



USTL

Université des Sciences et Technologies de Lille

Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide

N° d'ordre: 1577

Jan 24 1995

50376
1995
361



THESE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité "Sciences des matériaux"

par

ADEL MIRI

**MECANISMES DE RECOMBINAISON DES
PAIRES ELECTRON-TROU ASSOCIES AUX
DISLOCATIONS DANS LES
SEMICONDUCTEURS III-V**

Soutenue le 17 novembre 1995 devant la Commission d'Examen

Président:	M.	Allan. G.	Directeur de Recherches C.N.R.S I.E.M.N.
Rapporteurs:	M.	Averous. M.	Professeur Université Montpellier II.
	M.	Nouet. G.	Directeur de Recherches C.N.R.S I.S.M.R.A Caen.
Directeur de Thèse:	M	Farvacque. J-L.	Professeur U.S.T.L. Flandres-Artois.
Examineur:	M ^{me} .	Sieber. B.	Chargée de Recherches C.N.R.S U.S.T.L Flandres.

Dédicaces

"Ce n'est certes pas le moindre charme d'une théorie que d'être réfutable. Par là, elle attire précisément les cerveaux les plus sensibles. Je crois que la théorie cent fois réfutée du libre arbitre ne doit plus sa durée qu'à cet attrait. Il se trouve sans cesse quelqu'un qui se sent assez fort de cette réputation".

Nietzsche

À la mémoire de mon père,

À Valérie et à ma mère,

À tout les miens.

Remerciements

Ce travail a été effectué dans le groupe Semiconducteurs du Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide (LSPES, UA CNRS 234) de l'Université des Sciences et Technologies de Lille.

Cette thèse a été réalisée sous la direction de Monsieur le Professeur Jean-Louis FARVACQUE, directeur du LSPES. Sa compétence et ses précieux conseils m'ont été très utiles pour mener à bout cette étude. J'ai beaucoup appris à son contact et je tiens à le remercier vivement.

Madame B.Sieber a également dirigé cette étude. Son aide et ses nombreux conseils m'ont aidé tout au long de ce travail. Je lui en suis reconnaissant.

Monsieur G.Allan (Directeur de Recherches C.N.R.S à l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord) a accepté de présider le jury de cette thèse. Je lui exprime toute ma gratitude pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail, ainsi que pour les nombreuses et fructueuses discussions qu'il m'a accordées.

Monsieur M.Averous (Professeur au Laboratoire Groupe d'Etude des Semiconducteurs à l'Université de Montpellier II) a bien voulu juger ce travail. Je le remercie pour l'examen attentif auquel il a soumis à mon manuscrit.

Monsieur G.Nouet (Directeur de Recherches C.N.R.S à l'I.M.R.A, Caen) a accepté d'examiner ce travail. Je le remercie pour l'intérêt qu'il m'a ainsi témoigné.

Nombreux sont ceux qui m'ont apporté leur aide à un moment ou à un autre de ce travail. Je voudrais remercier particulièrement mon ami Claude Vanmansart pour son amitié sa disponibilité ainsi que son soutien constant tout au long de ce travail.

J'ai bénéficié pour l'informatisation du banc expérimental de l'E.B.I.C et de la Cathodoluminescence, d'une aide précieuse de la part de B. Hue. Je voudrais lui exprimer mes remerciements les plus sincères.

J'ai souvent sollicité D.Vignaud qui ne m'a jamais refusé son concours. Je voudrais lui témoigner ma plus vive reconnaissance.

Evidemment je voudrais remercier tout les membres du LSPES pour la sympathie qu'ils m'ont témoignée.

Sommaire

Introduction

Introduction..... 1

Chapitre I:

Propriétés des dislocations dans les semiconducteurs

I. Propriétés générales des dislocations:	4
II. Niveaux d'énergie profonds associés aux coeurs des dislocations.	6
III. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations.	9
III.1. Modèle de la zone déserte	11
III.2. Ecrantage par les porteurs libres.....	12
Bibliographie du chapitre I.....	13

Chapitre II:

E.B.I.C, Cathodoluminescence

I. Introduction:	15
I.1. Interaction électron matière:	16
I.2. Perte d'énergie, parcours électronique.....	17
II. Techniques expérimentales	20
II.1. Diode de Schottky:	20
II.2. Caractérisation d'un semiconducteur en mode E.B.I.C:	22
II.3. Expression théorique du courant induit:	23
A) Equation de continuité:	23
B) Résolution de l'équation de continuité dans le cas d'une diode Schottky perpendiculaire au faisceau:	24
II.4. Génération de paires électron-trou:	26

II.4.1 Energie d'ionisation:	26
II.4.2. Fonction de génération:	26
II.4.3. Efficacité de collecte:	29
II.4.4. Caractérisation des courbes d'efficacité de collecte dans le modèle de Wu et Wittry:	30
-Aux basses tensions d'accélération:	30
-Influence du dopage:	31
-Influence de l'efficacité de collecte dans la zone de charge d'espace:	31
II.5. Caractérisation en mode cathodoluminescence:.....	32
II.5.1. Intensité de cathodoluminescence:.....	32
II.5.2. Instrumentation:	35
Bibliographie du chapitre II	37

Chapitre III:

**Théorie du contraste E.B.I.C,
Cathodoluminescence des
dislocations**

Introduction:	39
I. Définition du contraste E.B.I.C:	40
II. Théorie du contraste E.B.I.C:	41
II.1. Introduction:	41
II.1.1. Modèle phénoménologique (Donolato) :	42
II.1.1.a. Contraste E.B.I.C d'un défaut ponctuel:.....	45
II.1.1.b. Contraste E.B.I.C maximum d'un défaut à symétrie sphérique et d'une dislocation parallèle à la surface:.....	46
1) Recombinaison intrinsèque:.....	51
2) Recombinaison extrinsèque:.....	52
II.2. Modèle physique (Wilshaw):.....	52
II.2.1. Expression du contraste E.B.I.C:	52
II.2.2. Présentation du modèle:	53
II.2.3. Dépendance de la recombinaison en fonction de la température et de l'injection:	56
II.2.4. Mécanisme de recombinaison:	57
II.2.5. Interprétation des courbes de contraste E.B.I.C:	57

A) En fonction de la température:	57
B) En fonction de l'injection:	59
Conclusion:	59
II.3. Modèle quantitatif (Farvacque, Sieber):.....	60
Introduction:.....	60
II.3.1. Fondement du modèle:	61
A) Recombinaison dans la zone de charge d'espace:.....	61
B) Origine du contraste E.B.I.C dans la zone de charge d'espace:	62
C) Effet de saturation:	63
D) Recombinaison dans la zone de diffusion:	64
II.3.2. Résultats numériques:	65
II.3.3. Conclusion:	68
II.4. Réflexion sur la dépendance du contraste en injection et température:	69
Introduction:	69
II.4.1. Dépendance du contraste E.B.I.C et CL en fonction de l'injection et de la température:	69
II.4.2. Modélisation du contraste Kittler et al:	70
-Dépendance du contraste en température et en injection:	71
II.4.3. Conclusion:	72
III. Conclusion générale	73
Bibliographie du chapitre III.....	74

Chapitre IV:

**Mécanismes de
recombinaison des porteurs
aux dislocations:
Conséquences sur le contraste
E.B.I.C**

Introduction:	78
I.1. Introduction du modèle:.....	79
I.2. Champ électrique dû aux effets de coeur:	79
I.3. Potentiel de déformation:.....	81

I.4. Potentiel piézoélectrique:	82
II. Mécanismes de recombinaison.	86
II.1. Transitions radiatives:	86
II.1.a. Couplage électron-photon.....	87
II.1.b. Probabilité de transition: règle d'or de Fermi.....	88
II.2. Transitions non radiatives:.....	89
II.2.1. Interaction électron-phonon:	89
A) Couplage au potentiel de déformation:.....	92
Temps de relaxation de l'énergie:	93
B) Couplage piézoélectrique:	94
III. Section de capture des dislocations.	96
III.1. Capture limitée par la diffusion des porteurs dans l'espace réel:.....	98
III.2 Capture limitée par la diffusion dans l'espace des énergies:	100
III.2.1 Calcul du coefficient B(E):.....	107
i-couplage au potentiel de déformation.	107
ii-couplage au potentiel piézoélectrique.	107
VI.1. Détermination du contraste E.B.I.C.	108
IV.1.2. Contraste E.B.I.C d'une dislocation.	110
V. Résultats numériques et discussions.	113
V.1 Couplage au potentiel piézoélectriques.	115
V.2. Couplage au potentiel de déformation.	116
V.2.1 Variation de la recombinaison en fonction de l'injection.	116
i-Mécanismes de recombinaison associé à la dislocation β	121
ii-Mécanisme de recombinaison associé à la dislocation α	123
A) Contraste E.B.I.C des dislocations α et β à 300K:	125
B) Contraste E.B.I.C des dislocations α et β à basse température:	126
V.2.2. Variation de la recombinaison en fonction de la température.....	127
V.2.3. Mécanismes de recombinaison extrinsèques.....	129
VI. Conclusion:	131
Bibliographie du chapitre IV	133

Chapitre V:

Contraste CL des dislocations de désadaptation de réseau dans un puits quantique InGaAs/GaAs

Introduction:	137
I. Présentation des échantillons.	138
I.1 Hétérostructures pseudomorphiques.	138
Désadaptation de réseau-accomodation élastique.	139
I.2. Nature des dislocations de désadaptation de réseau.	140
II. Résultats expérimentaux.	140
II.1. Introduction.	140
A) Contraste CL en fonction de l'injection:	141
B) Contraste CL en fonction de la température:.....	141
II.2. Interprétation.	142
A) Physique des dislocations de désadaptation de réseau:	142
B) Extension spatiale des potentiels:	142
C) Mécanismes de recombinaison des porteurs aux dislocations:	142
D) Recombinaison S-R-H:	143
III. Conclusion	148
Bibliographie du chapitre V	150

Conclusion

Conclusion	153
-------------------------	-----

Introduction

Les semiconducteurs élémentaires (Si, Ge) ainsi que la plupart des composés III-V sont largement utilisés comme matériaux de base dans les composants optoélectroniques. Les qualités de ces composants sont fortement liées à la concentration des défauts introduits au cours de leur fonctionnement ou durant la croissance du matériau; la non uniformité de leurs caractéristiques est un problème majeur pour la fabrication industrielle.

De nombreux travaux expérimentaux ont eu pour objet d'étudier comment les dislocations modifient les propriétés électroniques et ont notamment montré une réduction importante de la densité et de la mobilité des porteurs libres. Mais ces techniques n'ont pas permis l'étude des mécanismes de recombinaison des porteurs aux dislocations. En revanche, les techniques d'injection de porteurs telles que la méthode du courant induit (E.B.I.C), et la cathodoluminescence (CL) dans un microscope électronique à balayage, offrent l'avantage de combiner l'imagerie et l'étude des propriétés électroniques des dislocations. Ces techniques permettent également de déterminer localement les paramètres physiques du matériau et de plus, elles sont non destructives.

Les dislocations sont des centres de recombinaison efficaces; les porteurs de charge se recombinent soit sur les niveaux qu'elles introduisent dans la bande interdite (recombinaison intrinsèque), soit sur les impuretés qui s'y sont accumulées (recombinaison extrinsèque).

L'une des techniques les plus efficace permettant d'étudier les mécanismes de recombinaison des porteurs associés aux dislocations, est l'étude du contraste E.B.I.C / (CL) en fonction de l'injection et de la température. Pour cela, plusieurs modèles théoriques ont été développés (Donolato, Wilshaw, Farvacque et Sieber etc...). Cependant ces modèles sont incomplets car ils ne permettent pas de déterminer la section efficace de capture des porteurs associée aux dislocations et par conséquent, ne peuvent pas prévoir sa variations en fonction de l'injection et de la température. Pourtant, ce paramètre est la clef indispensable à la compréhension des mécanismes de recombinaison des porteurs aux dislocations.

Dans ce mémoire, nous postulons que les dislocations introduisent des niveaux profonds dans la bande d'énergie interdite de GaAs. Nous considérons

que leur nature (métallique ou semiconductrice), ainsi que leur positions dans la bande interdite, sont des paramètres à déterminer éventuellement, par l'exploitation quantitative des contrastes observés dans les expériences d'injection de porteurs et dont l'analyse fait l'objet du présent mémoire.

Dans le chapitre I, nous rappelons les propriétés géométriques et électroniques des dislocations dans les semiconducteurs.

Le chapitre II concerne le principe de la méthode E.B.I.C et cathodoluminescence.

Dans le chapitre III, nous citons les différents modèles concernant la théorie du contraste E.B.I.C. Nous montrons que ces modèles sont insuffisants puisqu'ils ne permettent pas dans la plupart des cas, de remonter aux valeurs quantitatives du contraste E.B.I.C.

Dans le chapitre IV nous exposons un nouveau modèle physique de contraste E.B.I.C, dans lequel les coefficients de capture des porteurs minoritaires et majoritaires sont naturellement calculés de manière auto-cohérente sous injection, en fonction des propriétés électroniques du milieu dans lequel se trouvent les dislocations. Nous mettrons en évidence grâce à ce modèle, une nouvelle structure de bande associée aux dislocations et nous montrons que les résultats numériques issus de cette nouvelle structure de bande, sont en parfait accord avec les résultats expérimentaux. Par ailleurs, nous justifions pour la première fois l'ordre de grandeur des contrastes extrinsèques des dislocations. Nous interprétons ce phénomène par un drainage des impuretés au coeur des dislocations.

Enfin, dans le chapitre V, nous exposons pour la première fois, des résultats expérimentaux de contraste CL, obtenus sur des dislocations situées à l'interface d'un puits quantique (InGaAs/GaAs). Nous montrons que compte tenu de la nature du milieu diélectrique dans lequel se trouvent les dislocations, la recombinaison des porteurs aux dislocations n'est plus un mécanisme auto-cohérent et ne dépend plus de la charge portée par les dislocations. La recombinaison de type Shockley-Read-Hall est alors parfaitement adaptée à ce cas de figure et la recombinaison est de type extrinsèque.

Chapitre I

**Propriétés des dislocations
dans les semiconducteurs**

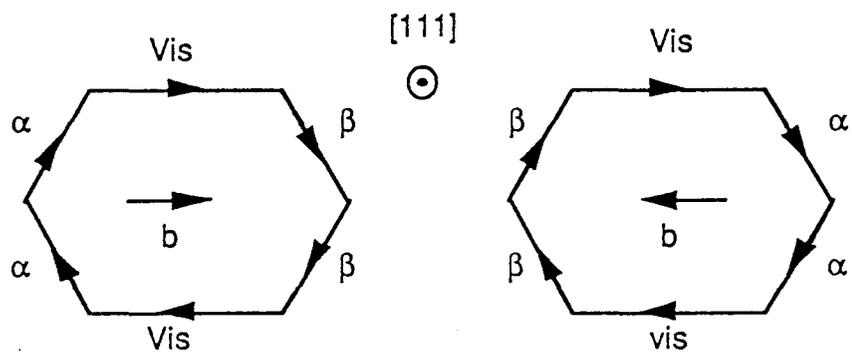


Figure I-2: boucle de dislocations représentée dans son plan de glissement (111).

I. Propriétés générales des dislocations:

Les semiconducteurs élémentaires (Si, Ge) ainsi que la plupart des composés III-V et quelques composés II-VI cristallisent dans la structure cubique à faces centrées. Le motif de chaque maille élémentaire est constitué de deux atomes (par exemple Si-Si pour la structure diamant, Ga-As, Cd-Te pour les structures sphalérites) situés respectivement en $(0,0,0)$ et $(1/4,1/4,1/4)$.

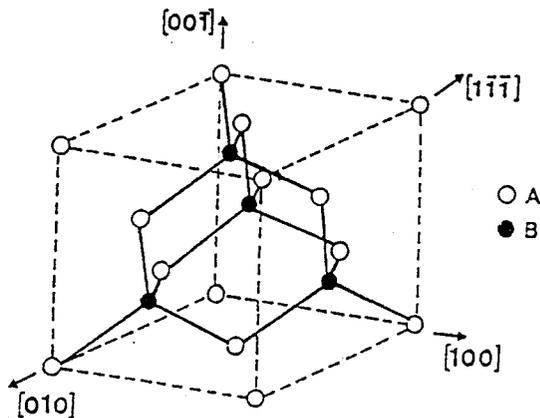


Figure I-1: Maille élémentaire de la structure Diamant.

Ce motif confère aux semiconducteurs III-V et II-VI un caractère non centrosymétrique. Le vecteur de Burgers des dislocations parfaites les plus probables correspond à la plus petite translation du réseau, soit, dans les structures cfc, $b = a/2\langle 110 \rangle$. Les plans de glissement correspondent aux plans cristallographiques les plus denses, c'est-à-dire les plans de type $\{111\}$.

A basse température, les dislocations sont soumises à des forces de Peierls qui confinent les lignes dans les directions $\langle 110 \rangle$. Ainsi, les dislocations les plus fréquemment observées sont:

- les dislocations '60°', dont la ligne forme un angle de 60° avec le vecteur de Burgers,
- les dislocations vis pour lesquelles le vecteur de Burgers est parallèle à la ligne de dislocation

Ainsi, les boucles de dislocations possèdent schématiquement une forme hexagonale comme le montre la figure I-2.

Dans la direction $[111]$, l'empilement des plans s'effectue selon la séquence indiquée sur la figure (I.3). Le demi plan supplémentaire d'une dislocation 60° peut donc se terminer soit entre deux plans successifs éloignés, soit entre des plans successifs proches, donnant alors lieu à deux configurations de coeur différentes respectivement appelées configuration 'shuffle' et configuration 'glide'. Dans la configuration shuffle, chaque atome de coeur d'une dislocation 60° ne possède qu'une liaison non appariée (une orbitale pendante) alors que dans la configuration 'glide', les atomes de coeur possèdent trois orbitales pendantes.

Dans les structures non centrosymétriques, selon le signe du vecteur de Burgers, les atomes de coeur des dislocations parfaites à caractère coin sont soit de type III (II) soit V(VI). Ce point est illustré par la figure I-4 qui représente deux dislocations parfaites de vecteur de Burgers opposés dans la configuration shuffle.

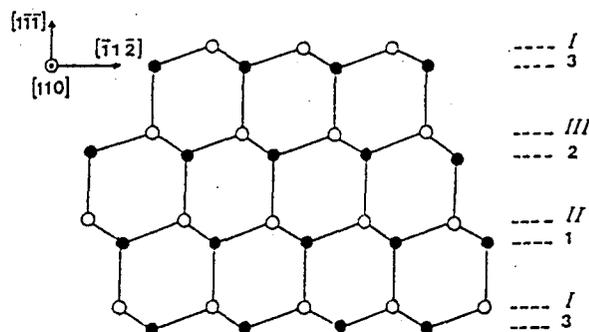


Figure I-3: Structure diamant en projection sur le plan (110) .

