda_{2}e^{k_{2}} - B_{2}e^{-k_{2}e_{1}}\lambda_{2}k_{2} \\ -\frac{\Gamma_{2}}{2k_{1}}e^{-k_{1}e_{1}} + \frac{\Gamma_{1}'}{2}\lambda_{2}e^{k_{2}e_{1}} + \frac{\Gamma_{2}'}{2}\lambda_{2}e^{k_{2}e_{1}} + \frac{\Gamma_{2}'}{2}\lambda_{2}e^{k_{2}e_{1}} \end{cases}$$

$$A_{1}A_{1} = A_{2}e^{(k_{2}-k_{1})e_{1}}(1-8_{1}k_{1}-8_{2}k_{2}) + B_{2}e^{-(k_{1}+k_{2})e_{1}}(1-8_{1}k_{1}+8_{2}k_{2})$$

$$+ \frac{K_{1}^{\prime}}{2k_{2}}e^{(k_{2}-k_{1})e_{1}}(-k_{2}8_{2}+1-k_{1}8_{1})$$

$$\Delta_{1}B_{1} = A_{2}e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}}(k_{2}Y_{2}-1-k_{1}Y_{1}) + B_{2}e^{(k_{1}-k_{2})e_{2}}(-k_{2}Y_{2}-k_{1}Y_{1}-1)$$

$$+ \int_{2}^{1}Y_{1} + \frac{\int_{2}^{1}K_{2}}{2k_{2}}e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}}(k_{2}Y_{2}-K_{1}Y_{1}-1)$$

De même

$$\Delta_{2}A_{2} = A_{3}e^{(k_{3}-k_{2})e_{2}}(1-8_{3}k_{2}-k_{3})+B_{3}e^{-(k_{2}+k_{3})e_{2}}(1-8_{3}k_{2}+k_{3})e_{4}$$

$$+\frac{\Gamma_{1}^{"}}{2k_{3}}e^{(k_{3}-k_{2})e_{2}}(1-k_{2})e_{2}(1-k_{2})e_{3}e^{-(k_{2}+k_{3})e_{2}}$$

$$\Delta_{2}B_{2} = A_{3}e^{(k_{2}+k_{3})e_{2}}(k_{3}x_{4}-k_{2}x_{3}-1) + B_{3}e^{(k_{2}-k_{3})e_{2}}(-k_{3}x_{4}-k_{2}x_{3}-1) + \frac{\Gamma_{1}''}{2k_{3}}e^{(k_{2}+k_{3})e_{2}}(k_{3}x_{4}-k_{2}x_{3}-1)(\Gamma_{2}''x_{3})$$

Donc, de l'équation (15), on peut exprimer A1

=>
$$A_1 = \frac{1}{(1-80k_1)} \left[\frac{r_1}{2k_1} (k_1 + k_0 - 1) - r_2 (k_1 + k_0 + 1) \right]$$

On peut donc écrire :

$$A_1 = -\frac{\mu_2}{\mu_A} B_1 - \frac{\mu_A}{2\kappa_A} \tag{21}$$

$$A_{1} = \frac{1}{\Delta_{1}} \left[A_{2} V_{1} e^{(k_{2}-k_{1})} e_{1} + \beta_{2} V_{2} e^{(k_{1}+k_{2})} e_{1} + \frac{M_{1}}{2k_{2}} V_{1} e^{(k_{2}-k_{1})} e_{1} \right]$$
 (22)

$$\beta_{1} = \frac{1}{\Delta_{1}} \left[A_{2} V_{3} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} - \beta_{2} V_{4} e^{(k_{1}-k_{2})e_{2}} + \Gamma_{2}^{1} V_{1} + \frac{\Gamma_{1}^{\prime}}{2k_{2}} V_{3} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} \right] (23)$$

$$A_{2} = \frac{1}{\Delta_{2}} \left[A_{3} W_{4} e^{(k_{3}-k_{2})e_{2}} + B_{3} W_{2} e^{-(k_{2}+k_{3})e_{2}} + \frac{\mu_{4}^{"}}{2 k_{3}} W_{4} e^{(k_{3}-k_{2})e_{2}} \right]$$
 (24)