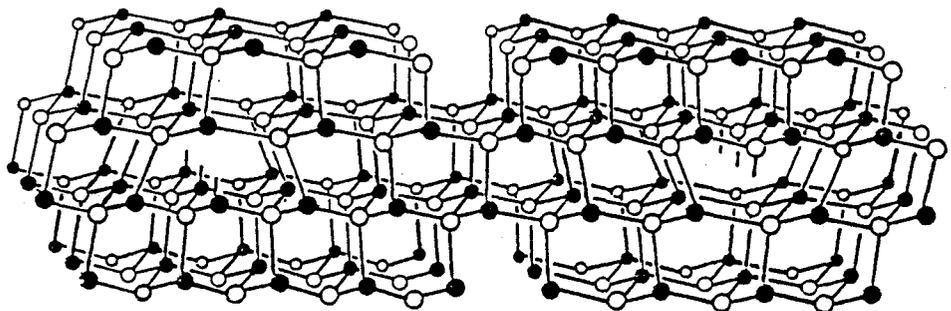


Figure I-4: Dislocations à 60° de signes opposés dans la structure sphalérite.

La dissociation des dislocations dans ces semiconducteurs a fait l'objet de plusieurs études théoriques dont les principaux résultats sont les suivants:

-selon Hornstra [1], une dislocation de type shuffle se décompose en une partielle glissile et une partielle sessile puisque son mouvement nécessite des déplacements élémentaires d'atomes ('shuffling'),

-selon Hirth et Lothe [2], une dislocation de type glide se décompose en deux partielles glissiles.

Dans tous les cas, les dislocations '60°' se dissocient en deux dislocations partielles bordant une faute d'empilement. L'une de ces partielles est caractérisée par un angle de 30° entre le vecteur de Burgers et la ligne, l'autre par un angle de 90°. Les dislocations vis sont formées de deux partielles de 30°. La figure I-5 représente la dissociation d'une boucle hexagonale.

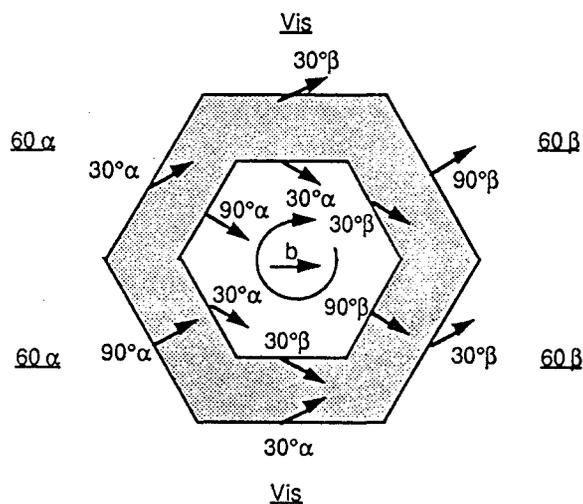


Figure I-5: boucle hexagonale de dislocations dissociées en structure 'glide' projetée sur le plan (111).

L'observation en microscopie électronique en transmission du mouvement de dislocations même lorsqu'elles sont dissociées [3], indique que la configuration glide est plus probable que la configuration shuffle.

II. Niveaux d'énergie profonds associés aux coeurs des dislocations.

Quel que soit le type de configuration glide ou shuffle, la dissociation des dislocations conserve le nombre de liaisons pendantes. La présence de

ces liaisons non appariées (ou au plus engagées dans les liaisons covalentes deuxième voisines') au coeur des dislocations devrait se traduire par l'existence d'une bande d'énergie unidimensionnelle située dans la bande interdite du semiconducteur (Shockley 1953 [4]). Dans le cadre de l'approximation moléculaire et dans le cas de GaAs par exemple, l'énergie propre de ces états, (soit encore les états d'énergie α_a et α_b) est a priori située entre les états liants (E_L) et antiliants (E_{AL}) de la 'molécule' GaAs respectivement donnés par

$$E_{L,AL} = \frac{(\alpha_a + \alpha_b)}{2} \pm \left[\frac{(\alpha_a + \alpha_b)^2}{4} + \beta^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (I-2.1)$$

où α_a et α_b sont les valeurs propres des orbitales hybrides sp^3 associées respectivement aux atomes A ou B et où β est l'intégrale de résonance entre deux orbitales hybrides premières voisines pointant l'une vers l'autre. Les limites de bande de la bande de valence et de la bande de conduction peuvent être calculées par rapport aux positions (moyennes) des états liants et antiliants (1.2.1) trouvés dans le cadre de l'approximation moléculaire. Farvacque et al [5] ont montré dans ce cadre et en négligeant la reconstruction des liaisons pendantes associés aux atomes de coeur des dislocations, que dans la configuration shuffle, une bande unidimensionnelle partiellement pleine pouvait exister dans la bande interdite de GaAs, alors qu'on en trouve deux dans le cas de la configuration glide et ceci pour chaque type Ga ou As de dislocation. La position de ces bandes d'énergie dépend du type de la dislocation et de la nature du coeur. Des calculs ab-initio, (clusters) ont été effectués (Oberg [6], Jones [7], Jones et al [8]) dans le cas de dislocations parfaites et de dislocations partielles et montrent sans ambiguïté que les coeurs de dislocation sont reconstruits (transition de Peierls) et conduisent en quelque sorte à une séparation des bandes partiellement pleines (métalliques) trouvées dans les calculs [5] en des bandes complètement pleines ou vide (bandes semiconductrices). Cependant la grande diversité des résultats théoriques ne permet pas de se faire une opinion précise quant à la nature ni à la position des bandes réellement associées aux dislocations. Bien qu'il ait été montré plus récemment par Jones et al [9], par des méthode de densités locales, compte tenu de la reconstruction du coeur, que la partielle As(g) (dislocation '60° α '),

introduirait un niveau piège à électrons situé à 0,5 eV au dessous de la bande de conduction, alors que la partielle Ga(g) (dislocation '60°β'), posséderait un niveau piège à trous situé à 0,5 eV au dessus de la bande de valence.

Du point de vue expérimental, l'existence de niveaux extrinsèques associés aux dislocations a pu être mise en évidence par

- DLTS (Wosinski et Figiecki [10]) qui indique la présence d'un niveau piège situé à $E_c - 0,68$ eV associé à la dislocation α dans le cas d'échantillons plastiquement déformés, ainsi que l'existence probable d'un niveau piège à trous situé à $E_v + 0,37$ eV associé à la dislocation β .

- par des mesures de transport électrique (Gerthsen 1986 [11], Ferré et Farvacque 1990 [12]), qui décèlent une réduction de la densité de porteurs libres aussi bien dans des échantillons de type n et p déformés plastiquement. Cette réduction est compatible avec l'existence de deux familles de bandes ou de centres profonds respectivement situées vers le milieu de la bande interdite et au voisinage de la bande de valence.

- par des mesures d'absorption optique (Vignaud et Farvacque 1989 [13,14]) qui mettent en évidence la présence de champs électriques internes (effet Franz-Keldysh) que ces auteurs ont associé à la présence d'une charge électrique portée par les lignes de dislocations, autrement dit par la présence de bandes pièges.

En résumé, l'ensemble des résultats est compatible avec l'existence d'une famille de niveaux profonds situés vers le milieu (ou la partie supérieure) de la bande interdite et d'une famille de niveaux situés au voisinage de la bande de valence. Ces mesures expérimentales ne permettent cependant pas de déterminer la nature des dislocations respectivement associées à ces familles de niveaux profonds ni même de préciser si les bandes unidimensionnelles sont de caractère métallique ou semiconducteur.

Dans ce qui suit, nous postulons que les dislocations introduisent des niveaux profonds dans la bande d'énergie interdite de GaAs, mais nous considérons que leur nature (métallique ou semiconductrice) ainsi que leur positions dans la bande interdite, sont des paramètres à déterminer éventuellement par l'exploitation quantitative des contrastes observés dans

les expériences d'injection de porteurs, dont l'analyse fait l'objet du présent mémoire.

III. Statistique d'occupation des niveaux associés aux dislocations.

Selon le type de dopage du matériau semiconducteur et en fonction de la position du niveau de Fermi dans le gap, les niveaux extrinsèques associés aux dislocations se remplissent soit d'électrons soit de trous et transforment la dislocation en une ligne chargée provoquant bien évidemment une réponse diélectrique du matériau, c'est à dire un écrantage des champs électriques créés par la densité linéaire de charge portées par la dislocation. Compte tenu de la proximité des centres pièges de la dislocation (élargis en une bande unidimensionnelle) les charges portées par la dislocation et les charges d'écran interagissent électrostatiquement et conduisent à une augmentation $W(n)$ de l'énergie libre du cristal où n est le nombre de porteurs en excès par rapport à la dislocation neutre. La statistique d'occupation de la dislocation est déterminée par le minimum de l'énergie libre et dépend donc de cette quantité $W(n)$ contrairement aux statistiques traditionnelles décrivant le taux d'occupation d'impuretés considérées comme indépendantes. Si l'on suppose que la bande associée à la dislocation est relativement étroite et centrée autour de E_D , L'accroissement ΔF correspondant au piègeage de $n+n_0$ électrons sur les D sites d'une dislocation est donné par

$$\Delta F = (n + n_0)(E_D - E_F) + W(n) - kTLn[\Omega(n + n_0)] \quad (1.3.1)$$

où le nombre de configurations est donné par

$$\Omega(n) = C_D^{n+n_0} = \frac{D!}{(n + n_0)!(D - n - n_0)!} \quad (1.3.4)$$

n_0 est la densité d'électrons correspondant à l'état neutre de la dislocation. E_D et E_F sont respectivement le niveau neutre de la dislocation et le niveau de Fermi.

En introduisant cette dernière expression dans la précédente, puis en minimisant par rapport à la variable $n+n_0$, on trouve, compte tenu des deux valeurs de spin possibles

$$n = 2D \left[\frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_D + W'(n) - E_F}{kT}\right]} \right]^{-\chi} \quad (1.3.2)$$

où $W'(n)$ est la dérivée par rapport à n de l'énergie d'interaction électrostatique et où l'on a introduit le taux d'occupation de la dislocation neutre $\xi = n_0/2D$. Cette dernière quantité vaut zéro pour une bande vide, 1 pour une bande pleine et est une fraction comprise entre zéro et 1 pour une dislocation partiellement pleine.

Le potentiel électrique créé par la densité de charge écrantée portée par la dislocation se traduit par un déplacement des niveaux d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction, comme le montre la figure 1-6.

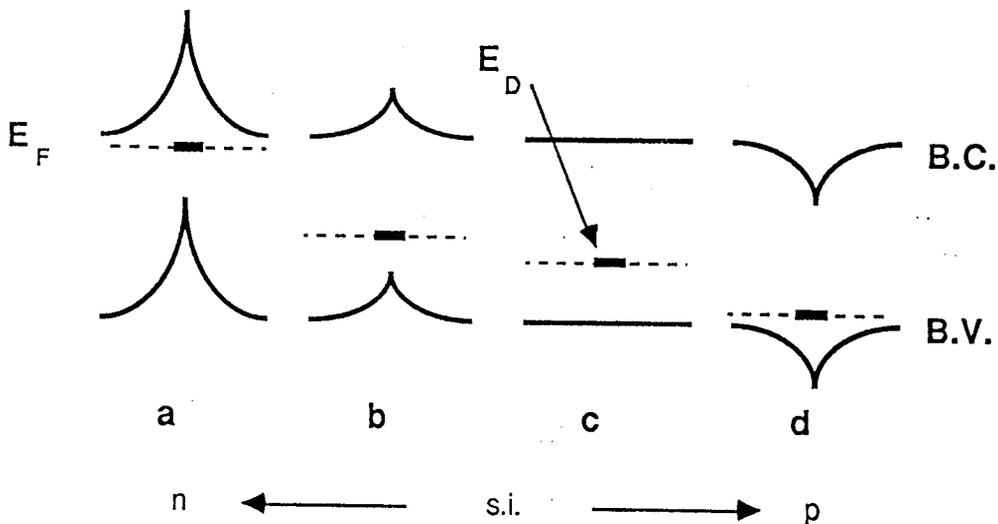


Figure 1-6: Diagramme d'énergie au voisinage d'une dislocation
 a) chargée négativement b) électriquement neutre c) chargée positivement.

La description des mécanismes d'écrantage est fondamentale dans la détermination de la fonction d'occupation des niveaux d'énergie de la dislocation. Cet écrantage peut être réalisé, soit par une redistribution des porteurs libres au voisinage de la dislocation chargée, soit par une modification locale du taux d'ionisation des impuretés. Dans la suite, nous rappelons brièvement les différents modèles couramment utilisés dans la littérature

III.1. Modèle de la zone déserte (Read [15])

Le potentiel associé à la dislocation est supposé suffisamment grand pour que, dans l'approximation du déplacement rigide des états d'énergie, les états associés aux impuretés de dopage soient très éloignés du niveau de Fermi. De façon analogue à l'étude de la diode Schottky, on suppose qu'à l'intérieur d'un cylindre de rayon R, toutes les impuretés sont ionisées et le rayon du cylindre d'écran est déterminé par la condition de neutralité globale du défaut

$$\pi R^2 (N_D - N_A) = \frac{n}{D} \quad (I.3.5)$$

où N_D et N_A sont les concentrations d'impuretés de type donneur et accepteur dans le matériau, n/bD est le nombre d'électrons piégés par unité de longueur de dislocation. Dans ce modèle l'énergie d'interaction électrostatique entre porteurs piégés est donnée par [15]:

$$W(n) = \frac{n^2 e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_l D} \left[\text{Ln}\left(\frac{R}{b}\right) - 0.866 \right] \quad (I.3.6)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide et ϵ_l est la permittivité relative, b est le vecteur de Burgers.

III.2. Ecrantage par les porteurs libres.

Ce formalisme, initialement proposé par Labusch et Schröter [16] tient compte de la modification de la répartition des porteurs libres provoquée par la charge piégée sur la dislocation. Ce type d'écrantage est typiquement lié à la réponse diélectrique électronique associée aux porteurs libres. Ce mécanisme a été reconsidéré dans le cadre du formalisme de la fonction diélectrique et une formulation plus générale a été proposée par Masut Farvacque et Penchina [17], conduisant dans l'approximation linéaire de l'équation de Poisson à l'évaluation de l'énergie d'interaction donnée par

$$W(n) = \frac{n^2 e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_l D} \left[\text{Ln}\left(\frac{\lambda_G}{b}\right) - 0.5 \right] \quad (I.3.7)$$

où λ_G , représente une longueur d'écran généralisée donnée par

$$\frac{1}{\lambda_G^2} = \frac{ne^2}{\epsilon_L \epsilon_0 kT} \left[\sum_k n_k + \sum_m p_m + \sum_A \frac{N_A^- (N_A - N_A^-)}{N_A} + \sum_D \frac{N_D^+ (N_D - N_D^+)}{N_D} \right]$$

Cette dernière formulation généralise l'expression donnée par Labusch et Schröter au cas d'une réponse diélectrique associée à la fois à la réponse des porteurs libres, mais également à une extra-ionisation des impuretés de dopage. Cependant, elle correspond au cas où le potentiel créé par la dislocation est faible devant kT , c'est-à-dire, en pratique au cas où les dislocations créent des bandes d'énergie proches du niveau de Fermi. Le cas général ne possède aucune solution analytique et a été traité par Ferré, Diallo et Farvacque [18] en résolvant numériquement l'équation de Poisson, dans l'approximation du déplacement rigide des bandes.

Bibliographie du chapitre I

- [1]: J. Hornstra *J. Phys. Chem. Sol.* **5**, 129, (1958).
- [2]: J.P. Hirth and J. Lothe. "Theory of dislocations" Mc Graw Hill New York (1968).
- [3]: A. Gomez, D.J.H. Cockane and V. Viteck. *Phil. Mag*, **31**, 105, (1975).
- [4]: W. Shockley, *Phys. Rev.* **91**, 228, (1953).
- [5]: a- J.L. Farvacque and D. Ferre. *Rev. Phys. Appl.* **15**, 33, (1980).
b- J.L. Farvacque, D. Ferre and P. Lengart. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **59**, 389, (1980).
- [6]: S. Öberg . *Phys. Stat. Sol.* **b89**, K127, (1978).
- [7]: R. Jones. *Phyl. Mag.* **39**, 21, (1978).
- [8]: R. Jones, R. Oberg and S. Marklund. *Phil Mag.* **B43**, 839, (1981).
- [9]: R. Jones, A. Umerski, P. Sith, P. Heggie and S. Öberg. *Phys. Stat. Sol(a)*, **137**, 389, (1993).
- [10]: T. Wosinski and T. Figieski, *Acta. Phys. Polan. A* **83**, 51, (1993).
- [11]: D. Gerthsen, *Phys. Stat. Slo(a)*, **97**, 527, (1986).
- [12]: D. Ferré and J.L. Farvacque, *R.P.A.* **25**, 353, (1990).
- [13] D. Vignaud and J.L. Farvacque, *J. Appl. Phys*, **87**, 281, (1989).
- [14] D. Vignaud and J.L. Farvacque, *J. of Appl. Phys*, **65**, 1516, (1989).
- [15]: W. T. Read. *Phil. Mag.* **45**, 775, (1954).
- [16]: R. Labush and W. Schrötter. *Collective treatise on dislocations. Ed by FNR Nabarro. Vol. 5* 127, (1980).
- [17]: R. Masut, C.M. Penchina, J.L. Farvacque. *J. App. Phys.* **53**, 7,4864, (1982).
- [18]: D. Ferre., A. Diallo. et J.L. Farvacque., *Revue. Phys. Appl.*, **25**, 177, (1990).

Chapitre II

E.B.I.C

Cathodoluminescence

I. Introduction:

Il existe plusieurs techniques d'injection de porteurs qui créent à l'aide d'une source extérieure, des paires électron-trou dans un semiconducteur. Cette source peut être soit un faisceau d'électrons: c'est le cas des techniques de courant induit (E.B.I.C: Electron Beam Induced Current) et cathodoluminescence (CL), soit un faisceau de photons: c'est le cas des techniques L.B.I.C (Light Beam Induced Current) et PL (photoluminescence).

Différents processus de recombinaison des porteurs libres, sont possibles pour ramener le système à son état d'équilibre thermodynamique: soit la recombinaison bande à bande, soit la recombinaison par l'intermédiaire de niveaux profonds.

On peut ensuite distinguer les processus de recombinaison suivant le mode de dissipation de l'énergie au moment de la désexcitation de l'électron du niveau supérieur au niveau inférieur. Dans le cas d'une recombinaison radiative, l'énergie est évacuée par (figure II-1):

- émission d'un photon (cas des dispositifs électroluminescents) si le semiconducteur est à gap direct.
- émission d'un photon assisté par un phonon si le semiconducteur est à gap indirect.