$$B_{2} = \frac{1}{4} \left[A_{3} W_{4} e^{(k_{2}+k_{3})e_{2}} - B_{3} W_{3} e^{(k_{2}-k_{3})e_{2}} + \frac{1}{2} v_{3} + \frac{1}{2} v_{3} + \frac{1}{2} v_{4} e^{(k_{2}+k_{3})e_{2}} \right]$$
 (25)

$$A_3 = 0 \tag{26}$$

En expromant les valeurs de A, et B, données dans (22) et (23), et en les remplaçant dans (21) on trouve:

$$= -\frac{\mu_{2}}{\mu_{1}} \int_{\Lambda} \left[A_{2} V_{3} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} - B_{2} V_{4} e^{(k_{1}-k_{2})e_{2}} + \frac{\mu_{1}}{2k_{2}} V_{3} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} \right] - \frac{\mu_{1}}{2k_{1}}$$

$$A_{2} \left[\frac{V_{A}}{\Delta_{1}} e^{(k_{2}-k_{1})e_{1}} + \frac{u_{2}V_{3}}{u_{1}\Delta_{1}} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} \right] = B_{2} \left[\frac{u_{2}V_{4}}{u_{1}\Delta_{1}} e^{(k_{1}-k_{2})e_{2}} + \frac{V_{2}}{u_{1}\Delta_{1}} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} \right] - \frac{V_{1}}{2k_{2}\Delta_{1}} V_{1} e^{(k_{2}-k_{1})e_{1}} - \frac{u_{2}}{u_{1}\Delta_{1}} \frac{V_{1}V_{2}}{u_{1}\Delta_{1}} e^{(k_{1}+k_{2})e_{1}} \right]$$

$$u_{2}V_{3} \qquad M' \quad (k_{1}+k_{2})e_{1} \quad M'_{2} \quad M'_{3} \quad M'_{4} \quad$$

On pose:

MM_A =
$$\frac{\sqrt{4}}{\Delta_{A}} e^{(k_{2}-k_{4})}e_{A} + \frac{M_{2}\sqrt{3}}{M_{4}\Delta_{A}} e^{(k_{1}+k_{2})}e_{A}$$

MM_A = $\frac{\sqrt{4}}{4A\Delta_{A}} e^{(k_{2}-k_{4})}e_{A} + \frac{M_{2}\sqrt{3}}{M_{4}\Delta_{A}} e^{-(k_{1}+k_{2})}e_{A}$

MM₃ = $\frac{\sqrt{4}}{2k_{2}\Delta_{A}} e^{(k_{2}-k_{4})}e_{A} + \frac{M_{2}\sqrt{3}}{2k_{2}M_{4}\Delta_{A}} e^{-(k_{1}+k_{2})}e_{A}$

MM₄ = $\frac{M_{2}\sqrt{4}}{M_{4}\Delta_{A}}$

MM₅ = $\frac{A}{2k_{A}}$

d'où $A_{2} = \frac{A}{4M_{4}} (BM_{2} - \frac{1}{4}M_{4}M_{3} - 4M_{4}\frac{1}{4} - 4M_{5}\frac{1}{4})$
 $A_{2} = B_{3}\frac{M_{2}}{\Delta_{2}} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2} + \frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{M_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{M_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{M_{4}}{\Delta_{2}} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2}$

$$B_{3} = -B_{3}\frac{M_{3}}{\Delta_{2}} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2} + \frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{1}{4}\frac{M_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{M_{4}}{\Delta_{2}} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2}$$

où M_{2} , M_{3} bont dormes part les expressions (28)

$$B_{3} = \frac{\Delta_{2}}{M_{2}} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2} \left[A_{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{4}\frac{M_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{1}{4}\frac{1}{2}\frac{1}{4}\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} e^{-(k_{2}+k_{3})}e_{2} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\frac{1}{$$

$$A_{2} = \frac{1}{1 + \frac{u u_{2}}{u u_{1}} \frac{w_{3}}{w_{2}}} e^{2k_{2}e_{2}} \left[\frac{1}{2} \frac{u u_{2}}{u u_{1}} \frac{y_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{u u_{2}}{u u_{1}} \frac{1}{2k_{3}} \left(\frac{w_{1}w_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{w_{4}}{\omega_{2}} + \frac{w_{4}}{\Delta_{2}} \right) e^{(k_{2} + k_{3})e_{2}} - \frac{1}{2} \frac{u u_{3}}{u u_{1}} - \frac{u u_{5}}{u u_{1}} \frac{1}{2k_{3}} \left[\frac{w_{1}w_{3}}{\Delta_{2}} + \frac{w_{4}}{\Delta_{2}} + \frac{w_{4}}{\Delta_{2}} + \frac{w_{4}}{\Delta_{2}} \right]$$
où uu_{1} est dommé par (28)
et y_{1}^{2} " (8)

Les constantes A_i et B_i étant calculées, explicitons les termes P_i , P_i' et P_i'' , avec i=1,2; le calcul est effectué ici sur P_i' . les autres termes s'en déduisent facilement.

$$M_{A}' = \int_{e_{A}}^{e_{2}} \frac{q(k,z')}{D_{2}} e^{-kzz'} dz'$$

D'après (1) on peut ecrire:

$$\begin{split} q(k,z') &= \lambda_{A} \left(e^{-k_{2} S_{A}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{A}^{2}} \right) + \lambda_{2} \left(e^{-k^{2} S_{A}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{2}^{2}} \right) \\ &+ \lambda_{3} \left(e^{-k_{2} S_{2}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{3}^{2}} \right) + \lambda_{4} \left(z' e^{-k^{2} S_{A}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{A}^{2}} \right) \\ &+ \lambda_{5} \left(z' e^{-k^{2} S_{A}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{2}^{2}} \right) + \lambda_{6} \left(z' e^{-k^{2} S_{2}^{2} | 4} e^{-z'^{2} | S_{3}^{2}} \right) \end{split}$$

Dans le calcul de 1', on me s'interensera qu'aux termes ayant commex facteurs 1, et 1, mous les appelerons 4, et 4; les quatres autres en découlent auxement.

On fait le changement de variable $u = \frac{K\sigma_z^2}{2}$ $V_1 = \frac{d^2}{D_z} e^{-k^2 \sigma_z^2 / 4} \int_{e_1}^{e_2} e^{-\left(\frac{z' + u}{\sigma_z}\right)^2} e^{k_z^2 \sigma_z^2 / 4} dz'$

On effectue un deuxième changement de variable:

$$V_{1} = \frac{\lambda_{2}}{D_{2}} e^{-\frac{R^{2}}{2} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} \frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty_{2}} e^{\frac{R^{2}}{2} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} \frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty_{2}} e^{-\frac{R^{2}}{2} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} \frac$$

Or
$$\int_{x_1}^{x_2} e^{-t^2} dt = \int_{x_1}^{0} e^{-t^2} dt + \int_{0}^{x_2} e^{-t^2} dt$$

et
$$\int_{0}^{2} e^{-t^{2}} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-t^{2}} \int_{0}^{2} e^{-t^{2}} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-t^{2}} \int_{0}^{2} e^{-t^{2}} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_{0}^{2} e^{-t^{2}}$$

$$\mathcal{J}_{2} = \left\{ erF \left(\frac{e_{2} + k_{2} \mathcal{J}_{2}^{2} / 2}{\mathcal{J}_{2}} \right) - erF \left(\frac{e_{4} + k_{2} \mathcal{J}_{2}^{2} / 2}{\mathcal{J}_{2}} \right) \right\}$$

$$V_2 = \frac{ds}{D_2} \int_{z'}^{e_2} z' e^{-\frac{R^2}{8}} \frac{dz'}{e^{-\frac{R^2}{2}}} e^{-\frac{R^2}{2}} \frac{dz'}{e^{-\frac{R^2}{2}}} e^{-\frac{R^2}{2}} \frac{dz'}{e^{-\frac{R^2}{2}}}$$

les autres calculs des différents termes des 7, 7, et 1; dérivent des 2 calculs précédents:

$$\begin{split} & \prod_{A=1}^{l} \int_{e_{A}}^{e_{2}} q \frac{\left(\frac{R_{1}z'}{D_{2}} \right)}{\left(\frac{R_{2}z'}{D_{2}} \right)} e^{-k_{2}z'} dz' \\ & = \lambda_{A} \sigma_{A} e^{\sigma_{A}^{2}/4 L_{2}^{2}} \frac{\sqrt{m}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{2} \sigma_{2} e^{\left(\frac{k_{2}^{2} \sigma_{2}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{A}^{2}/4}{2D_{2}} \frac{\sqrt{m}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}} \right) \right] \\ & + \lambda_{3} \sigma_{3} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{3}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{2}^{2}/4} \right) \frac{\sqrt{m}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{2}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{4} \frac{\sigma_{A}^{2}}{2D_{2}} e^{\sigma_{A}^{2}/4} \frac{|q|_{L_{2}^{2}}^{2}}{e} \left[erf \left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & - \lambda_{4} \frac{\sigma_{A}^{2}}{2D_{2}} k_{2} e^{\sigma_{A}^{2}/4} \frac{|q|_{L_{2}^{2}}^{2}}{e} \left[erf \left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{2}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{A}^{2}/4} \right) \frac{\sigma_{2}^{2}}{2D_{2}} \left[e^{-\left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{2}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{2}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{A}^{2}/4} \right) \frac{\sigma_{2}^{2}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{2}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{A}^{2}/4} \right) \frac{\sigma_{2}^{2}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{2}^{2}/4 - \frac{R^{2}}{6} \sigma_{A}^{2}/4} \right] \frac{\sigma_{2}^{2}}{2D_{2}} \left[erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{A}^{2} - \frac{e_{A}^{2}}{2} \right)} \left[erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) - erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right) \right] \\ & + \lambda_{5} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{A}^{2} - \frac{e_{A}^{2}}{2} \right) \left[erf \left(\frac{e_{A} + k_{2} \sigma_{A}^{2}/2}{\sigma_{A}} \right)$$

$$- \frac{1}{5} e^{\left(k_{z}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - R^{z} Z_{1}^{2} | 4\right)} k_{z} \frac{\sigma_{z}^{3}}{2D_{z}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[er \left(\frac{e_{z} + k_{z} \sigma_{z}^{2} / 2}{\sigma_{z}}\right) - er \left(\frac{e_{1} + k_{z} \sigma_{z}^{2} | 2}{\sigma_{z}}\right) \right]$$

$$\begin{split} &\Delta \rho_{A}(k,z) = A_{A}e^{k_{1}z} + B_{A}e^{-k_{A}z} \\ &+ \frac{A_{A}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-k_{A}^{2}z} + B_{A}e^{-k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{z - k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{A}} \right) - \text{erf } \left(\frac{-k_{A}G_{A}}{2^{2}} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{A}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-G_{A}^{2}|4L_{A}^{2}}e^{k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{e_{A} + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{A}} \right) - \text{erf } \left(\frac{z + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{A}} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - k_{A}^{2}}E_{A}^{2}|4|}e^{-k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{e_{A} + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{B}^{2}} \right) - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - k_{A}^{2}}E_{A}^{2}|4|}e^{-k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{e_{A} + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{B}^{2}} \right) - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - k_{A}^{2}}E_{A}^{2}|4|}e^{-k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{e_{A} + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{A}^{2}} \right) - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - k_{A}^{2}}E_{A}^{2}|4|}e^{-k_{A}z} \left[\text{erf } \left(\frac{e_{A} + k_{A}G_{A}^{2}|2}{G_{A}^{2}} \right) - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}}G_{A} \text{ Th } k_{A}G_{A}^{2}e^{-k_{A}z} \left[e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|2)} - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}} \text{ Th } k_{A}G_{A}^{2}e^{-G_{A}^{2}|4|L_{A}^{2}}e^{-k_{A}z} \left[e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|2)} - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &+ \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}} \text{ Th } k_{A}G_{A}^{2}e^{-G_{A}^{2}|4|L_{A}^{2}}e^{-k_{A}z} \left[e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4) - e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|2)} - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &- \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}} \text{ Th } k_{A}G_{A}^{2}e^{-G_{A}^{2}|4|L_{A}^{2}}e^{-k_{A}z} \left[e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|2)} - e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|2)} - \text{erf } \left(-k_{A}G_{A}^{2}|2} \right) \right] \\ &- \frac{A_{B}}{4k_{A}D_{A}} \text{ Th } k_{A}G_{A}^{2}e^{-G_{A}^{2}|4|L_{A}^{2}}e^{-k_{A}z} \left[e^{-(k_{A}^{2}G_{A}^{2}|4)} - e^{-(k_{A}^{2}G_{$$

$$+ \frac{1}{16} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{3}^{2} / 4 - k^{2} \sigma_{2}^{2} / 4\right)} \frac{\sigma_{3}^{2}}{2 D_{2}} \left\{ e^{-\left(\frac{e_{1} + k_{2} \sigma_{3}^{2} / 2}{\sigma_{3}^{2}}\right)} e^{-\left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{3}^{2} / 2}{\sigma_{3}^{2}}\right)} \right\}$$