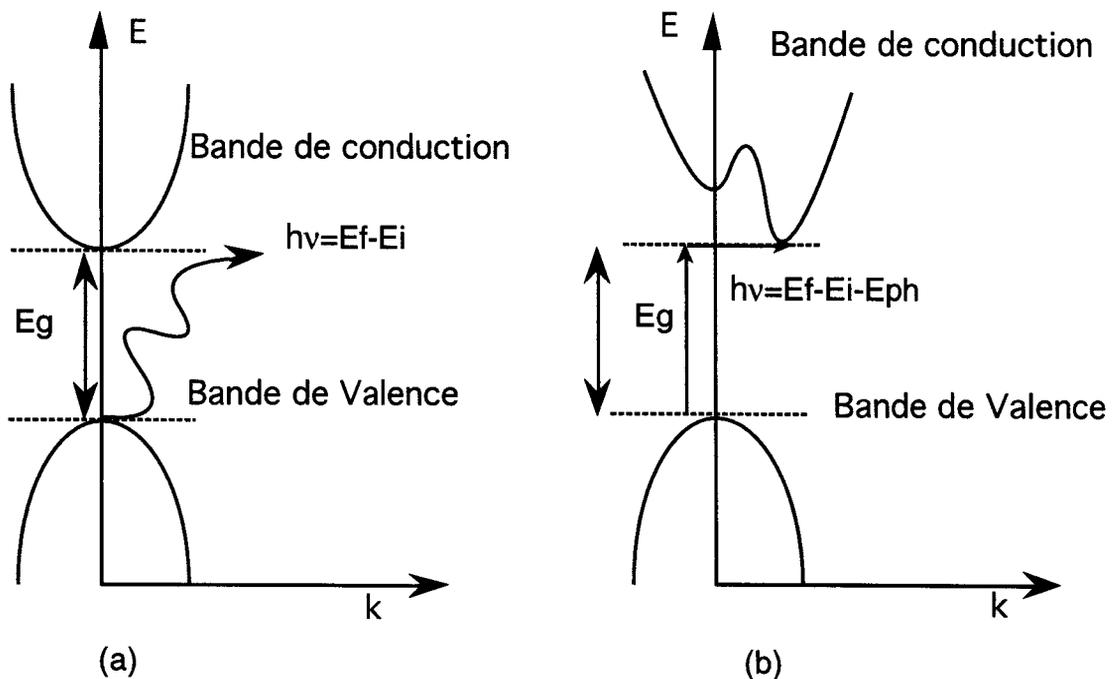


Figure II-1: Transitions radiatives directe (a) et indirecte (b).

Dans le cas non radiatif, l'énergie récupérée sert à exciter des modes de vibration du réseau (émission de phonons) et se dégrade en chaleur. Lors d'une recombinaison Auger, l'énergie est transférée à un électron ou un trou qui se trouve expédié sur un niveau supérieur de la bande de conduction ou inférieur de la bande de valence.

En général plusieurs processus de recombinaison entrent en compétition dans un même matériau. Dans le cas par exemple de GaAs, le type de recombinaison dominant est une recombinaison bande à bande radiative, avec une durée de vie de l'ordre de 10^{-8} s. La longueur d'onde des photons émis se situe dans le proche infrarouge ($\lambda=0,8 \mu\text{m}$).

Remarque: Les signaux CL et PL sont des concentrations de photons, alors que les signaux E.B.I.C et L.B.I.C sont des courants de porteurs de charge minoritaires.

Les techniques E.B.I.C et CL sont des techniques d'analyse locale des propriétés électroniques et optiques d'un matériau semiconducteur. En plus, elles sont simples d'utilisation et non destructives.

I.1. Interaction électron matière:

Au cours de leur progression dans le matériau, les électrons incidents subissent deux types de collisions (figure II-2):

i- Des collisions élastiques avec les noyaux des atomes provoquent des déviations successives des trajectoires électroniques. Ces collisions sont à l'origine d'électrons rétrodiffusés. Les électrons rétrodiffusés sont responsables de l'élargissement latéral du faisceau électronique dans le matériau qui peut atteindre un micron. Ce phénomène de rétrodiffusion constitue malheureusement une limitation inévitable de la résolution spatiale des techniques basées sur l'excitation par un faisceau électronique.

ii- Des collisions inélastiques: elles sont du type électrons incidents-électrons de coeur ou, électrons incidents-électrons de valence. Dans le premier cas, les électrons des couches profondes K,L, sont éjectés. La désexcitation des atomes ainsi ionisés se fait par transition d'un électron d'une couche superficielle vers le niveau ionisé. L'énergie correspondant à cette transition peut être libérée soit par émission d'un photon X (principe de

fonctionnement de la microanalyse X), soit par éjection d'un autre électron d'une couche supérieure: c'est le processus de l'émission Auger.

Les collisions électrons incidents-électrons de valence mettent en jeu des transferts d'énergie nettement plus faible. Les électrons produits constituent l'émission électronique secondaire. Compte tenu de leur faible énergie (≤ 50 eV), seuls les électrons secondaires produits près de la surface peuvent la quitter. Enfin, l'interaction avec le champ coulombien du matériau provoque un freinage continu des électrons incidents. Cette perte d'énergie cinétique est à l'origine du rayonnement X continu.

Les collisions inélastiques sont à l'origine de la création de paires électron-trou dans un semiconducteur, qui est un processus indispensable dans la génération des signaux E.B.I.C et CL.

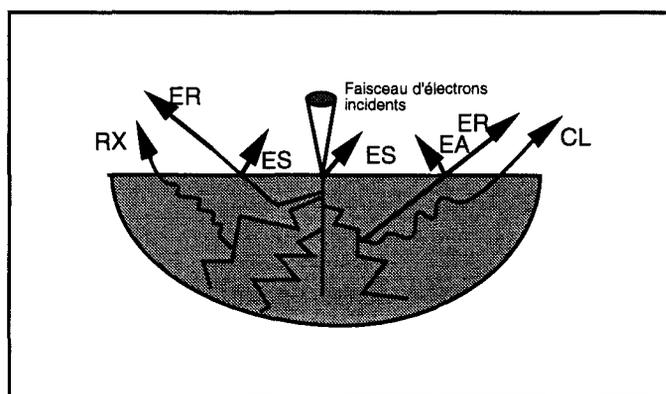


Figure II-2: Divers signaux émis résultant de l'interaction électron-matière
 RX: rayons X; ER: électrons rétrodiffusés; ES: électrons secondaires;
 EA: électrons Auger; CL: cathodoluminescence

1.2.Perte d'énergie, parcours électronique.

Bethe a exprimé en 1933 [1] et ce pour la première fois, la perte d'énergie d'un faisceau électronique d'énergie E par unité de distance parcourue sous la forme suivante:

$$\frac{dE}{dz} = -2\pi N_A e^4 \frac{z\rho I}{aE} \ln\left(\frac{aE}{J}\right).$$

A: masse atomique du matériau.

N_A : Nombre d'Avogadro.

$a=2$ (selon Bethe).

J: Le potentiel moyen d'excitation, caractérisant l'ensemble des interactions inélastiques. $J(\text{keV})=11,5 \cdot 10^{-3}z$

Selon Berger et Seltzer, $J(\text{keV})= (9,76z+58,5z^{-0,19})10^{-3}$.

La connaissance de la fonction perte d'énergie est importante pour la détermination de la profondeur de pénétration des électrons incidents dans le matériau.

La profondeur de pénétration des électrons incidents est définie comme étant la distance parcourue par un électron d'énergie initiale E et final 0 :

$$R_e(\text{cm}) = \int_0^E \frac{1}{\frac{dE}{dz}} dE$$

Une expression empirique de la profondeur de pénétration est de la forme:

$$R_p = \frac{\alpha E^n}{\rho}$$

où ρ est la densité du matériau, α et un paramètre dépendant du numéro atomique du matériau et n est une constante.

La première expression de R_p , fut établie en 1956 par Gruen [2]:

$$R_{pG} = \frac{4,57 \cdot 10^{-6} E^{1.75}}{\rho}$$

ρ est la densité du cristal (g/cm^3), E est la tension d'accélération du faisceau en keV, R_{pG} est en cm. Cette expression a été ensuite améliorée par Everhart et Hoff [3] :

$$R_{pEH} = \frac{4 \cdot E^{1.75}}{\rho 100}$$

(R en microns)

On peut également citer d'autres expressions:

Kanaya et Okayama [4] :

$$R_{pKO} = \frac{0.0276 AE^{1.67}}{\rho Z^{\frac{8}{9}}}$$

(Z est le numéro atomique, et A est la masse atomique) .

Wu et Wittry [5]:

$$R_{pW} = \frac{25.6 \left[\frac{E}{30} \right]^{1.7}}{\rho}$$

Dans le cas de GaAs, $\rho=5.36 \text{ g/cm}^3$, $Z=32$ et $A=72.32$.

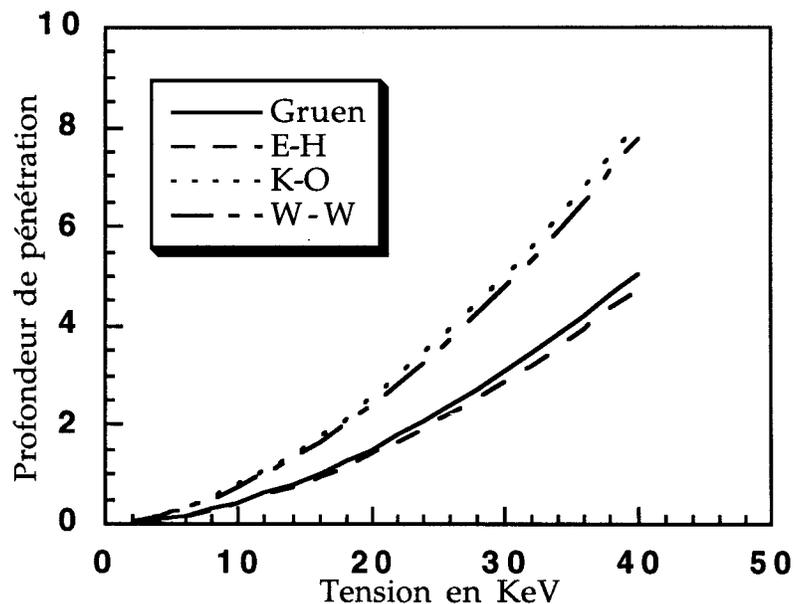


Figure II-3: profondeurs de pénétration selon les différents auteurs
 E-H: Everhart et Hoff, K-O: Kanaya et Okayama, W-W:Wu et Wittry

La figure II-3 représente les profondeurs de pénétration calculées selon les expressions ci-dessus. On remarque qu'il existe une grande différence entre les profondeurs de pénétrations calculées par Wu et Wittry et Kanaya d'une part et par Gruen et Everhart et Hoff d'autre part.

II. Techniques expérimentales

II.1. Diode de Schottky:

Une diode de Schottky est une jonction métal-semiconducteur à caractère redresseur; les propriétés du contact métal-semiconducteur dépendent, en absence de tout piège de surface, du travail de sortie du métal W_m et de celui du semiconducteur W_s (modèle de Schottky). Lorsque le contact est établi (figure II-4), les niveaux de Fermi s'ajustent; en effet si $W_m > W_s$ les électrons passent du semiconducteur dans le métal et le système est en équilibre quand les niveaux de Fermi sont alignés.

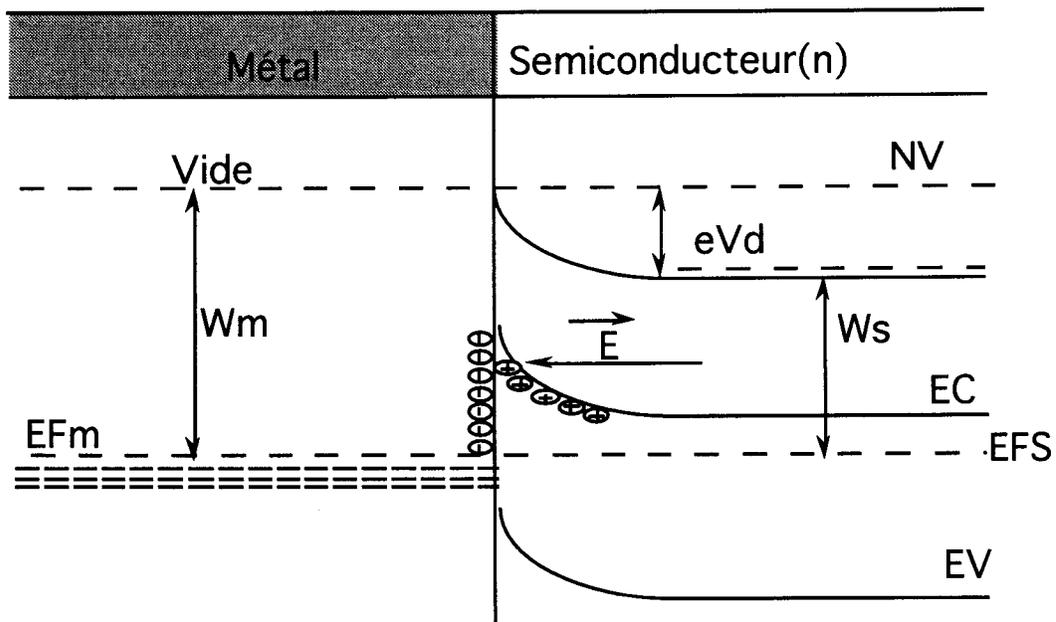


Figure II-4: contact métal-semiconducteur (n) avec $W_m > W_s$, à l'équilibre thermodynamique.

Avec un semiconducteur de type n, une zone de déplétion positive se crée car les ions donneurs ionisés N_d^+ ne sont plus compensés par les électrons. La distance bande de conduction-niveau de Fermi traduit la population électronique. Comme cette distance est plus grande au voisinage de l'interface que dans la région neutre du semiconducteur, il en résulte une courbure des bandes vers le haut.

Dans la zone de charge d'espace apparaît un champ électrique E maximum à l'interface métal-semiconducteur, nul en bas de zone de charge d'espace et dirigé vers le métal (cas de semiconducteur de type n). Les paires électron-trou générées par le faisceau dans la zone de charge d'espace ou qui y arrivent par diffusion sont séparées par le champ électrique.

Les porteurs majoritaires sont repoussés et évacués par le contact ohmique, alors que les porteurs minoritaires sont attirés vers l'interface du contact Schottky, constituant ainsi le courant E.B.I.C. Ce courant, une fois amplifié va moduler point par point le balayage de l'écran cathodique du MEB, donnant lieu à une image E.B.I.C. Nous disposons dans notre laboratoire d'un amplificateur réalisé dans notre laboratoire [6] de très hautes performances. En effet, il permet de mesurer des courants variants de 10^{-3} A à 10^{-11} A et de détecter des contrastes inférieurs à 0,3%. Une diode de Schottky est caractérisée par la zone déserte ou la zone de charge d'espace Z_{CE} située sous la surface dont le module est inversement proportionnel à la racine carré du dopage.

$$Z_{CE} = \sqrt{\frac{2\epsilon_s(V_d \pm V)}{q(N_d - N_a)}} \quad [7]$$

q est la charge élémentaire, V_d est la tension de diffusion., N_d et N_a sont respectivement la concentration de donneurs d'accepteurs et $\pm V$ est la tension de polarisation de la diode, elle permet d'augmenter ou de diminuer la largeur de la zone.

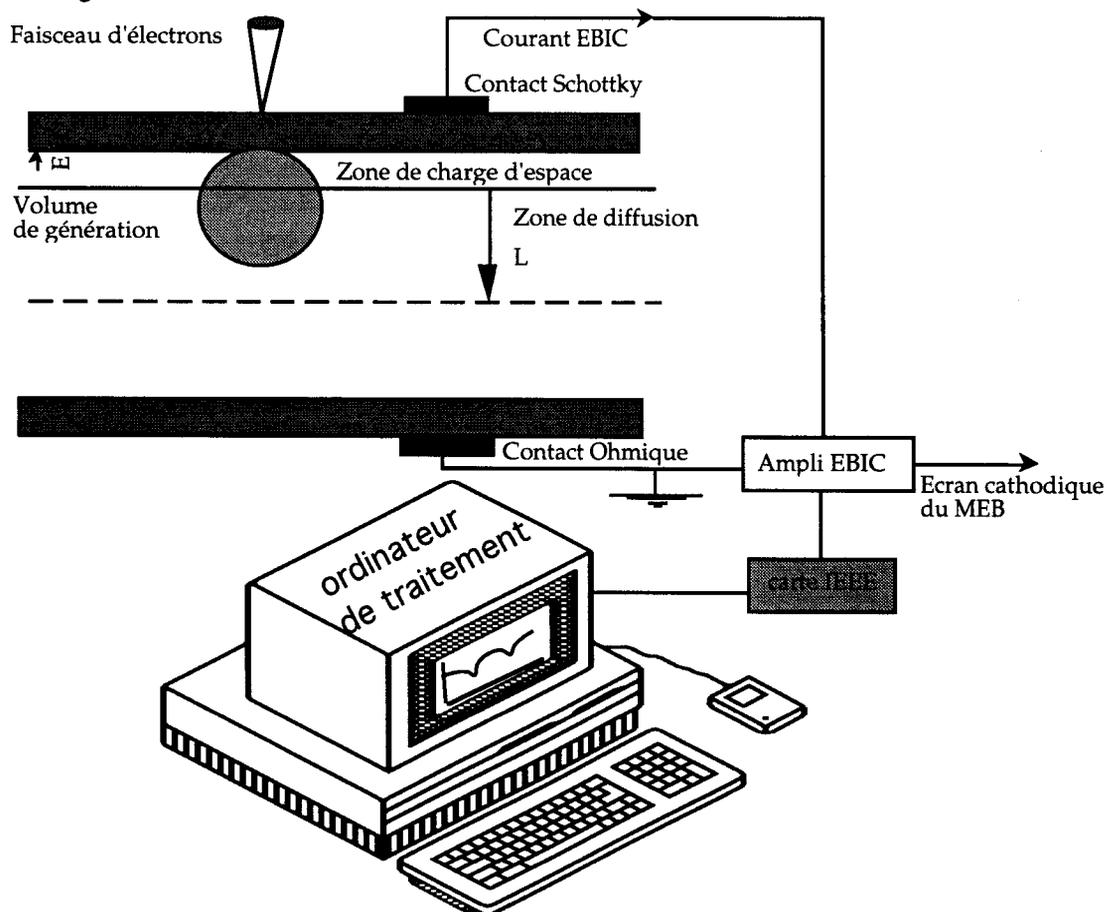


Figure II-5: Dispositif expérimental de la technique E.B.I.C

II.2. Caractérisation d'un semiconducteur en mode E.B.I.C:

La dénomination E.B.I.C est utilisée pour décrire le processus de collecte par une jonction, des porteurs de charge minoritaires en excès créés par un faisceau électronique. C'est un effet électrovoltaïque dont le principe est le suivant: le faisceau électronique en pénétrant dans le matériau crée des paires électron-trou dans un certain volume appelé volume de génération.

Les électrons et les trous en excès créés par ionisation par impact, après thermalisation rapide (10^{-11} s) en bord de bande, deviennent indiscernables des porteurs libres à l'équilibre. En absence de tout champ électrique, ces porteurs en excès ont un mouvement de diffusion pure. La distance qu'ils parcourent ou longueur de diffusion est donnée par :

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} * \tau_{n,p}}$$

où $D_{n,p}$ est le coefficient de diffusion des électrons (trous) et $\tau_{n,p}$ est la durée de vie des électrons (trous).