$$- \frac{1}{16} e^{\left(k_{2}^{2} \sigma_{3}^{2} / 4 - k^{2} \varepsilon_{2}^{2} / 4\right)} \frac{\kappa_{2} \sigma_{3}^{3}}{2 D_{2}} \frac{\text{III}}{2} \left[e_{1} f\left(\frac{e_{2} + k_{2} \sigma_{3}^{2} / 2}{\sigma_{3}^{2}}\right) - e_{1} f\left(\frac{e_{1} + k_{2} \sigma_{3}^{2} / 2}{\sigma_{3}^{2}}\right) \right]$$

Chaque expression l'i (cf expressions (3) à (14) page) étant formée de stermes, mous me les expremerors pas ici.

Avant d'obstemir les densités des porteurs monoritaires $\Omega_{p,(k,z)}$, $\Omega_{p,(k,z)}$ et $\Omega_{p,(k,z)}$ correspondant respectivement aux couches 1,2 et 3, il me reste plus qu'à calculer les termes comportant des valeurs absoluer comme par exemple:

Nous allons expliciter cette expression en motant bien que le calcul est du même type pour les autres termes comportant des valeurs absolues.

$$\int_{e_1}^{e_z} q(k,z') e^{-k_z |z-z'|} dz' = \int_{e_1}^{z} q(k,z') e^{-k_z (z-z')} dz' + \int_{z}^{e_z} q(k,z') e^{k_z (z-z')} dz'$$

La suite du calcul est similaire à celu effectué pour les termes 1, 1, et 1, avec i = 1,2

On obhent funalement pour Ap; (k,z) avec f=1,2,3:

$$\begin{split} &+\frac{\Lambda_{5}}{4k_{A}D_{A}} \int_{2}^{z} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{-k_{A} z} \left[e^{-k_{A}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - e^{-\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right)^{2}} \right] \\ &+ \frac{\Lambda_{5}}{8k_{A}D_{A}} \sqrt{\pi} k_{A} \sigma_{z}^{3} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{-k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right) - erf\left(\frac{k_{A} G_{z}^{2}}{2}\right) \right] \\ &+ \frac{\Lambda_{5}}{4k_{A}D_{A}} \sigma_{z}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right)^{2} - erf\left(\frac{z + k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &- \frac{\Lambda_{5}}{8k_{A}D_{A}} \sqrt{\pi} k_{A} \sigma_{z}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{z}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{e_{A} + k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right) - erf\left(\frac{z + k_{A} \sigma_{z}^{2} | 2}{G_{z}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &+ \frac{\Lambda_{6}}{4k_{A}D_{A}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{-k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right) - erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &+ \frac{\Lambda_{6}}{4k_{A}D_{A}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right) - erf\left(\frac{-k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &- \frac{\Lambda_{6}}{4k_{A}D_{A}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right) - erf\left(\frac{-k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &- \frac{\Lambda_{6}}{8k_{A}D_{A}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right) - erf\left(\frac{-k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &- \frac{\Lambda_{6}}{8k_{A}D_{A}} \sqrt{\pi} k_{A} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} | 4 - \frac{R^{2}}{R^{2}} \mathcal{E}_{z}^{2} | 4 \right)} e^{k_{A} z} \left[erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right) - erf\left(\frac{z - k_{A} \sigma_{3}^{2} | 2}{G_{3}^{2}}\right)^{2} \right] \\ &- \frac{\Lambda_{6}}{8k_{A}D_{A}} \sqrt{\pi} k_{A} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{A}^{2} \sigma_{3}^{2} |$$

2+ K2 01/2/2

|- erf (

(8+ K2 47 /2)

erf

hy TEK253 621/412 kz2

& K2D

en- k2 01/2

1 - erf

+ d4 (TK20, 2 03/412, e- k22 erf (2- k20, 12)

(e2 + k2 C1/2)

(Z-K202 12

+ 44 Zz Cz /4Lz e KzZ

$$\begin{split} &+\frac{d_{S}}{4k_{2}D_{2}}\sigma_{1}^{2}\frac{e^{\left(k_{2}\sigma_{2}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{1}^{-2}|4\right)}}e^{-k_{2}Z}\left[\text{erf}\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)-\text{erf}\left(\frac{e_{1}-k_{2}\sigma_{2}^{-2}/2}{\sigma_{2}}\right)^{2}\right]\\ &+\frac{d_{S}}{8k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{2}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{2}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{1}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[\text{erf}\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)-\text{erf}\left(\frac{e_{1}-k_{2}\sigma_{2}^{-2}/2}{\sigma_{2}}\right)^{2}\right]\\ &+\frac{d_{S}}{4k_{2}D_{2}}\sigma_{2}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{2}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{1}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z+k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)^{2}}-e^{-\left(\frac{z+k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)^{2}}\right]\\ &-\frac{d_{S}}{8k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{2}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{2}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{1}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z+k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)}-e^{-\left(\frac{z+k_{2}\sigma_{2}^{-2}|2}{\sigma_{2}}\right)^{2}}\right]\\ &+\frac{d_{G}}{4k_{2}D_{2}}\sigma_{3}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{2}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{e_{1}-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}\right]\\ &+\frac{d_{G}}{k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{3}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{2}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}\right]\\ &+\frac{d_{G}}{4k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{3}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{2}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}\right]\\ &+\frac{d_{G}}{4k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{3}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{2}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}\right]\\ &-\frac{d_{G}}{8k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{3}^{-2}e^{\left(k_{2}^{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}}{k_{2}}Z_{2}^{-2}|4\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}|2}{\sigma_{3}}\right)-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|2}{\sigma_{3}}\right)^{2}}\right]\\ &-\frac{d_{G}}{4k_{2}D_{2}}\sqrt{\pi}k_{2}\sigma_{3}^{-2}e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}\sigma_{3}^{-2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}\sigma_{3}^{-2}\sigma_{3}^{-2}|4}{\sigma_{3}}\right)}e^{-k_{2}Z}\left[e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}|4}{\sigma_{3}}\right)-e^{-\left(\frac{z-k_{2}\sigma_{3}^{-2}}|4-\frac{p_{2}\sigma_{3}^{-2}\sigma_{3}^{-2}|4-\frac{p_{2}\sigma_{3$$

$$\begin{split} & \Delta \rho_{3}(\vec{k},z) = A_{3}e^{k_{3}Z} + B_{3}e^{-k_{3}Z} \\ & + \frac{A_{4}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4} \text{ fit } e^{\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{-k_{3}Z} \left[\text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{4}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4} \text{ fit } e^{\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z + k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{2}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{2} \text{ fit } e^{(k_{3}^{2}\sigma_{2}^{2}|4 - k_{3}^{2}\sigma_{4}^{2}|4)} e^{-k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{2}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{2}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3} \text{ fit } e^{(k_{3}^{2}\sigma_{2}^{2}|4 - k_{4}^{2}\sigma_{4}^{2}|4)} e^{-k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{3}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{3}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3} \text{ fit } e^{(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}|4 - k_{4}^{2}\sigma_{4}^{2}|4)} e^{k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{3}^{2}|2}{\sigma_{3}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{3}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3} \text{ fit } e^{(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}|4 - k_{4}^{2}\sigma_{4}^{2}|4)} e^{-k_{3}Z} \left[e^{-(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2)}{\sigma_{3}}} - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{3}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{4}}{2k_{3}D_{3}} \sigma_{4} \text{ fit } k_{3}\sigma_{4}^{2} e^{-k_{3}Z} \left[e^{-(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}}) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{4}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4}^{2} e^{-\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{-k_{3}Z} \left[e^{-k_{3}Z} \left[e^{-(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4}^{2} e^{-\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{-k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4}^{2} e^{-\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{-k_{3}Z} \left[A - \text{ erf} \left(\frac{z - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) - \text{ erf} \left(\frac{e_{2} - k_{3}\sigma_{4}^{2}|2}{\sigma_{4}} \right) \right] \\ & + \frac{A_{3}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{4}^{2} e^{-\sigma_{4}^{2}|4L_{3}^{2}} e^{-\kappa_{3}Z$$