Pour une diode de Schottky ou une jonction p-n, la présence du champ électrique perturbe le mouvement des porteurs en excès. Le champ électrique sépare les paires électron-trou et permet la collecte des porteurs en excès créés dans la zone désertée, ainsi que ceux créés à une longueur de diffusion du bas de la zone de charge d'espace. Ces porteurs donnent lieu à un courant dans un circuit extérieur.

La méthode E.B.I.C est une technique bien adaptée à la mesure locale ($1\mu\text{m}^3$) de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires et du dopage local du semiconducteur. Ces paramètres peuvent être déterminés à partir de géométries diverses d'échantillons (jonction p-n parallèle au faisceau, jonction pn-perpendiculaire au faisceau etc. [8]), mais la forme la plus utilisée est celle proposée par Wu et Wittry [5], qui consiste à faire varier l'énergie d'un faisceau incident fixe, perpendiculaire à la surface à étudier. La jonction p-n peut servir de contact collecteur pour les porteurs minoritaires; on peut également préparer une diode de Schottky sur la surface du semiconducteur.

II.3. Expression théorique du courant induit:

Afin de déterminer l'expression du courant induit, il est nécessaire de connaître les équations différentielles qui régissent le comportement des porteurs minoritaires. Sous l'effet du champ électrique et du phénomène de diffusion, la densité du courant total s'écrit:

$$\vec{j} = \vec{j}_{cond} + \vec{j}_{diff} \quad (II.2.1)$$

\vec{j}_{cond} est la densité de courant de conduction et \vec{j}_{diff} est la densité de courant de diffusion.

Soit:

$$\vec{j}_n = \underbrace{e\mu_n \Delta n \vec{E}}_{conduction} + \underbrace{eD_n grad(\Delta n)}_{diffusion} \quad (II.2.2)$$

pour les électrons

et

$$\vec{j}_p = \underbrace{e\mu_p \Delta p \vec{E}}_{conduction} - \underbrace{eD_p grad(\Delta p)}_{diffusion} \quad (II.2.3)$$

pour les trous.

A) Equation de continuité:

L'évolution d'une population au cours du temps se traduit par une naissance (ou génération), un flux de migration (diffusion) et une disparition (recombinaison). En régime stationnaire ce mécanisme se traduit par l'équation suivante:

$$div \vec{j} + g(\vec{r}) - R = 0 \quad (II.2.4)$$

\vec{j} est la densité de courant total, $g(\vec{r})$ est la fonction de génération et R est le taux de recombinaison: c'est la densité de porteurs au point r qui se recombinent par unité de temps.

En régime de faible injection où la densité de porteurs minoritaires Δp est faible par rapport à la densité de porteurs majoritaires à l'équilibre (n_0), la recombinaison est contrôlée par les porteurs minoritaires (trous). Le taux de recombinaison R_p , peut se mettre sous la forme suivante:

$$R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}, \tau_p \text{ est la durée de vie des trous.}$$

L'équation de continuité devient:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial \Delta p(\vec{r})}{\partial t} = g(\vec{r}) - \frac{\Delta p(\vec{r})}{\tau_p} - \mu_p \vec{E} \text{grad}[\Delta p(\vec{r})] \\ - \mu_p \Delta p(\vec{r}) \text{div} \vec{E} + D_p \text{divgrad}[\Delta p(\vec{r})] \end{aligned}} \quad (II.2.5)$$

En régime stationnaire et en absence de champ électrique cette équation devient:

$$\boxed{D_p \text{divgrad}[\Delta p(\vec{r})] - \frac{\Delta p(\vec{r})}{\tau_p} = -g(\vec{r})} \quad (II.2.6)$$

B) Résolution de l'équation de continuité dans le cas d'une diode Schottky perpendiculaire au faisceau:

Dans ce cas, compte tenu de la symétrie cylindrique du système, l'équation (6) peut dans la zone de diffusion, être réduite à une dimension. Pour cela nous avons utilisé le modèle de Wu et Wittry dont les hypothèses sont les suivantes [9]:

- i-Le volume du matériau est homogène.
- ii-Les électrons incidents perdent leur énergie dans la couche métallique sans création de paires électron-trou.
- iii-Les porteurs générés dans la zone de charge d'espace de la diode, sont collectés avec une efficacité de 100%.
- iiii-Le mouvement des paires est purement diffusionnel dans le matériau massif.

L'équation (6) devient à une dimension:

$$\boxed{\frac{D_p d^2 \Delta p(z)}{d^2 z} - \frac{\Delta p(z)}{\tau_p} = -g(z)} \quad (\text{II.2.7})$$

Les conditions aux limites, sont les suivantes (figure II-6):

$-\Delta p(z=z_d)=0$ car il y a collecte totale des porteurs minoritaires par la zone de charge d'espace.

$-\Delta p(z=\infty)=0$.

Comme $L^2=D_p\tau_p$ l'équation (7) peut également s'écrire:

$$\boxed{\frac{d^2 \Delta p(z)}{d^2 z} - \frac{\Delta p(z)}{L_p^2} = \frac{-g(z)}{D_p}} \quad (\text{II.2.8})$$

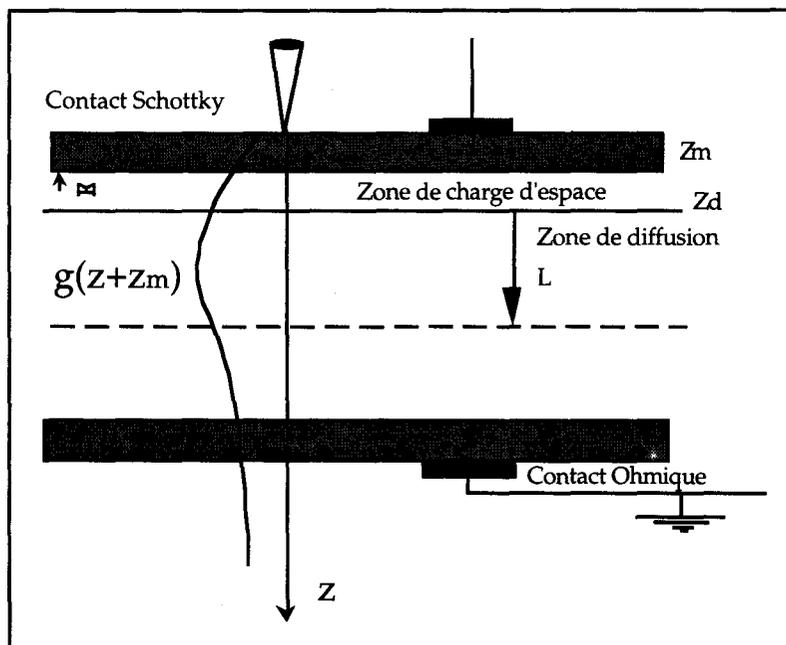


Figure II-6: configuration de la diode Schottky

La résolution de cette équation conduit à une expression intégrale de $\Delta p(z)$:

$$\boxed{\Delta p(z) = \frac{L_p}{2D_p} \int_{z_d}^{\infty} \left\{ \exp\left(-\frac{|z-z'|}{L_p}\right) - \exp\left(-\frac{z+z'}{L_p}\right) \right\} g(z') dz'} \quad (\text{II.2.9})$$

Le courant collecté par la zone de charge d'espace provenant de la zone de diffusion est:

$$I_B = -eD_p \left. \frac{d\Delta p(z)}{dz} \right|_{z=z_d} \quad (II.2.10)$$

Le courant dans la zone de charge d'espace s'écrit:

$$I_D = -e \int_0^{z_d} g(z) dz \quad (II.2.11)$$

II.4. Génération de paires électron-trou:

II.4.1 Energie d'ionisation:

On définit l'énergie E_{e-h} d'ionisation ou de formation d'une paire électron-trou par [10] : $E_{e-h} = E_g + \langle E_R \rangle + \langle E_k \rangle$.

- E_g est l'énergie du gap du semiconducteur.

- $\langle E_R \rangle$ est l'énergie moyenne associée à la génération de phonons optiques.

- $\langle E_k \rangle$ est l'énergie cinétique résiduelle dissipée au cours du processus de thermalisation en bord de bande (en 10^{-11} s), des porteurs générés.

$\langle E_R \rangle = r h \omega$ (r est le nombre moyen de photons optiques générés).

$\langle E_k \rangle = 9/5 E_g$ (d'après [11]).

On obtient finalement $E_{e-h} = 14/5 E_g + r h \omega$. $r h \omega$ est un paramètre d'ajustement et est quasiment constant. ($0,5 \text{ eV} \leq r h \omega \leq 1 \text{ eV}$) En pratique nous considérerons que E_{e-h} est égale à environ 3 fois l'énergie de la bande interdite.

II.4.2. Fonction de génération:

La création de paires électron-trou se produit tout au long du parcours des électrons. On définit alors une fonction $g(r,z)$ représentant la distribution des paires électron-trou générées dans un volume appelé volume de génération; cette fonction s'écrit sous la forme suivante [12] :

$$g(r, z) = \frac{EI_b(1-f)}{E_{e-h}e}$$

$\langle g \rangle$ est la fonction de distribution normalisée.

I_b est le courant de faisceau.

f est la fraction d'énergie réfléchiée du faisceau d'électrons incidents.

E_{e-h} est l'énergie d'ionisation d'une paire électron-trou.

La fonction $g(r,z)$ représente le nombre de paires électron-trou créées par unité de volume et de temps. On définit également la fonction $g(z) = \int g(r,z) 2\pi r dr$ qui correspond au nombre de paires électron-trou créées par unité de profondeur et unité de temps à une distance z de la surface.

La fonction $g(z)$ peut être reliée à la fonction perte d'énergie par la relation suivante:

$$g(z) = \frac{I_b(1-f)}{E_{e-h}e} \frac{dE}{dz} \quad \text{où } \frac{dE}{dz} \text{ est la fonction perte d'énergie.}$$

Plusieurs expressions analytiques de la fonction perte d'énergie ont été proposées dans la littérature, on peut en citer rapidement quelques unes sous différentes formes:

i-forme polynomiale (Everhart et Hoff [13]):

$$\lambda(U) = 0,6 + 6,21U + 12,4U^2 + 5,69U^3$$

u représente le parcours normalisé ($u = Z/R_e$). R_e est la profondeur de pénétration donnée par Wu et Wittry.

Remarque: cette expression est couramment utilisée pour le silicium.

ii-Gaussienne modifiée (Wu et Wittry [5]):

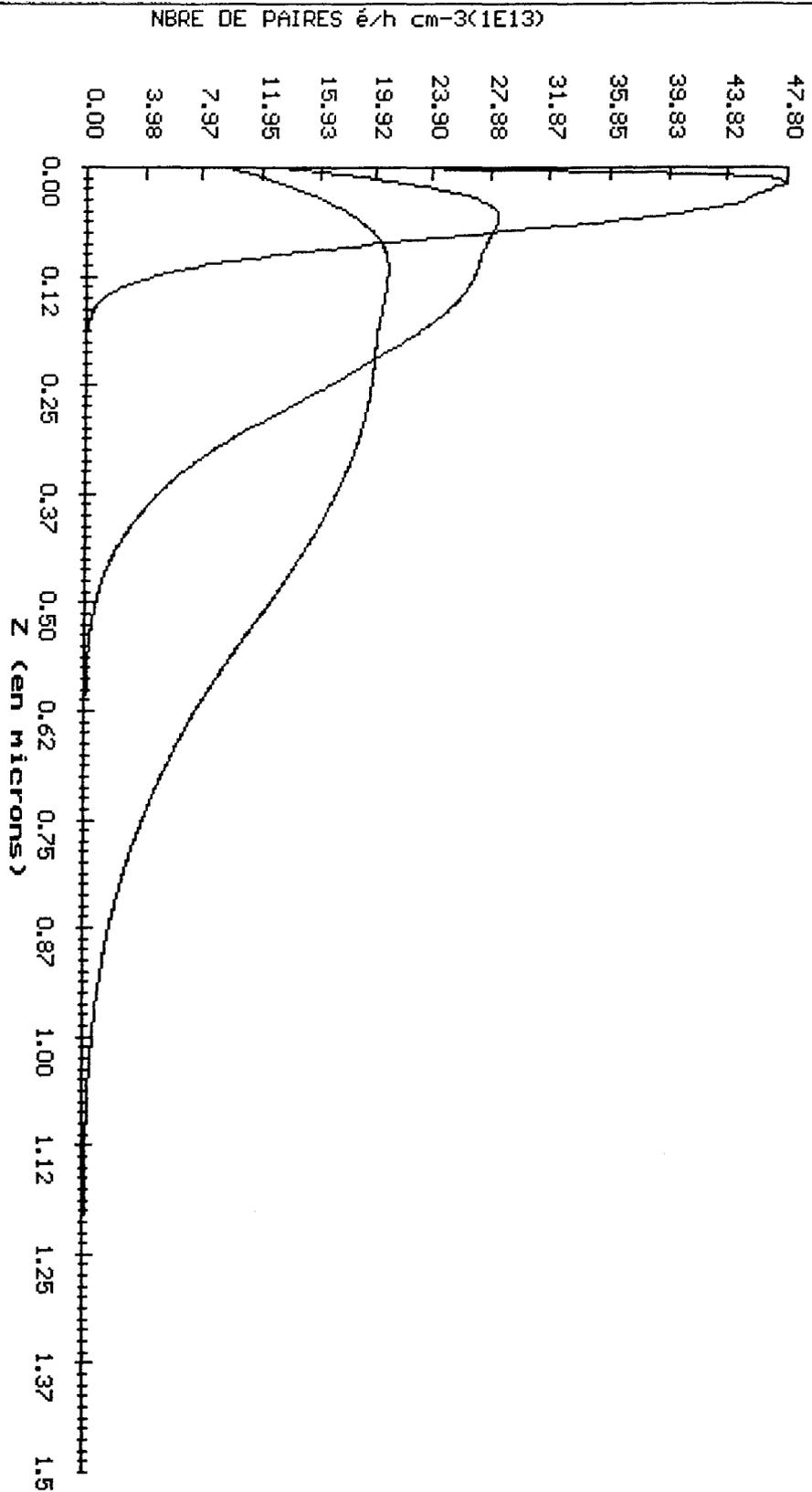
$$\Phi(u) = A \exp\left(-\left(\frac{u - u_0}{\Delta u}\right)^2\right) - B \exp\left(-\frac{bu}{u_0}\right).$$

$u = \rho Z/R_e$. u_0 , Δu et B/A sont des paramètres qui dépendent de la cible.

R_e est donné par R_{PEH} (page 18 de ce chapitre).

iii-Donolato [14] propose une fonction de génération sous forme de Gaussienne projetée dans le plan (x,z) de la forme:

GENERATION AKAMATSU ET AL



Génération des paires électron-trou calculée avec la fonction perte d'énergie d'Akamatsu et al. $I_F = 10 \text{ nA}$ et $\tau = 1 \text{ ns}$.

$$g(x - x_0) = \frac{1.14}{2\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2}{2\sigma^2}\right]$$

avec $z_0=0,3R_p$ et $\sigma = \frac{R_p}{\sqrt{15}}$.

Pour notre étude nous avons utilisé la fonction de génération proposée par Akamatsu et al [15] . Cette fonction semble être celle qui décrit le mieux la forme du volume de génération dans GaAs car elle est dérivée d'un calcul de Monte-Carlo. Cette fonction est de la forme:

$$g(x, y, z) = a \left\{ 1.1 + 7.13 \frac{z}{\frac{R_p}{3}} \right\} \left\{ \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{\sigma_1^2}\right) + 3.4 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{\tau_1^2}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_2^2}\right) + 96 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{\tau_2^2}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_3^2}\right) \right\}$$

avec

$$\sigma_1^2 = 2\left(\frac{R_p}{3}\right)^2; \sigma_2^2 = 2\left(\frac{R_p}{6}\right)^2; \sigma_3^2 = 2\left(\frac{R_p}{12}\right)^2; \tau_1^2 = 2\left(\frac{R_p}{9}\right)^2; \tau_2^2 = 2\left(\frac{R_p}{27}\right)^2.$$

R_p étant la profondeur de Gruen.

La fonction perte d'énergie $g(z)$ s'écrit:

$$g(z) = \int_0^{\infty} g(r, z) 2\pi r dr = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} g(x, y, z) dx dy$$

Soit:

$$g(z) = a \left[1.1 + 7.13 \frac{z}{\frac{R_p}{3}} \right] \pi \left[\sigma_1^2 \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_1^2}\right) + 3.4 \tau_1^2 \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_2^2}\right) + 96 \tau_2^2 \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma_3^2}\right) \right]$$

a est une constante de normalisation.

On définit le taux de génération total $G_0(\text{s}^{-1})$ correspondant au nombre de paires électron-trou créées par unité de temps dans le matériau irradié par:

$$G_0 = \int_0^{\infty} g(z) dz. \text{ soit } G_0 = \frac{I_b(1-f)E}{E_{e-h}e}$$

La variation de l'efficacité de collecte en fonction de la tension d'accélération, permet la détermination de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, de la largeur de la zone de charge d'espace (donc du dopage locale) et aussi l'épaisseur du métal.

II.4.3. Efficacité de collecte:

C'est le rapport du nombre de porteurs minoritaires collectés par la diode de Schottky au nombre de paires électron-trou créées par le faisceau pendant une seconde. L'efficacité de collecte est définie comme:

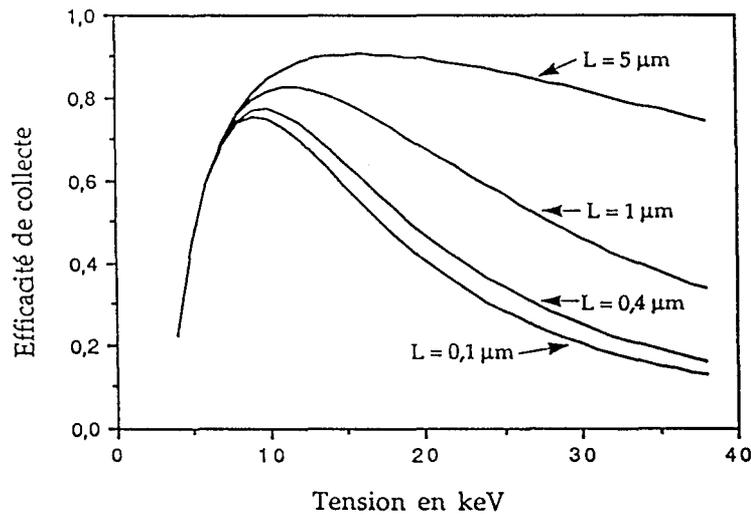
$\eta = \frac{G_{\text{exp}}}{G_{\text{théo}}}$. où G_{exp} et $G_{\text{théo}}$ sont respectivement le gain expérimental et le gain théorique, définis comme suit:

$$\boxed{G_{\text{exp}} = \frac{I_{cc}}{I_f} \text{ et } G_{\text{théo}} = \frac{E(1-f)}{E_{e-h}}}$$

I_{cc} est le courant E.B.I.C mesuré et I_f est le courant de faisceau.

II.4.4. Caractérisation des courbes d'efficacité de collecte dans le modèle de Wu et Wittry:

L'allure typique de courbes d'efficacité de collecte η en fonction de la tension d'accélération, obtenues pour une diode Schottky perpendiculaire au faisceau d'électrons est représentée sur la figure ci-dessous.