$$\begin{split} &+\frac{h_{5}}{8k_{3}D_{3}} \text{ fit } k_{3} \sigma_{2}^{3} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{2}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{4}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[\text{erf}\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}}\right) - \text{erf}\left(\frac{e_{2}-K_{3}\sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}}\right) - \text{erf}\left(\frac{e_{2}-K_{3}\sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}}\right) \right] \\ &+\frac{h_{5}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{2}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{2}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{4}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \cdot e^{-\left(\frac{z+k_{3}\sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}}\right)^{2}} \\ &-\frac{h_{5}}{2k_{3}D_{3}} \text{ fit } k_{3}\sigma_{2}^{3} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{2}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[A - \text{erf}\left(\frac{z+k_{3}\sigma_{2}^{2}/2}{\sigma_{2}}\right) \right] \\ &+\frac{h_{6}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[e^{-\left(\frac{e_{2}-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right)^{2}} - e^{-\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right)^{2}} \right] \\ &+\frac{h_{6}}{4k_{3}D_{3}} \text{ fit } k_{3}\sigma_{3}^{3} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{e_{2}-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) \right] \\ &+\frac{h_{6}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{e_{2}-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) \right] \\ &-\frac{h_{6}}{4k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{e_{2}-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) \right] \\ &-\frac{h_{6}}{8k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{e_{2}-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) \right] \\ &-\frac{h_{6}}{8k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) \right] \\ &-\frac{h_{6}}{8k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}}\right) - erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/2}{\sigma_{3}^{2}/4}\right) \right] \\ &-\frac{h_{6}}{8k_{3}D_{3}} \sigma_{3}^{2} e^{\left(k_{3}^{2}\sigma_{3}^{2}/4-\frac{R^{2}}{8c_{2}^{2}/4}\right)} e^{-k_{3}z} \left[erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/4}\right) - erf\left(\frac{z-k_{3}\sigma_{3}^{2}/4}{\sigma_{3}^{2}}\right) \right$$

ANNEXE III

Calcul des termes de contraste de cathodoluminescence C_1 et C_2 pour une dislocation perpendiculaire à la surface

1 Calcul de δl CL1

On a vu dans le chapitre V que δI_{CL_1} pouvait s'écrire :

$$\delta I_{CL_1} = \left(\frac{\tau}{\tau_r}\right) \cdot \frac{1}{L^2} \int_{V_d} \rho(z) \Delta \rho_o(r) d^3r$$
 (1)

avec
$$\rho(z) = \int_0^{\theta_c} \frac{\exp(-\beta z) - \exp(-z/L)}{1 - L^2 \beta^2} L^2 \sin\theta d\theta$$
 (2)

Or, d'après l'expression de $\Delta p_o(r)$ (cf éq (4) chapitre V):

$$\delta I_{CL_1} = \frac{\tau}{\tau_r L^2 D} \int_{V_d} \rho(z) \int_{V} g(r') \chi(r,r') d^3r' d^3r \qquad (3)$$

$$x \int_{0}^{+\infty} \chi(\mathbf{r},\mathbf{r'}) \rho(z) dz$$

D'où:

$$\delta I_{CL_1} = \frac{\tau}{\tau_r L^2 D} \int_0^{2\pi} \int_0^R \left\{ \int_V g(\mathbf{r'}) d^3 \mathbf{r'} \right\} r dr d\theta \qquad (4)$$

On peut montrer que:

$$\int_{0}^{+\infty} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r'}) \rho(z) dz = \int_{0}^{+\infty} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r'}) \int_{0}^{\theta} \left\{ \frac{\exp(-\beta z) - \exp(-z/L)}{1 - L^{2} \beta^{2}} \right\}$$

$$\times L^{2} \sin \theta d\theta dz \qquad (5)$$

$$= \frac{L^{2}}{\pi^{2}} \int_{0}^{\theta} \frac{\sin \theta d\theta}{1 - L^{2} \beta^{2}} \left\{ \int_{0}^{+\infty} K_{0} \left[\gamma \mid \mathbf{r} - \mathbf{r'} \mid \right] \cdot \frac{\sin(k_{z}z')}{\gamma^{2}} k_{z} dk_{z} \right]$$

$$- \int_{0}^{+\infty} K_{0} \left[\lambda \mid \mathbf{r} - \mathbf{r'} \mid \right] \cdot \frac{\sin(k_{z}z')}{\lambda^{2}} k_{z} dk_{z}$$

- K o est la fonction de Bessel modifiée du premier ordre.

$$- \lambda = \sqrt{k_z^2 + \frac{1}{L^2}} \qquad \text{et} \qquad \gamma = \sqrt{k_z^2 + \beta^2}$$

 δ I $_{CL}$, s'écrit finalement :

$$\delta I_{CL_{1}} = \left(\frac{\tau}{\tau_{r}}\right) \cdot \frac{2}{\pi D} \int_{0}^{R} \left\{ \int_{0}^{+\infty} g(r',z') r' dr' dz' \right\} r dr$$

$$\times \int_{0}^{\theta_{c}} \frac{\sin \theta d\theta}{1 - L^{2} \beta^{2}} \left\{ \frac{K_{o} \left[\gamma \mid r - r' \mid \right]}{\gamma^{2}} - \frac{K_{o} \left[\lambda \mid r - r' \mid \right]}{\lambda^{2}} \right\} \sin \left(k_{z} z'\right) k_{z} dk_{z}$$

$$(7)$$

2 Calcul de δl CL 2

 δl_{CL_2} peut s'exprimer par (cf chap V éq (19)) :

$$\delta I_{CL_2} = \frac{\tau}{\tau_r} \int_{S_d} \rho(z) \operatorname{grad} \delta p(r) dS$$
 (8)

Or, la modification δ p (r) apportée par le défaut à Δ p $_{o}$ (r) peut s'exprimer par ([1] chap V) :

$$\delta p(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^{+\infty} \frac{K_0(\beta_{\alpha} \mathbf{r})}{K_0(\beta_{\alpha} R)} K_0(\beta_{\alpha} | \mathbf{r} - \mathbf{r}' |_{r=R}) \frac{g(\mathbf{r}')}{D}$$

$$\times \sin(\alpha z') \sin(\alpha z) d\mathbf{r}' d\alpha$$
(9)

- K_o et K₁ sont les fonctions de Bessel modifiées du premier et second ordre respectivement.

$$\gamma_{\alpha} = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \quad \text{et} \quad \beta_{\alpha} = \sqrt{\alpha^2 + \frac{1}{L^2}}$$

lpha: réel positif [1]

 δ I $_{\text{CL}_{2}}$ s'écrit finalement :

$$\delta I_{CL_2} = \left(\frac{\tau}{\tau_r}\right) \frac{R L^2}{\pi D} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} K_o[\beta | r - r'|_{r=R}] \cdot \frac{K_1(\beta_{\alpha} R)}{K_o(\beta_{\alpha} R)}$$
(10)

$$x g(\mathbf{r'}) \sin(\alpha z') r' dr' dz' \int_{0}^{+\infty} \int_{0}^{\theta c} \frac{\sin \theta d\theta}{1 - L^{2} \beta^{2}} \left(\frac{1}{\gamma_{\alpha}^{2}} - \frac{1}{\beta_{\alpha}^{2}} \right) \beta_{\alpha} \alpha d\alpha$$

PPN044008554

Résumé

Dans une première partie, nous avons utilisé la cathodoluminescence comme méthode locale de caractérisation de couches épitaxiées. Nous discutons de l'influence, sur cette intensité, des longueurs de diffusion dans les différentes couches ainsi que des vitesses de recombinaison en surface et aux interfaces. Les expériences ont été réalisées à 300 K et à 77 K sur des structures à deux couches déposées sur un substrat ; les échantillons sont des homojonctions GaAs obtenues par MBE (Molecular Beam Epitaxy), ainsi qu'une hétérostructure InP / GaInAs / InP obtenue par MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition). Nous avons étudié l'influence de la température de croissance et du dopage en Silicium sur les paramètres.

Dans une seconde partie, un modèle physique de contraste de cathodoluminescence de dislocations perpendiculaires à la surface est proposé. Nous avons étudié le contraste de cathodoluminescence de dislocations de croissance et de dislocations "fraîches" introduites par microindentations dans des couches épitaxiées de dopages différents (4.10¹⁷ et 2.10¹⁸ cm⁻³). Pour la première fois, les champs électriques associés au champ de déformation de la dislocation sont envisagés comme étant à l'origine de la recombinaison aux dislocations. L'augmentation de l'efficacité de recombinaison de la dislocation avec le dopage et des portées de capture de l'ordre de 2000 A expliquent les fortes valeurs de contraste obtenues expérimentalement.

Mots - clés :



- arséniure de gallium
- cathodoluminescence
- dislocation
- couche épitaxiée