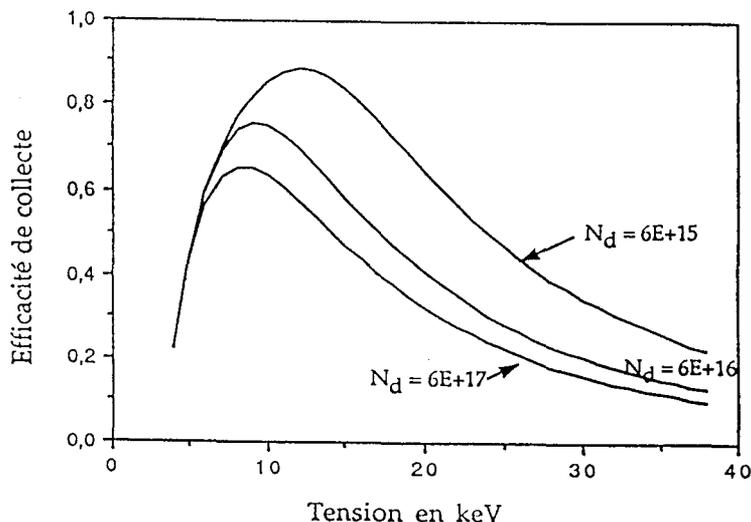


Les caractéristiques des courbes sont les suivantes:

-Aux basses tensions d'accélérations:

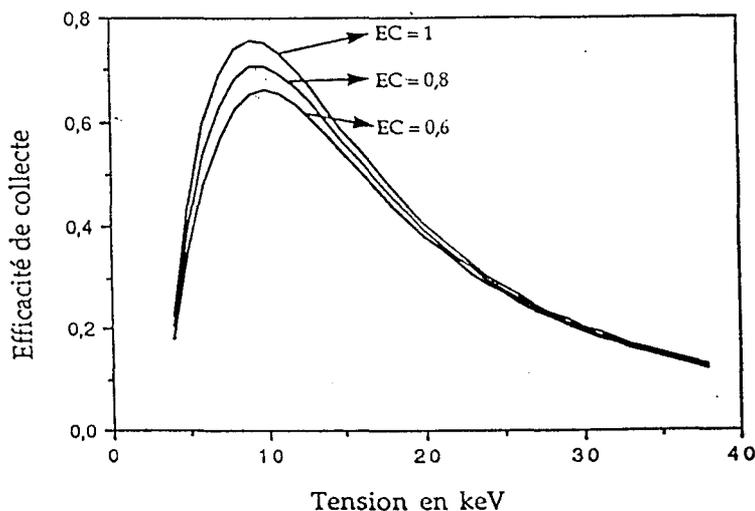
La forte montée de l'efficacité de collecte est due à l'absorption du faisceau par le métal. A plus forte tension d'accélération si $R_p > (Z_{CE} + L)$, la courbe reflète l'influence de la zone de diffusion, dans laquelle le nombre de porteurs collectés est contrôlé par la longueur de diffusion; en augmentant le volume de génération via la tension d'accélération, on collecte de moins en moins de porteurs, provoquant ainsi une décroissance de l'efficacité de collecte. La décroissance est d'autant plus forte que la longueur de diffusion est petite.

-Influence du dopage:



A partir de l'expression de la zone de charge d'espace en fonction du dopage (paragraphe I-3-1), on remarque qu'une augmentation du dopage diminue la largeur de la zone de charge d'espace, déplaçant ainsi le maximum de la courbe vers les basses tensions d'accélération.

-Influence de l'efficacité de collecte dans la zone de charge d'espace:



Carton [16] et Laurence [17] ont été amenés à introduire une recombinaison dans la zone de charge d'espace afin de pouvoir ajuster les courbes expérimentales et les courbes théoriques. Ainsi, l'efficacité de collecte dans la zone de charge d'espace n'est plus égale à 100% mais est légèrement inférieure. Une diminution de l'efficacité de collecte a pour effet de diminuer la valeur du maximum de courbe d'efficacité de collecte totale, et de déplacer le maximum vers les hautes tensions.

II.5. Caractérisation en mode cathodoluminescence:

La cathodoluminescence dans un microscope électronique à balayage est, comme l'E.B.I.C, une technique de caractérisation non destructive. Elle permet l'observation de défauts et d'hétérogénéités dans les matériaux et composants optoélectroniques. La cathodoluminescence a l'avantage sur la technique E.B.I.C de la simplicité de la préparation des échantillons. En effet il suffit de polir la surface d'un échantillon massif pour le caractériser en cathodoluminescence, alors qu'une barrière de Schottky ou une jonction p-n est exigée pour la technique E.B.I.C.

II.5.1. Intensité de cathodoluminescence:

L'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle à la densité de porteurs en excès $\Delta p(r)$ (cas d'un semiconducteur de type n), de leur distribution spatiale via la fonction de génération, et au rendement quantique η [18] défini comme étant le rapport de la durée de vie totale sur la durée de vie radiative: $\eta = \frac{\tau}{\tau_r}$, où $\tau^{-1} = \tau_r^{-1} + \tau_{nr}^{-1}$. τ_{nr} étant la durée de vie non radiative.

Le nombre de photons créés dans l'échantillon lors du processus de recombinaison de paires électron-trou peut s'écrire: $N \sim \eta$. Pour obtenir le nombre de photons émis par l'échantillon, il faut tenir compte de la réflexion à l'interface échantillon-air. On définit l'angle limite de réfraction θ_c au delà duquel les photons émis sont réfléchis dans l'échantillon: $\theta_c = \text{Arc sin}\left(\frac{1}{n}\right)$

Les seuls rayons lumineux émis par l'échantillon et collectés par le détecteur sont ceux qui se trouvent dans l'angle solide Ω donne par: $\Omega = (1 - \cos\theta)$.

Pour GaAs on a: $\theta = 17.6^\circ$ et $\Omega = 4 \cdot 10^{-2}$.

Tous les photons générés dans le matériau ne pourront être détectés car ils peuvent en plus d'être réfléchis à la surface, être absorbés lors de leur trajet vers la surface. Les pertes optiques sont alors représentées par la fonction [15]:

$$A(z) = \int_0^{\theta_c} \exp\left(-\frac{\alpha z}{\cos \theta_c}\right) \sin \theta d\theta$$

Où α est le coefficient d'absorption défini par la loi de Lambert.

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

$$N_r \propto \eta \int \frac{\Delta p(r)}{\tau} A(z) d^3 r.$$

où $\Delta p(r)$ obéit à l'équation de continuité (6).

De manière générale l'intensité de cathodoluminescence I_{CL} s'écrit:

$I_{CL} = KR_T \eta$ où K est une constante de proportionnalité, η est le rendement quantique et R_T est le taux de recombinaison totale (radiative + non radiative) égal à $\frac{\Delta p}{\tau}$.

A l'équilibre thermodynamique le taux de génération est égal au taux de recombinaison R_T . L'intensité de cathodoluminescence s'écrit alors:

$$I_{CL} = KG \frac{\tau}{\tau_r} = KG \frac{\tau_{nr}}{\tau_r + \tau_{nr}}$$

Dans le cas de la recombinaison bande à bande, on peut supposer que la durée de vie des électrons est la même que celle des trous τ_p , et elle est égale à la durée de vie radiative τ_r . τ_{rp} où τ_{rn} est donnée par [19]:

$$\tau_{rp} = \tau_{rn} = \frac{1}{Bnp} = \frac{\Delta p}{R_r} = \frac{\Delta n}{R_r}.$$

où B est une constante; n et p sont respectivement les concentrations d'électrons et de trous hors équilibre et s'écrivent:

$n = \Delta n + n_0$ et $p = \Delta p + p_0$ avec n_0 et p_0 concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre et $\Delta n = \Delta p$ est la concentration de porteurs en excès.

En présence d'injection le taux de recombinaison radiative s'écrit:

$$R_r = B(np - n_0 p_0) = B[(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_0 p_0]$$

soit:

$$R_r = B\Delta p[n_0 + p_0 + \Delta p]$$

ou
$$\tau_r = \frac{\Delta p}{R_r} = \frac{1}{B[n_0 + p_0 + \Delta p]}$$

Si la recombinaison radiative prédomine on a:

$$\tau_r \ll \tau_{nr}, \tau = \tau_r \text{ et } I_{CL} = KG$$

l'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle à la génération donc au courant de faisceau.

Si par contre ce sont les transitions non radiatives qui prédominent, on a:

$$\tau_r \gg \tau_{nr} \text{ et } \tau = \tau_{nr} \text{ et } I_{CL} = KG \frac{\tau_{nr}}{\tau_r} = KG\tau_{nr}[n_0 + p_0 + \Delta p] \text{ avec } G = \frac{\Delta p}{\tau_{nr}}$$

soit
$$I_{CL} = K\Delta p[n_0 + p_0 + \Delta p]$$

Deux cas sont alors à considérer:

i-faible injection ie $\Delta p \ll n_0 + p_0 \Rightarrow I_{CL} = K\Delta p[n_0 + p_0]$

L'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle au courant de faisceau.

ii-forte injection ie $\Delta p \gg n_0 + p_0 \Rightarrow I_{CL} = K\Delta p^2$

Dans le cas d'une recombinaison de type Auger par exemple,

l'intensité de cathodoluminescence est proportionnelle à $G^{\frac{2}{3}}$

Par ailleurs, l'intensité de cathodoluminescence peut également être affectée par

-la température de l'échantillon [20-21]:

$$I_{CL} = \frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{E_{gap(T)}}{kT}\right)$$

Avec $E_{gap(T)} = E_{gap(T=0)} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta g}$

Pour GaAs $E_{\text{gap}(T)}=1.519 \text{ eV}$, $\alpha=5.40510^{-4} \text{ eV/K}$ et $\beta_g=207\text{K}$.

L'intensité de cathodoluminescence augmente quand la température diminue.

-le dopage [22-23]: 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 en raison à la fois des transitions non radiatives dues à une augmentation de la densité des défauts et des précipités (dépassement de la limite de solubilité) et d'une plus grande probabilité de transitions non radiatives (niveaux profonds).

II.5.2. Instrumentation:

Au cours de ce travail, nous avons utilisé un microscope électronique à balayage de type Cambridge 250 MK3, équipé d'un système de cathodoluminescence de type Oxford. La luminescence émise par l'échantillon est détectée à l'aide d'un miroir ellipsoïdal, sur un détecteur Ge ou une photocathode de GaAs.

La cathodoluminescence peut être utilisée en mode polychromatique ou monochromatique, dans les deux cas les courbes sont enregistrées, stockées dans un ordinateur et traitées à l'aide d'un logiciel développé par notre laboratoire [24].

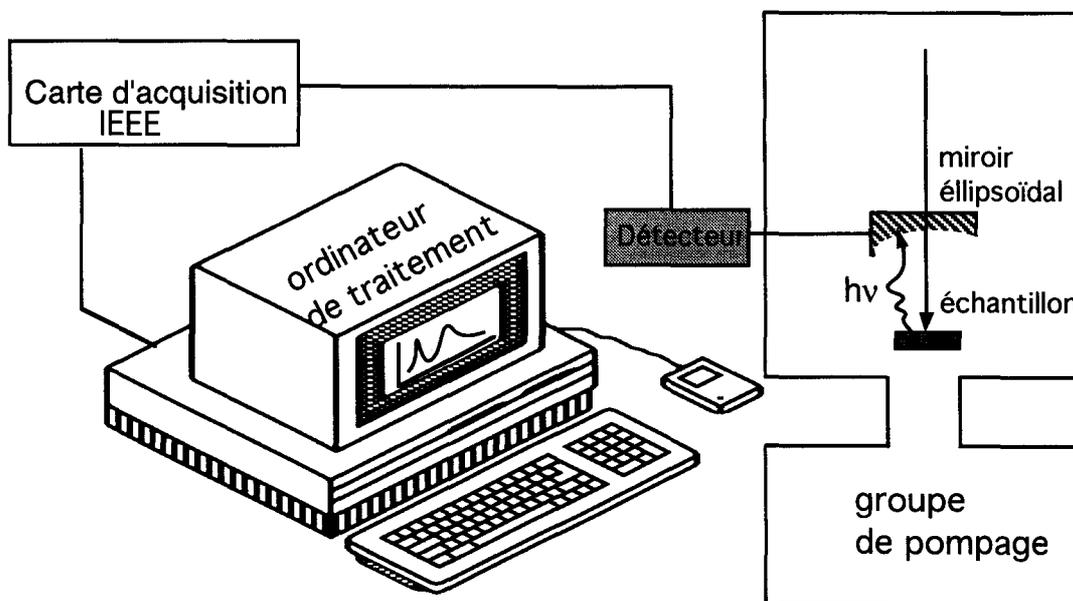


Figure II-5: schéma du dispositif expérimental de la cathodoluminescence.

Bibliographie du chapitre II

- [1]: Bethe H. A., Handb. de. Phys. **24**, 519, (1933).
- [2]: Gruen A.E., Z. Naturforsch **12A**,89, (1957).
- [3]: Everhart T.E. and Hoff P. H., "Determination of kilovolt Electron Energy Dissipation Versus Penetration Distance in Solid Material".
J.Apply. Phys. **42** ,5837-5846, (1971).
- [4]: Kanaya K., Okayama S., j. Phys. **D5**,43, (1972).
- [5]: Wu C.J., Wittry D. B., J.Apply. Phys, **49**, 2827, (1978).
- [6]: Vamansart C., réalisateur de l'amplificateur E.B.I.C.
- [7]: Mathieu H., Physique des semiconducteurs et des composants
- [8]: Kittler M. and Seiffert W., Rev. Phys. Appl. Suppl. **24** C6_31, (1989).
- [9]: Sieber B., and Carton P., Phys. Stat. Sol.(a), **127**, 423, (1991).
- [10]: Berger M. J. and Seltzer S.M., Nat. Acad. Sci-Nat.Rest. Council publ.,
205, 1133, (1964).
- [11]: Klein C.A., J. Appl. Phys.**39**, 2029-2038, (1968).
- [12]: H.J. Leamy J. Appl. Phys **53**, R51, (1982).
- [13]: Everhart T. E., Hoff P.H., J. Apply. Phys. **42**, 13, 5837, (1971).
- [14]: Donolato c., Solid State, Electron **25**, 1077, (1982).
- [15]: Akamatsu B., Henoc p. and Martins. R.B., J. Micros. Spectr. Electron,
14, 120, (1989).
électroniques.Edition Masson, (1987).
- [16]: Thèse P. Carton., "Caractérisation du GaAs massif et contraste E.B.I.C
des dislocations". Université des sciences et techniques de Lille I
(1990).
- [17]: D.E.A., P Laurence. "Caractérisation de l'arseniure de gallium par la
méthode du courant induit".
- [18]: Yacobi B.G., J. Appl. Phys., **59** (4), 15 February (1986).
- [19]: Ryvkin S.M., Photoelectrical Effects in Semiconductors, (1964).

- [20]: Garlich G.F.J., J. Appl. Phys., **13**, 541, (1962).
- [21]: Klasdis D.I. and Eutymion P.C., J. Appl. Phys, **45**, 2775, (1974).
- [22]: Farvacque J.L. and Lenglar P., Phys. Stat. Sol(b), **80**, 433, (1977).
- [23]: Vignaud D., Thèse d'Etat, Université des sciences et techniques de Lille, (1989).
- [24]: MIRI A., HUE B., et Vamansart C.

Chapitre III

**Théorie du contraste
E.B.I.C et
Cathodoluminescence
des dislocations**

Introduction:

Les composés III-V sont largement utilisés comme matériau de base des composants électroniques et optoélectroniques. Les qualités de ces composants sont fortement liées à la concentration des défauts introduits au cours de leur fonctionnement, ou durant la croissance du matériau, l'hétérogénéité de leurs caractéristiques pose un véritable problème à la fabrication industrielle.

Afin de résoudre ce problème, les dislocations et les centres profonds ont donné lieu à de nombreuses études utilisant soit des techniques d'imagerie telles que la microscopie électronique en transmission, soit des techniques spectroscopiques telles que la D.L.T.S (Deep Level Transient Spectroscopy). Cependant, la cathodoluminescence (CL) et l'E.B.I.C sont des techniques de caractérisation privilégiées pour la détermination des propriétés électroniques des défauts tels que les dislocations. En effet, la résolution spatiale de ces deux techniques (de l'ordre du micron), permet de caractériser et de visualiser des dislocations individuelles alors que le signal obtenu en D.L.T.S, est un signal moyenné dans l'espace provenant d'une zone où tous les types de dislocations (vis, coin etc..) sont mélangés.

La théorie du contraste E.B.I.C/CL permet d'étudier les propriétés électroniques des dislocations. Dans ce chapitre, nous présentons et nous discutons la validité des différents modèles théoriques du contraste E.B.I.C existant dans la littérature.

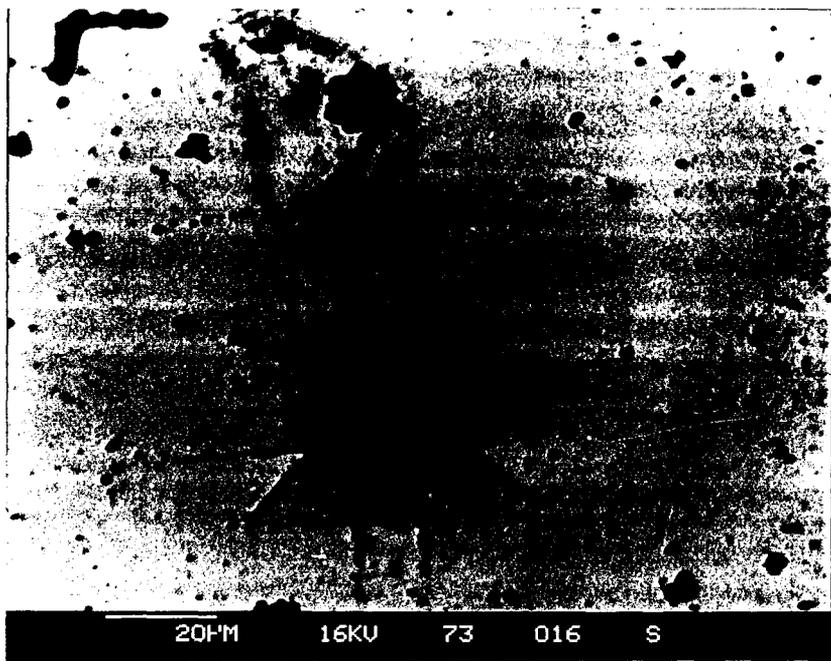


Figure III-2: Image E.B.I.C d'une rosette d'indentation sur une face (001).

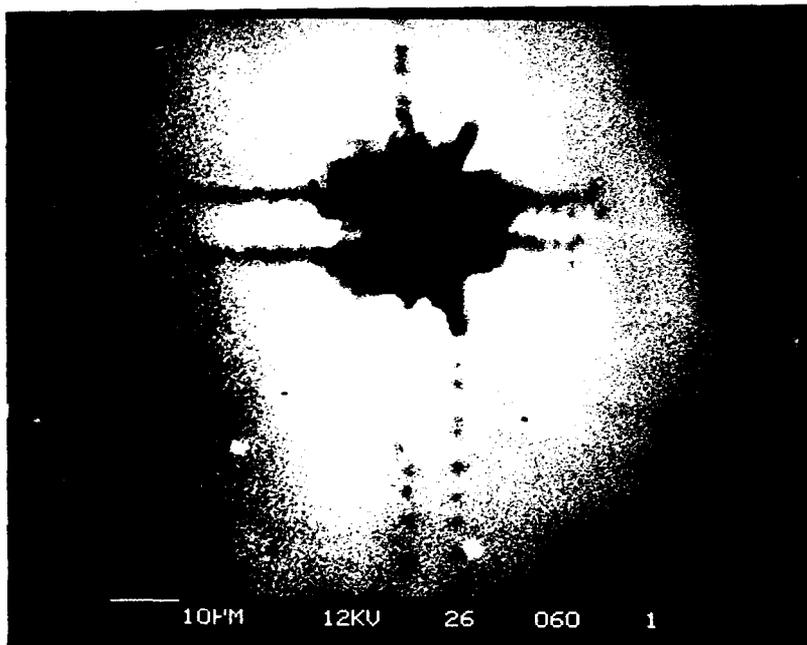


Figure III-3: Image CL d'une rosette d'indentation sur une face (001).

I. Définition du contraste E.B.I.C:

L'une des techniques permettant de déterminer les propriétés électroniques des dislocations telle que la recombinaison des porteurs minoritaires, est l'étude du contraste E.B.I.C ou CL.

Le contraste d'un défaut est défini en E.B.I.C /CL par:

$$\frac{I_{EBIC0/CL0} - I_{EBICd/CLd}}{I_{EBIC0/CL0}} = \frac{\delta I_{EBIC/CL}}{I_{EBIC0/CL0}}$$

où $I_{EBIC0/CL0}$ est l'intensité du signal EBIC /CL quand le faisceau est loin du défaut et $I_{EBICd/CLd}$ est l'intensité du signal EBIC /CL quand le faisceau est à l'aplomb du défaut (figure III-1).

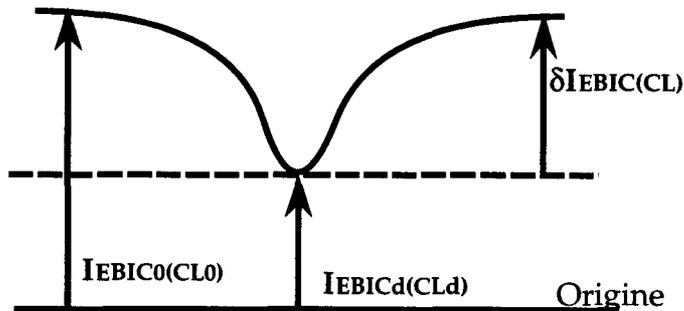


Figure III-1: diagramme de configuration du contraste E.B.I.C (CL).

En mode d'imagerie E.B.I.C et CL, le contraste noir des images correspond à une augmentation des recombinaisons des défauts situés dans le cristal. Les dislocations, qui agissent comme des centres efficaces de recombinaison des porteurs minoritaires, donnent en imagerie E.B.I.C ou CL des zones noires sur fond clair (figure III-2 et III-3).

Une interprétation non ambiguë des mesures de contraste E.B.I.C et CL effectuées sur des dislocations, ne peut se faire que si les paramètres physiques caractérisant localement l'échantillon (longueur de diffusion des porteurs minoritaires, dopage local du matériau, section efficace de capture des électrons et des trous etc.) sont déterminés au préalable.

II. Théorie du contraste E.B.I.C:

II.1. Introduction:

Depuis la fin des années 70, plusieurs théories géométriques ou physiques, fondées sur l'étude du contraste E.B.I.C ont été développées. Ces théories tentent de caractériser les propriétés de recombinaison des porteurs minoritaires aux dislocations. On distingue plusieurs approches:

-a) certaines théories traitent le contraste E.B.I.C à travers les propriétés géométriques des dislocations (zone de charge d'espace de la dislocation assimilée à un cylindre, profondeur des dislocations sous la surface etc..Donolato [1], Passeman [2]).

-b) d'autres s'intéressent à leurs effets de recombinaison mais sans tenir compte des paramètres expérimentaux tels que la température (Figielski [3], Labush [4] et Ourmazd [12]). Ces théories ne prévoient donc pas la variation du contraste E.B.I.C en fonction de l'injection et de la température, qui sont les paramètres les plus accessibles expérimentalement.

c) Wilshaw [33] a été l'un des premiers à proposer un modèle physique de recombinaison à la dislocation. Son modèle tient compte des propriétés physiques de la dislocation (section efficace de capture, position des niveaux extrinsèques dans la bande d'énergie), mais ne prend pas en compte la modification de la distribution des porteurs minoritaires provoquée par l'existence du champ électrique à l'intérieur du cylindre de la dislocation, dans l'équation de diffusion modifiée par la présence de la dislocation.

d) Farvacque et Sieber [28] ont proposé un modèle de recombinaison intrinsèque à la dislocation. Leur modèle tient compte cette fois-ci du champ électrique de la dislocation dans l'équation de diffusion, mais ne prend pas en compte l'effet de saturation dans la zone de diffusion.

e) Récemment Farvacque, Miri et Sieber [29], en utilisant le processus de capture par cascade dans l'espace des énergies [30], déterminent pour la première fois de manière auto-cohérente, les sections efficaces de capture

des porteurs majoritaires et minoritaires et rendent compte de la variation de ces paramètres en fonction de la température et de l'injection. Ce nouveau modèle en tenant compte des effets de saturation en courant, de la température ainsi que de toute la statistique de la dislocation, détermine les valeurs qualitatives et quantitatives du contraste E.B.I.C des dislocations. (ce dernier point fera l'objet du chapitre IV).

II.1.1. Modèle phénoménologique (Donolato) :

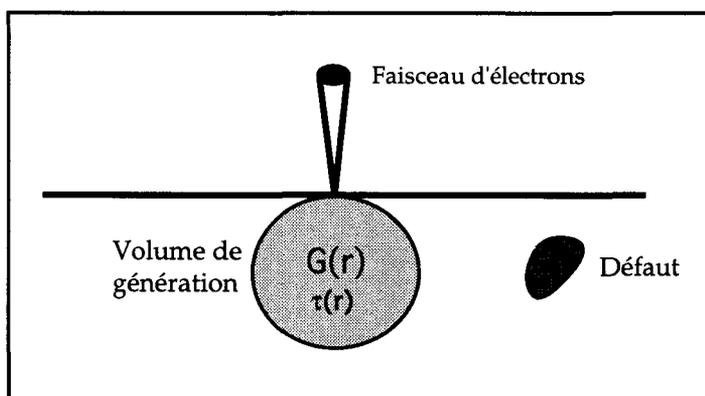


Figure III-4: schéma illustrant le modèle de Donolato d'après [1].

La présence d'un défaut de forme quelconque, détruit la symétrie de révolution du système, et la résolution de l'équation de continuité est de ce fait analytiquement impossible. Afin de simplifier cette équation Donolato [1] considère les hypothèses suivantes:

-le défaut est représenté par un volume fermé entièrement contenu dans la région neutre du matériau dans lequel, la durée de vie des porteurs minoritaires est τ' , différente de la durée de vie loin du défaut.

-le coefficient de diffusion à l'intérieur du défaut reste le même que celui du cristal parfait.

-le taux d'injection est faible.

-la vitesse de recombinaison à l'interface limitant la zone de charge d'espace de la diode Schottky est infinie.

De la dernière hypothèse découle la condition aux limites suivante: $p(z=0)=0$. Le courant collecté est égal au flux de charges en surface:

$$I_{EBIC} = q \iint \left. \frac{D_P p(z)}{dz} \right|_{z=0} dx dy \quad (2.1.1)$$

où $p(z)$ est la solution de l'équation de continuité qui s'écrit:

$$D\Delta p(\vec{r}) = \frac{p(\vec{r})}{\tau} - g(\vec{r}) \quad (2.1.2)$$

Cette équation devient en présence du défaut:

$$D\Delta p(\vec{r}) - \frac{p(\vec{r})}{\tau} = -g(\vec{r}) + \left\{ \frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right\} e(r) p(\vec{r}) \quad (2.1.3)$$

$e(r)=1$ à l'intérieur du défaut, 0 ailleurs.

La variation de la densité des porteurs minoritaires est obtenue par la méthode des fonctions de Green et se met sous la forme suivante:

$$p(\vec{r}) = \frac{1}{D} \int_V g(\vec{r}', R) \chi(\vec{r}, \vec{r}') d^3 r' - \int_{\Omega} \gamma(\vec{r}') p(\vec{r}') \chi(\vec{r}, \vec{r}') d^3 r' \quad (2.1.4)$$

$$\text{avec } \gamma(\vec{r}') = \frac{1}{D} \left\{ \frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right\} = \frac{1}{L'^2} - \frac{1}{L^2} \quad (2.1.5)$$

γ est un paramètre phénoménologique appelé "force du défaut". L et L' sont respectivement les longueurs de diffusion à l'intérieur et loin du défaut.

Le premier terme de l'équation (2.1.4) correspond à la concentration de trous en absence de défaut.

$\chi(\vec{r}, \vec{r}')$ est la fonction de Green associée à l'équation (2.1.2) telle que les conditions limites $p(z=0)=0$ sont vérifiées. Cette fonction se met sous la forme suivante:

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{\exp(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{L})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{\exp(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}''|}{L})}{|\vec{r} - \vec{r}''|} \right\} \quad (2.1.6)$$

où r'' est l'image de r' par rapport à la surface.

En première approximation Donolato assimile $p(\vec{r})$ à la distribution obtenue après la première itération (approximation de Born):

$$p(\vec{r}) = p_0(\vec{r}) - \int_{\Omega} \gamma(\vec{r}') p_0(\vec{r}') \chi(\vec{r}, \vec{r}') d^3 r' \quad (2.1.7)$$

Le courant collecté lorsque le faisceau est à l'aplomb du défaut, est obtenu en utilisant les équations (2.1.1) et (2.1.7):

$$I_{EBIC} = I_0 - \delta I \quad (2.1.8)$$

où I_0 est le courant E.B.I.C collecté loin du défaut et s'écrit:

$$I_0 = q \int_V G(\vec{r}', R) \exp\left(\frac{-z'}{L}\right) d\vec{r}' \quad (2.1.9)$$

et δI est le courant perdu par recombinaison au défaut et s'exprime par:

$$\delta I = q D_p \int_{\Omega} \gamma(\vec{r}') p_0(\vec{r}') \exp\left(\frac{-z'}{L}\right) d^3 r' \quad (2.1.10)$$

Remarque: l'approximation de Born n'est valable que si le défaut introduit une faible perturbation de la distribution des porteurs. Par conséquent, les seuls défauts qui peuvent être analysés dans le cadre de cette théorie, sont les défauts à faible activité électrique i.e. les défauts ayant un faible contraste E.B.I.C. Le contraste E.B.I.C s'exprime alors:

$$C = \frac{\delta I}{I_0}$$

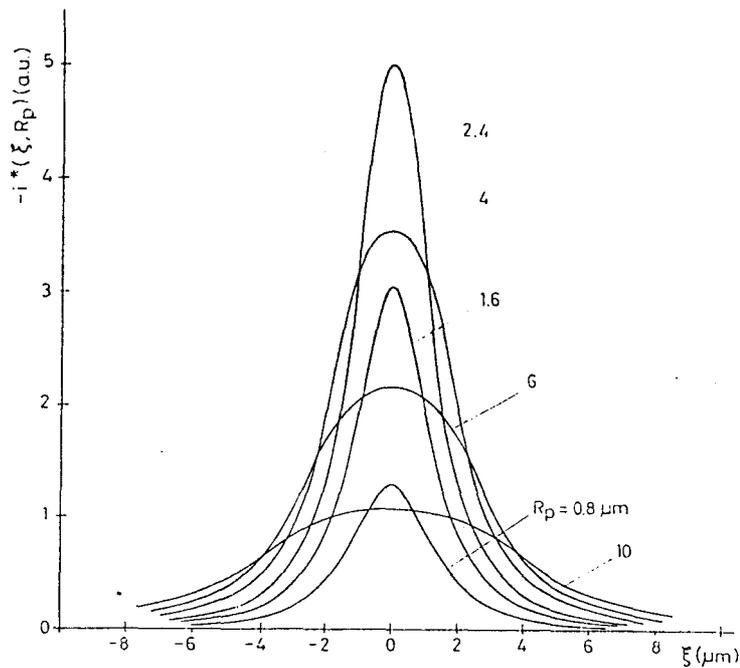


Figure III-5: Courbes de contraste E.B.I.C pour un défaut ponctuel situé à une profondeur $a = 2 \mu\text{m}$, pour différentes valeurs de la tension d'accélération.

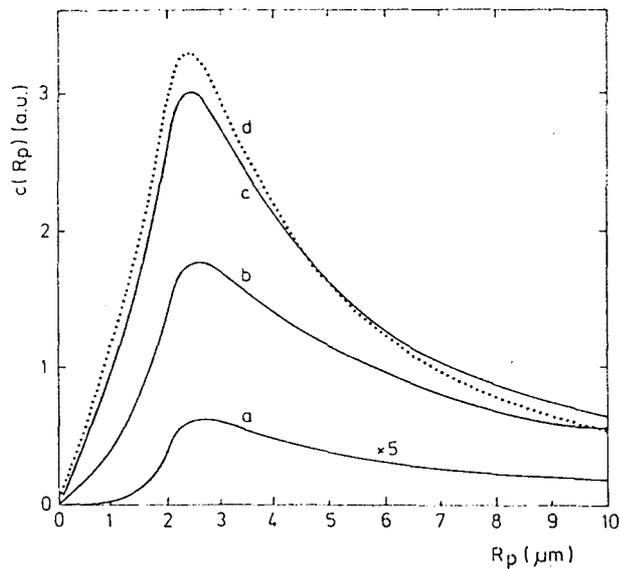


Figure III-6: Courbes de contraste maximum en fonction de la tension d'accélération pour différentes valeurs de la longueur de diffusion. a) $L = 0.5 \mu\text{m}$, b) $L = 2 \mu\text{m}$, c) $L = 10 \mu\text{m}$ et d) $L = \infty$. On note une saturation pour $L \geq 10 \mu\text{m}$.

Le cas particulier d'un défaut ponctuel est intéressant à considérer. En effet, Donolato représente la dislocation par une distribution continue de défauts à symétrie sphérique sans interaction. De manière générale, tout défaut peut être représenté par une suite de défauts ponctuels. Le contraste E.B.I.C du défaut est alors obtenu, par une intégration sur le volume contenant le défaut.

II.1.1.a. Contraste E.B.I.C d'un défaut ponctuel:

Donolato exprime la force d'un défaut ponctuel situé à une profondeur a de la surface (en un point de coordonnées $\vec{r}_0(0,0,a)$) sous la forme: $\gamma(\vec{r}) = \gamma\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ (γ a la dimension d'une longueur).

Dans l'hypothèse d'une génération uniforme dans un volume assimilé à une sphère de rayon $R_s=R/2$ où R est la profondeur de pénétration des électrons incidents, Donolato obtient l'expression analytique du contraste E.B.I.C sous la forme suivante:

$$C(x, R) = \frac{\gamma}{4\pi} \exp[k(R_s - a)]F$$

$$\text{avec } F = \frac{1}{d} \exp(-kd) - \frac{1}{l} \exp(-kl) \quad \text{si } d \geq R_s$$

$$\text{et } F = \frac{k - (1 + kR_s) [\exp(-kR_s)] \frac{1}{d} \sinh(kd)}{kR \cosh(kR_s) - \sinh(kR_s)} - \frac{\exp(-kl)}{l} \quad \text{si } d < R_s$$

$$\text{avec } k = \frac{1}{L}, \quad d = \left[x^2 + (R_s - a)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad l = \left[x^2 + (R_s + a)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

x représente la position relative du faisceau par rapport au centre du défaut.

La figure III-5 représente les profils des contrastes calculés pour différentes valeurs de la tension d'accélération.

La figure III-6 représente la variation du contraste E.B.I.C maximum (mesuré en $x=0$), en fonction de la tension d'accélération représentée par R , pour différentes valeurs de la longueur de diffusion.

II.1.1.b. Contraste E.B.I.C maximum d'un défaut à symétrie sphérique et d'une dislocation parallèle à la surface:

Dans cette théorie, le défaut est représenté par une région F sphérique ou cylindrique de rayon ε . A l'intérieur de cette région les porteurs minoritaires sont affectés d'une durée de vie τ' différente de la durée de vie τ à l'extérieur du défaut.

En injection faible, l'amplitude $\frac{\delta I}{I_0}$ du contraste E.B.I.C d'un défaut ponctuel, est donné par [18]:

$$\frac{\delta I}{I_0} = \left(\frac{\Gamma}{D}\right) \exp\left(-\frac{a}{L}\right) \frac{Dp_0(0)}{I_0} \quad (2.1.11)$$

où a représente la profondeur à laquelle se trouve le défaut, L est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires loin du défaut et D est le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires. p_0 et I_0 sont respectivement la densité de porteurs minoritaires et le courant E.B.I.C collectés en absence de défaut. Γ est l'efficacité de recombinaison du défaut.

Remarque: Donolato fait l'hypothèse que le rayon du défaut ε est petit devant a et L .

Sachant que le contraste augmente avec la longueur de diffusion et atteint une valeur de saturation pour de grandes valeurs de L [1,42], Donolato considère pour déterminer le maximum de l'expression (2.1.11), le cas où L est infinie. Le maximum de l'expression (2.1.11) est alors obtenu à partir du maximum des deux termes Γ/D et $Dp_0(0)/I_0$.

Le premier terme est une fonction de τ' et le second dépend de la profondeur de pénétration R_p des électrons incidents.

Le maximum de Γ/D est obtenu lorsque τ' tend vers zéro, c'est à dire lorsque la recombinaison des porteurs minoritaires à l'intérieur du volume F est instantanée ("black sphere")

Ainsi, pour un défaut sphérique, le maximum est donné par (voir [18] équation (22)):

$$\boxed{\frac{\Gamma_p}{D} \approx 4\pi\varepsilon} \quad (2.1.12)$$

Si la génération est supposée homogène à l'intérieur d'une sphère de rayon $R_s=R_p/2$, le terme $D_0(0)/I_0$ prend la forme suivante ([1] équation (3.13b)):

$$\boxed{\frac{D_0(0)}{I_0} = \frac{a(4R_s^2 + aR_s - a^2)}{8\pi R_s^3(R_s + a)}} \quad (2.1.13)$$

Le maximum de (2.1.13) apparaît pour $2R_s=R_p=1,2a$ et vaut $0.12/a$. A partir de cette valeur et de l'équation (2.1.12) on obtient immédiatement l'expression du contraste maximum d'un défaut sphérique:

$$\boxed{C_p(\text{max}) \approx \frac{1.51\varepsilon}{a}} \quad (2.1.14)$$

De la même manière, pour une dislocation parallèle à la surface, la maximum de Γ/D est donné par (voir [18] équation 34):

$$\boxed{\frac{\Gamma_D}{D} = \frac{2\pi}{K_0\left(\frac{\varepsilon}{L}\right) - K_0\left(\frac{2a}{L}\right)} \approx \frac{2\pi}{\text{Ln}\left(\frac{2a}{L}\right)}} \quad (2.1.15)$$

Comme ε/L et $(2a)/L$ sont très petit quand $L \rightarrow \infty$, les fonctions de Bessel modifiées de seconde espèce K_0 , sont approximées par leur formes limites quand l'argument est petit $K_0(x) \approx -\text{Ln}\left(\frac{x}{2}\right) - 0,577\dots$

L'expression correspondant à (2.1.13) a été donnée par Pasemann [42] (équation 14b) et vaut:

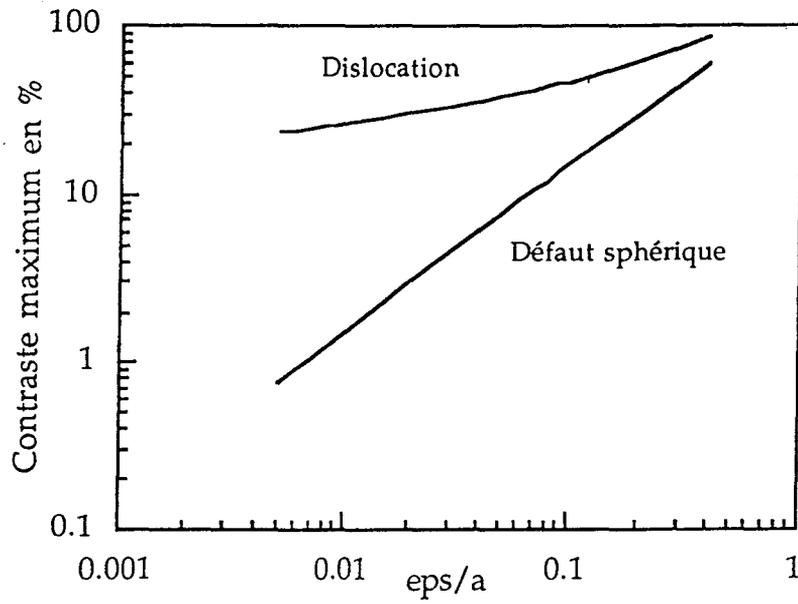


Figure III-7: Variation du contraste maximum pour un défaut sphérique et une dislocation parallèle à la surface en fonction de ϵ/a

$$\frac{Dp_0(0)}{I_0} = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{3} \frac{b}{R_S^3} (3R_S^3 + b^2) + \text{Ln}\left(\frac{a + R_S}{b + R_S}\right) \right] \quad (2.1.16)$$

où b est la fraction du segment de la dislocation se trouvant à l'intérieur du volume de génération assimilé à une sphère.

$$b = \sqrt{a(2R_S - a)} ; \quad R_S \geq a / 2 \quad (2.1.17)$$

Le maximum de (2.1.16) est obtenue pour $2R_S = R_p = 1,54a$ et vaut 0,224. A partir de cette valeur et de l'équation (2.1.15), on obtient immédiatement l'expression du contraste maximum pour une dislocation parallèle à la surface:

$$C_d(\text{max}) = \frac{1.41}{\text{Ln}\left(\frac{2a}{\varepsilon}\right)} \quad (2.1.18)$$

La figure III-7 représente la variation du contraste E.B.I.C maximum d'un défaut sphérique et d'une dislocation, en fonction du rapport du rayon ε et de la profondeur a à laquelle se trouve le défaut selon [18]. On remarquera que $C_d(\text{max})$ est supérieur à $C_p(\text{max})$, ceci est dû au volume d'interaction de la dislocation qui est plus important que celui d'un défaut sphérique.

Les équations (2.1.14) et (2.4.18) permettent d'obtenir un ordre de grandeur de l'extension du champ électrique associé au défaut. Par exemple, un C_p de l'ordre de 40% mesuré par Kittler et al [43] sur des précipités de NiSi_2 dans du silicium, concorde parfaitement avec les résultats théoriques de Donolato. Cependant dans le cas d'une dislocation parallèle à la surface avec un contraste maximum de l'ordre de 10%, on obtient un rayon ε égale à $10^{-6}a$; comme a est typiquement de l'ordre du micron cela donnerait un rayon du défaut ε de l'ordre de 10^{-3} nm: Ce résultat est irréaliste !!

Selon Donolato, l'hypothèse de faire tendre τ' vers zéro, conduit à une représentation réaliste à trois dimensions, mais n'est plus valable à deux dimensions et seules les valeurs finies de τ' sont admissibles.

Ainsi, pour des valeurs finies de τ' , Donolato donne une expression corrigée du contraste maximum d'une dislocation parallèle à la surface:

$$C_d(\max) = \frac{0,2241\gamma_d / D}{1 + \left(\frac{\gamma_d}{2\pi D}\right) \text{Ln}\left(\frac{2a}{\varepsilon}\right)} \quad (2.1.19)$$

où $\gamma_d / D = \pi\varepsilon^2 / (D\tau') = \pi(\varepsilon / L')^2$ représente l'efficacité de recombinaison de la dislocation et L' est la longueur de diffusion des minoritaires à l'intérieur du cylindre F .

Pour $\varepsilon/L'=1/2$, on obtient $\gamma_d/D=0,8$ et pour un contraste maximum de l'ordre de 10% on obtient un rayon ε égal à $510^{-3}a$, soit une valeur de ε de l'ordre de quelques nanomètres. Cette valeur semble plus raisonnable et est de l'ordre de grandeur des valeurs obtenues expérimentalement.

Remarque: cette représentation phénoménologique des défauts est intéressante. En effet, sans faire appel à la physique des dislocations, Donolato arrive à reproduire des valeurs qualitatives et quantitatives de contraste E.B.I.C des dislocations et des défauts sphériques, en fonction de la position et de la géométrie, de l'ordre de grandeur des valeurs observées expérimentalement. Cette représentation reste vraie tant que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires est grande devant la profondeur de pénétration des électrons incidents. Elle est donc valable dans le cas de silicium, mais n'est plus valable dans le cas des semiconducteurs III-V et II-VI.

Pour avoir une bonne interprétation du contraste E.B.I.C ou CL, il faut préalablement déterminer trois catégories de paramètres essentiels. Ces paramètres sont les suivants:

-a) Aspect géométrique:

il concerne l'influence de la nature du défaut (sa géométrie) et sa position par rapport à la jonction (barrière de Schottky parallèle à la surface [2,7,8,9,10], jonction p-n enterrée, parallèle à la surface [11,12,13,14,15] et

jonction p-n perpendiculaire à la surface [2]) et ceci par l'intermédiaire des conditions aux limites.

Remarque: dans le cas du modèle de Donolato, celui-ci rend très bien compte de l'allure générale des courbes contraste-tension d'accélération:

- pour un défaut à symétrie cylindrique (dislocation) perpendiculaire à la surface [10] ou incliné par rapport à la surface [16].

- pour un défaut à symétrie sphérique [7] dont il est possible de déterminer sa position sous la surface à partir des courbes $c=f(E)$. (E est la tension d'accélération des électrons incidents).

-b) Influence de l'environnement local:

l'influence de l'environnement local se traduit à travers les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires, la longueur de diffusion étant directement liée aux propriétés électroniques du milieu dans lequel se trouve le défaut.

Dans le modèle de Donolato le contraste E.B.I.C augmente avec la longueur de diffusion alors que l'allure générale de la courbe $c=f(E)$ (des défauts à symétrie cylindriques et sphériques) est indépendante de la longueur de diffusion [7,16,10].

-c) Influence des propriétés électriques des défauts:

la valeur du contraste E.B.I.C d'un défaut électriquement actif dépend de plusieurs paramètres tels que:

1) sa section efficace de capture des porteurs (σ_n pour les électrons et σ_p pour les trous).

2) sa charge dépendant de la position des niveaux électroniques unidimensionnels associés au défaut

3) la température, le dopage et la densité des centres profonds.

Kittler et Seifert [11,17] ont pu déterminer la concentration de centres de recombinaison nécessaire pour produire un contraste détectable (estimé à 0.5%), en choisissant pour cela, une valeur moyenne de la section efficace de capture des dislocations ($\sigma_n=10^{-14} \text{ cm}^2$). Leur conclusion était que seules les dislocations décorées, peuvent être observées en mode E.B.I.C.

En parallèle, grâce au progrès de la microscopie, de nombreuses expériences ont été développées. Certaines ont montré que le contraste E.B.I.C des dislocations ne peut être dû qu'aux impuretés ayant ségrégué au coeur de ces dislocations. En d'autres termes, cela voudrait dire que la recombinaison des porteurs est un mécanisme extrinsèque:

- une dislocation décorée possède un contraste plus élevée qu'une dislocation non-décorée [24].

- une expérience de recuit révèle une activité électrique de dislocations initialement passives [25,26].

D'autres, ont au contraire [12] montré des résultats plutôt favorable à l'idée d'une recombinaison intrinsèque:

- l'existence des niveaux électroniques unidimensionnels, associés aux atomes du coeur des dislocations(reconstruits ou non) [22,23].

- la dissociation des dislocations augmente leur activité électrique [21].

Pour une revue détaillée sur les principaux résultats expérimentaux obtenus par les techniques E.B.I.C et CL sur l'origine de la recombinaison des porteurs aux dislocations, voir [27].

1) Recombinaison intrinsèque:

Selon le type de dopage du matériau semiconducteur, et en fonction de la position du niveau de Fermi dans le gap, les niveaux extrinsèques associés aux dislocations se remplissent soit d'électrons soit de trous. Ce remplissage donne alors à la dislocation la configuration d'une ligne chargée. Afin de limiter l'énergie d'interaction électrostatique entre les porteurs piégés, il faut écranter la ligne de la dislocation. L'écranage consiste à créer autour de la dislocation une zone déplétée cylindrique, de charge opposée à la charge de la dislocation, centrée sur la ligne de la dislocation. La répartition de toute ses charges se traduit au voisinage de la dislocation, par une déformation rigide des niveaux d'énergie de la bande de valence et de la bande de conduction.

L'écranage de la ligne chargée, nécessaire pour rendre finie l'énergie d'interaction électrostatique, peut être réalisé, soit par une redistribution des porteurs libres au voisinage de la dislocation chargée [50], soit par une modification locale du taux d'ionisation des impuretés [51]. Quelle que soit la nature de cet écranage, le potentiel global induit par la distribution de charges au coeur de la dislocation, crée systématiquement un champ attractif pour les porteurs minoritaires et répulsif pour les majoritaires.

2) Recombinaison extrinsèque:

La concentration des impuretés, qui forment une atmosphère de Cottrell autour de la dislocation, est déterminée par le champ de déformation de la dislocation; donc des dislocations de vecteurs de Burgers différents peuvent attirer différentes concentrations d'impuretés. L'activité électrique de la dislocation est alors entièrement contrôlée par les impuretés.

En résumé, la recombinaison des porteurs a lieu soit, via les niveaux introduits dans la bande interdite par les liaisons pendantes de la dislocation et elle est intrinsèque, soit, elle se fait sur les niveaux électroniques des impuretés et elle est extrinsèque.

(pour une revue détaillée voir [21])

II.2. Modèle physique (Wilshaw):

Contrairement à la théorie de Donolato, le modèle de Wilshaw [31] décrit pour la première fois en tenant compte des paramètres expérimentaux, les effets de saturation du contraste E.B.I.C avec l'intensité du faisceau, et sa variation en fonction de la température. Ce modèle fait intervenir les propriétés physiques de la dislocation (section de capture, niveaux extrinsèques de la dislocation) et aboutit à des comportements qualitatifs du contraste E.B.I.C en fonction de l'injection et de la température, mais, il ne permet pas de remonter aux valeurs quantitatives de ces contrastes.

II.2.1. Expression du contraste E.B.I.C:

Wilshaw reprend l'expression de Donolato; le contraste E.B.I.C est alors donné par:

$$C = f(\gamma)g(R, d, W, L)$$

(2.2.1)

où $f(\gamma)$ est une fonction caractérisant la recombinaison à travers le paramètre γ , appelé "force du défaut". Dans le cas où le défaut introduit une faible perturbation on peut écrire $f(\gamma)=\gamma$.

R est la profondeur de pénétration des électrons incidents, d et W, sont respectivement la profondeur à laquelle se trouve le défaut et la largeur de la zone de charge d'espace de la diode Schottky ou de la jonction p-n et L est la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

La fonction g ne varie pas ou peu en fonction de l'injection et de la température. Cette propriété d'invariance est particulièrement vraie dans le cas du Silicium où les longueurs de diffusion sont infiniment grandes (par rapport au volume de génération), mais dans le cas de GaAs par exemple, il faut tenir compte de la variation de la longueur de diffusion en fonction de la température [32].

II.2.2. Présentation du modèle:

Une dislocation dans un matériau de type n, introduit dans la structure de bande des états accepteurs, correspondant à un niveau d'énergie au dessous du niveau de Fermi. Comme ces états sont remplis, il résulte de l'interaction des porteurs piégés sur la ligne de la dislocation, un potentiel électrostatique infini. Afin de limiter cette énergie d'interaction, le milieu diélectrique entourant la dislocation, crée autour de la ligne de la dislocation une zone de charge d'espace, centrée sur un cylindre de rayon r_d . A l'intérieur de ce cylindre règne un champ électrostatique attractif pour les trous et répulsif pour les électrons. Les trous se trouvant à l'intérieur de ce cylindre, ont une durée de vie τ' différente de τ , τ étant la durée de vie des trous dans le cristal parfait.

La capture des trous se fait par cascade à l'intérieur du puits de potentiel entourant la dislocation. Le flux de trous piégés par la dislocation correspondant à l'intégrale des porteurs créés, sur l'extension du potentiel électrique dans la zone de charge d'espace, est donné par:

$$J_h = \frac{\pi r_d^2 P}{\tau'} \quad (2.2.2)$$

où p est la densité de porteurs minoritaires en excès.

La recombinaison est exprimée à travers le paramètre γ "force du défaut" relié au flux de trous par:

$$\gamma = \frac{J_h}{PD_h} = \frac{\pi r_d^2}{D_h \tau'} \quad (2.2.3)$$

En supposant que l'écrantage est dû uniquement aux porteurs majoritaires, et en utilisant la condition de neutralité de la dislocation on obtient immédiatement l'expression du rayon du cylindre d'écran:

$$r_d = \frac{Q}{(\pi n_0 q)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.2.4)$$

où n_0 est la concentration des porteurs majoritaires, et q est la charge électrique élémentaire. Q est la charge linéaire de la dislocation et r_d est le rayon du cylindre d'écran.

Le flux des électrons piégés par la dislocation est la résultante de deux termes: Le premier terme correspond à un flux d'électrons dû à la capture thermique des électrons au dessus de la barrière de potentiel sur le niveau de la dislocation, et le second correspond au flux d'électrons dû à la réémission thermique des électrons du niveau de la dislocation vers la bande de conduction. L'expression du flux total des électrons est par conséquent donnée par:

$$J_e = C_e N_d \left[(1-f)n_0 \exp\left(-\frac{q\phi}{kT}\right) - fN_c \exp\left(-\frac{q\phi_0}{kT}\right) \right] \quad (2.2.5)$$

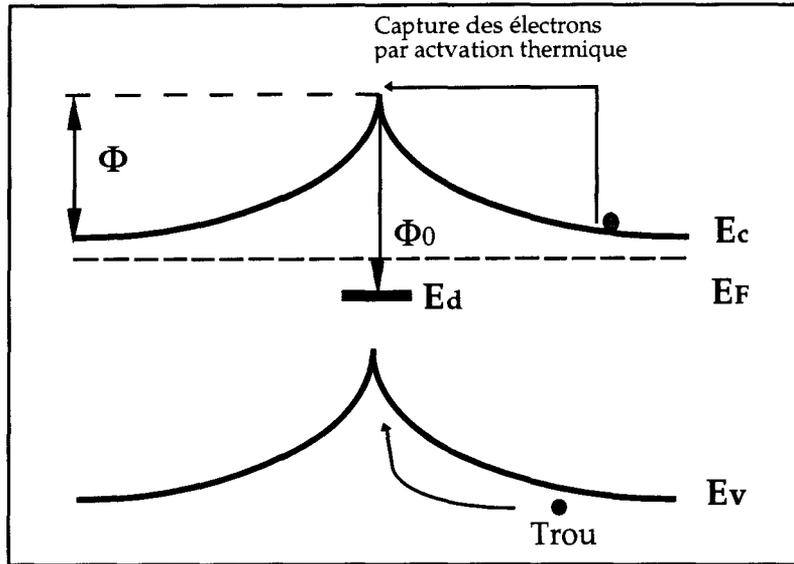


Figure III-8: Mécanisme de recombinaison des paires électron-trou sur une dislocation.

C_e est le coefficient de capture d'un électron libre de la bande de conduction sur un niveau de la dislocation.

N_d est la densité d'état par unité de longueur de dislocation.

f est le facteur d'occupation de la dislocation.

N_c est la densité d'état des électrons dans la bande de conduction.

Φ est la hauteur de la barrière de potentiel de la dislocation.

Φ_0 est la position du niveau extrinsèque de la dislocation par rapport au minimum de la bande de conduction.

Dans l'expression de J_e , le premier terme dû à la capture des électrons de la bande de conduction sur le niveau de la dislocation est, sauf dans le cas de très basse température ou de grande activité du défaut, plus important que la réémission thermique. En négligeant alors pour les conditions expérimentales de températures, la réémission thermique devant la capture, on obtient l'expression de la hauteur de la barrière de potentiel:

$$\phi = -\frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J_e}{C_e N_d n_0}\right) \quad (2.2.6)$$

La barrière de potentiel Φ étant approximativement proportionnelle à la charge de la dislocation on peut écrire:

$$\Phi = A_1 Q \quad (2.2.7)$$

et dans le cas d'une faible injection $\Delta p = A_2 I_b$ (2.2.8)

où A_1 , A_2 sont des constantes et I_b le courant de faisceau.

En résolvant simultanément les équations (2), (3), (5), (7) et (8), il vient:

$$\begin{aligned} \phi &= -\frac{kT}{q} \text{Ln}\left(\frac{\Delta p \gamma}{C_e N_d n_0}\right) \\ \gamma &= \frac{Q}{n_0 q D_h \tau'} = \frac{\phi}{A_1 n_0 q D_h \tau'} \\ &= -\frac{1}{A_1 n_0 q D_h \tau'} \frac{kT}{q} \text{Ln}\left(\frac{\Delta p \gamma D_h}{C_e N_d n_0}\right) \\ \gamma &= \frac{k}{A_1 n_0 q^2 D_h \tau'} T \left[\text{Ln}(C_e N_d n_0) - \text{Ln}(A_2 I_b \gamma D_h) \right] \end{aligned}$$

La dernière équation (2.2.8) représente la dépendance de la force au défaut γ en fonction de l'injection et de la température.

II.2.3. Dépendance de la recombinaison en fonction de la température et de l'injection:

Dans son modèle, Wilshaw fait les hypothèses suivantes:

i-pour des valeurs de γ généralement petite, $\text{Ln}(\gamma)$ est négligeable devant γ .

ii- N_d , n_0 et C_e sont quasiment indépendants de la température.

iii-La dépendance de τ' en température, est donnée par le calcul de τ' à partir du processus de capture des trous par cascade dans un puits de potentiel [49] et est proportionnel à $T^{0.5}$. Par conséquent, le produit $D\tau'$ est indépendant de la température.

Et obtient finalement :

1) à courant de faisceau constant: $C \propto \gamma \propto T$ (2.2.9)

2) à température constante: $C \propto \gamma \propto (A_3 - \text{Ln}(I_b))$ (2.2.10)

A partir du domaine linéaire des courbes $C=f(T)$ et $C=f[\text{Ln}(I_b)]$, les équations (2), (5), (6) et (8) nous permettent d'écrire:

$$I_b C \propto I_b \gamma \propto C_e \exp\left(-\frac{q\phi}{kT}\right) \quad (2.2.11)$$

En traçant les courbes $\ln(I_b)$ en fonction de $1/T$, on peut déterminer pour une valeur de contraste donné, la valeur de la hauteur de la barrière de potentiel Φ , et reconstituer à partir des autres valeurs de contraste, la variation du contraste E.B.I.C en fonction de la hauteur de la barrière de potentiel.

II.2.4. Mécanisme de recombinaison:

Selon le modèle de Wilshaw, le mécanisme de recombinaison est entièrement contrôlé par la charge de la dislocation et par conséquent, par la hauteur de la barrière de potentiel Φ . La capture des électrons inversement proportionnelle à la hauteur de barrière, augmente lorsque la barrière diminue et donc lorsque la charge de la dislocation diminue. Par contre, la capture des trous étant proportionnelle à la largeur du puits de potentiel entourant la dislocation, augmente lorsque la charge de la dislocation augmente.

II.2.5. Interprétation des courbes de contraste E.B.I.C:

A) En fonction de la température:

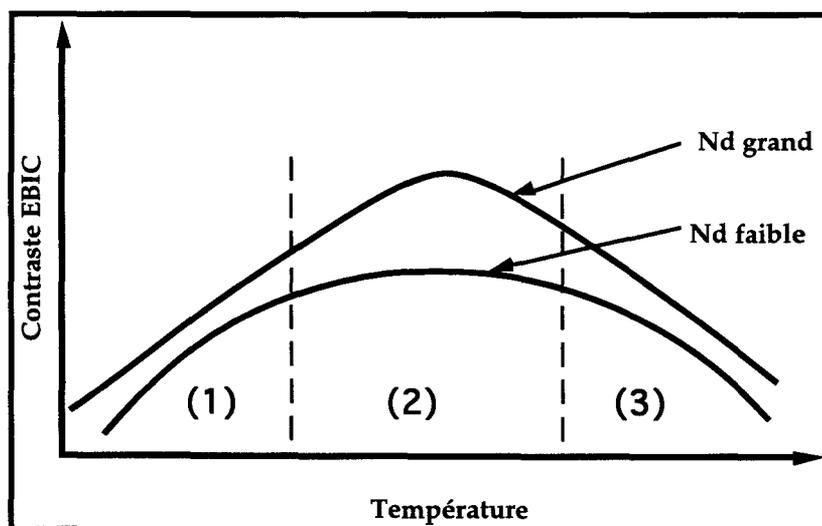


Figure III-9: Variation du contraste en fonction de la température selon[35]

La figure III-9 représente la variation du contraste E.B.I.C en fonction de la température, on distingue 3 régimes. L'existence des trois régimes se justifie de la façon suivante:

-Dans le premier régime (1), à basse température, le contraste E.B.I.C est à courant de faisceau constant, approximativement proportionnel à la température. En effet, si la température augmente la capture des électrons par activation thermique au dessus de la barrière de potentiel augmente. Comme la recombinaison des trous est proportionnelle à la faculté de capture des électrons, le contraste E.B.I.C augmente donc avec la température.

En augmentant la température, la capture des trous diminue en raison de la réduction de la charge initiale de la dislocation alors que la capture des électrons, devient de plus en plus efficace de telle sorte que la charge de la dislocation réaugmente de nouveau jusqu'à sa valeur initiale Q .

Si en fonction de la température la position du niveau de Fermi est tel que tout les états N_d de la dislocation sont tous remplis, alors la recombinaison atteint le régime (2). Dans ce régime le facteur d'occupation des états de la dislocation f étant proche de 1 la charge Q de la dislocation demeure constante: par conséquent la recombinaison ou le contraste E.B.I.C est indépendant de la température.

Le troisième régime (3) apparaît si la réémission thermique à cette température devient plus efficace que la capture. Par conséquent la dislocation se vide au fur et à mesure que la température augmente ($f < 1$) et le contraste E.B.I.C diminue avec la température.

Remarque: à partir du régime (2) on peut selon Wilshaw, déterminer la concentration des états N_d de la dislocation et le régime (3) donne la position E_d du niveau de la dislocation.

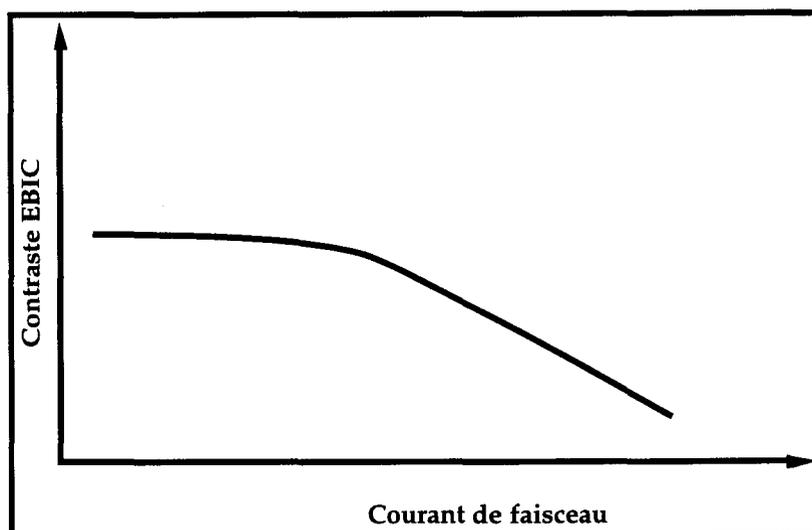


Figure III-10: Variation du contraste en fonction de l'injection selon[35]

B) En fonction de l'injection:

Soit Q la charge initiale de la dislocation, au fur et à mesure que l'injection augmente, la charge Q de la dislocation diminue faisant baisser la hauteur de la barrière de potentiel, ce mécanisme continue jusqu'à ce que les flux d'électrons et de trous s'égalisent. La réduction de la charge de la dislocation a pour conséquences, la réduction de la zone de charge d'espace de la dislocation, donc la réduction de l'efficacité de recombinaison des trous et par conséquent, la diminution du contraste E.B.I.C.

Conclusion:

Pour la première fois Wilshaw a introduit un modèle physique pour décrire la recombinaison des porteurs aux dislocations. Ce modèle reproduit des comportements qualitatifs des variations des courbes de contraste en fonction de l'injection et de la température, mais ne permet pas d'apporter des valeurs quantitatives. Cependant, notons que l'activation thermique des porteurs majoritaires au dessus de la barrière de potentiel, ne semble pas être le mécanisme dominant la recombinaison aux dislocations. En effet, aux températures expérimentales, cette barrière est effectivement très grande devant kT . D'autre part les régimes (2) et (3) en fonction de la température, semblent plus caractéristiques de l'existence de niveaux légers pour lesquels la variation du facteur d'occupation f du niveau de la dislocation en fonction de la température, est significative. Cette analyse n'est donc plus valable dans le cas de centres profonds. Farvacque et Sieber [28] ont montré à partir des valeurs théoriques de contraste E.B.I.C que l'effet de saturation

dans la zone de charge d'espace, produisait des valeurs de contraste nettement inférieures aux valeurs expérimentales et à celles obtenues sans tenir compte de l'effet de saturation. D'autre part, on peut montrer, que la capture des électrons par activation thermique au dessus de la barrière de potentiel, donnerait des valeurs de contraste E.B.I.C de l'ordre de 1/10000!!!.

II.3. Modèle quantitatif (Farvacque, Sieber):

Introduction:

Dans ce modèle intrinsèque de contraste E.B.I.C, les mécanismes de recombinaison à la dislocation sont associés de manière auto-cohérente au champ électrique de la dislocation introduit cette fois-ci dans l'équation de continuité. L'effet de ce champ est simplement décrit en entourant la dislocation par un cylindre à l'intérieur duquel il n'y a pas de diffusion de porteurs libres. L'équation de continuité s'écrit,

$$D\Delta p(\vec{r}) = \frac{p(\vec{r})}{\tau} - g(\vec{r})$$

et le champ n'intervient qu' à travers les conditions limites.

Tous les porteurs minoritaires atteignant la surface ou créés à l'intérieur du cylindre sont instantanément capturés (et donc recombinaison) par le champ électrique de la dislocation i.e. une vitesse de recombinaison infinie à la surface de ce cylindre.

La résolution analytique de l'équation de diffusion consiste alors à déterminer la répartition spatiale des porteurs minoritaires à l'extérieur du cylindre.

Si le mécanisme de recombinaison des porteurs minoritaires est suffisamment efficace pour éliminer tous les porteurs minoritaires piégés par la dislocation, alors la charge de la dislocation reste inchangée sinon, la charge diminue et atteint un autre état d'équilibre, qui réduit l'extension spatiale du champ et donc la collecte des porteurs minoritaires: c'est l'effet de saturation.

II.3.1. Fondement du modèle:

A) Recombinaison dans la zone de charge d'espace:

Même en présence d'une zone de charge d'espace c'est à dire en présence du champ électrique de la diode, il existe un mécanisme de recombinaison associé aux dislocations. En effet le champ électrique de la dislocation compense celui de la diode Schottky et assure une activité électrique des dislocations. Ce phénomène a été mis en évidence pour la première fois par B.Sieber [52] et mis en équation par Farvacque et Sieber [36]. La recombinaison augmente avec la profondeur au fur et à mesure que l'amplitude du champ électrique de la diode diminue. Par conséquent la charge électrique de la dislocation augmente avec la profondeur z dans la zone de charge d'espace, son expression est alors donnée par:

$$n_t(z) = 2D \left[\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_D + W(z) - F}{kT}\right)} - \chi \right] \quad (2.3.1)$$

où E_D est le niveau de la dislocation.

E_F est le niveau de Fermi.

χ est le facteur d'occupation:

χ est égal à 5/8 pour une dislocation à coeur As.

χ est égal à 3/8 pour une dislocation à coeur Ga.

$W(z)$ est la dérivée par rapport à n_t , de l'accroissement de l'énergie d'interaction électrostatique.

La barrière de potentiel W étant grande devant kT , le modèle utilisé est celui de l'approximation de la zone déplétée (modèle de Read), tel que $W(z)$ est donnée par:

$$W(z) = \frac{n_t(z)e^2}{2\pi\epsilon_1\epsilon_0Db} \left[\ln\left(\frac{R}{b}\right) - 0.866 \right] \quad (2.3.2)$$

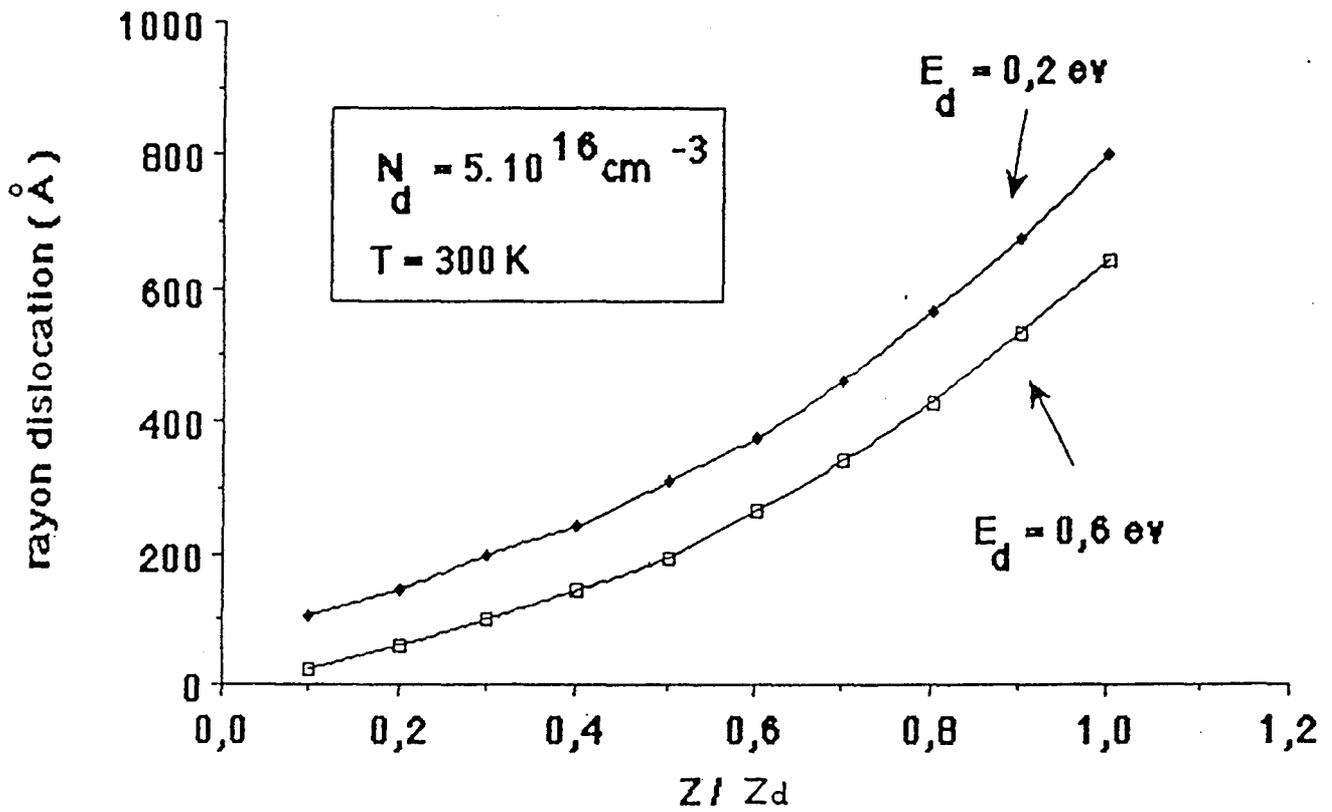


Figure III-12: Variation du rayon de la dislocation dans la zone de charge d'espace. Les niveaux E_d sont situés à 0.2 eV et 0.6 eV de la bande de valence. Le calcul ne tient pas compte de l'effet de saturation.

B) Origine du contraste E.B.I.C dans la zone de charge d'espace:

A l'intérieur de la zone de charge d'espace, le seul courant existant est dû à la dérive des porteurs,

- i- soit par le champ électrique de la diode Schottky
- ii-soit par le champ électrique de la dislocation.

Pour déterminer la variation locale de la charge ou du potentiel d'écran en fonction de r , il faut remplacer dans l'équation (2.3.1) le niveau neutre de la dislocation E_d par $E_d + eV_s(z)$, où $V_s(z)$ est le potentiel de la diode au point z [36]. Le rayon de la dislocation est obtenu à partir de la compensation du champ électrique de la diode, par le champ électrique de la dislocation.

$$|E_{dislocation}(R(z), z)| = |E_{Schottky}(z)| \tag{2.3.3}$$

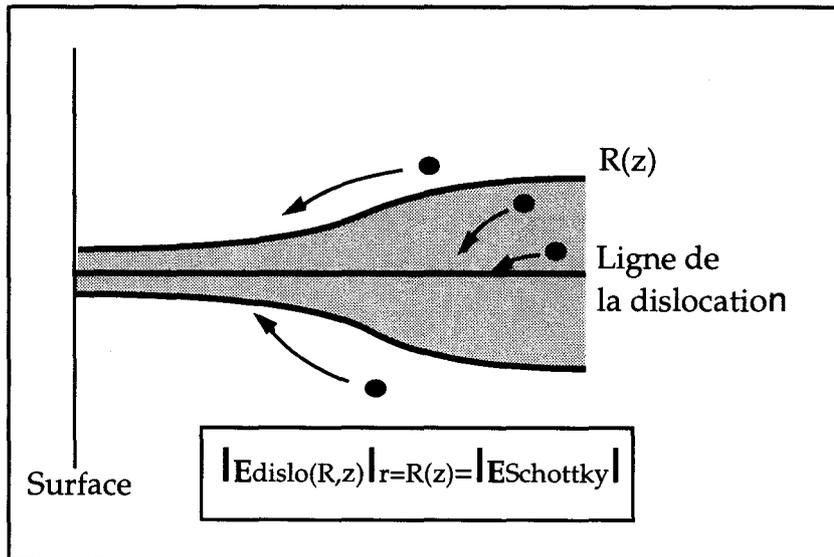


Figure III-11: Variation du rayon de la dislocation au voisinage de la zone de charge d'espace de la diode Schottky

La figure III-12 représente la variation du rayon de la dislocation en fonction de la profondeur relative des dislocations et ceci pour deux valeurs différentes du niveau neutre de la dislocation. On remarquera que le rayon de la dislocation augmente en fonction de la profondeur et est d'autant plus grand que le niveau neutre de la dislocation est proche de la bande de valence.

C) Effet de saturation:

Si le mécanisme de recombinaison est suffisamment efficace pour éliminer tous les porteurs minoritaires piégés par le champ électrique de la dislocation, alors la charge de la dislocation reste inchangée, sinon la densité de porteurs en excès réduit la charge de la dislocation, ceci a pour effet de réduire la hauteur de la barrière de potentiel. La diminution de cette barrière est telle que le flux de porteurs majoritaires compense la densité de porteurs minoritaires en excès.

La variation du taux d'occupation f pour une dislocation chargée négativement en absence d'injection est donnée par:

$$\frac{df}{dt} = nC_e(1-f)2D - 2Dfg_e \quad (2.3.4)$$

C_e est le coefficient de capture d'un électron de la bande de conduction vers un niveau de la dislocation.

g_e est le coefficient d'émission d'un électron d'un niveau de la dislocation vers la bande de conduction.

D est le nombre total de sites sur la dislocation par unité de volume.

A l'équilibre thermodynamique i.e.

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad \text{soit} \quad f = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_d + W - E_F}{kT}\right)} \quad (2.3.5)$$

et en injection faible, le bilan détaillé de l'équation (2.3.4) devient:

$$\frac{df(z)}{dt} = \underbrace{n(z)C_e[1-f(z)]2D}_{\text{capture des majoritaires}} - \underbrace{2Df(z)g_e}_{\text{émission des maj}} - \underbrace{\delta p_c(z)}_{\text{capture des min}} + \underbrace{\delta n f(z)}_{\text{capture}} \quad (2.3.6)$$

où δp_c est la densité de porteurs minoritaires piégés par la dislocation et $\delta n f(z)$ représente une densité linéique de porteurs libres, issus par unité de temps d'un flux le long de la ligne de dislocation.

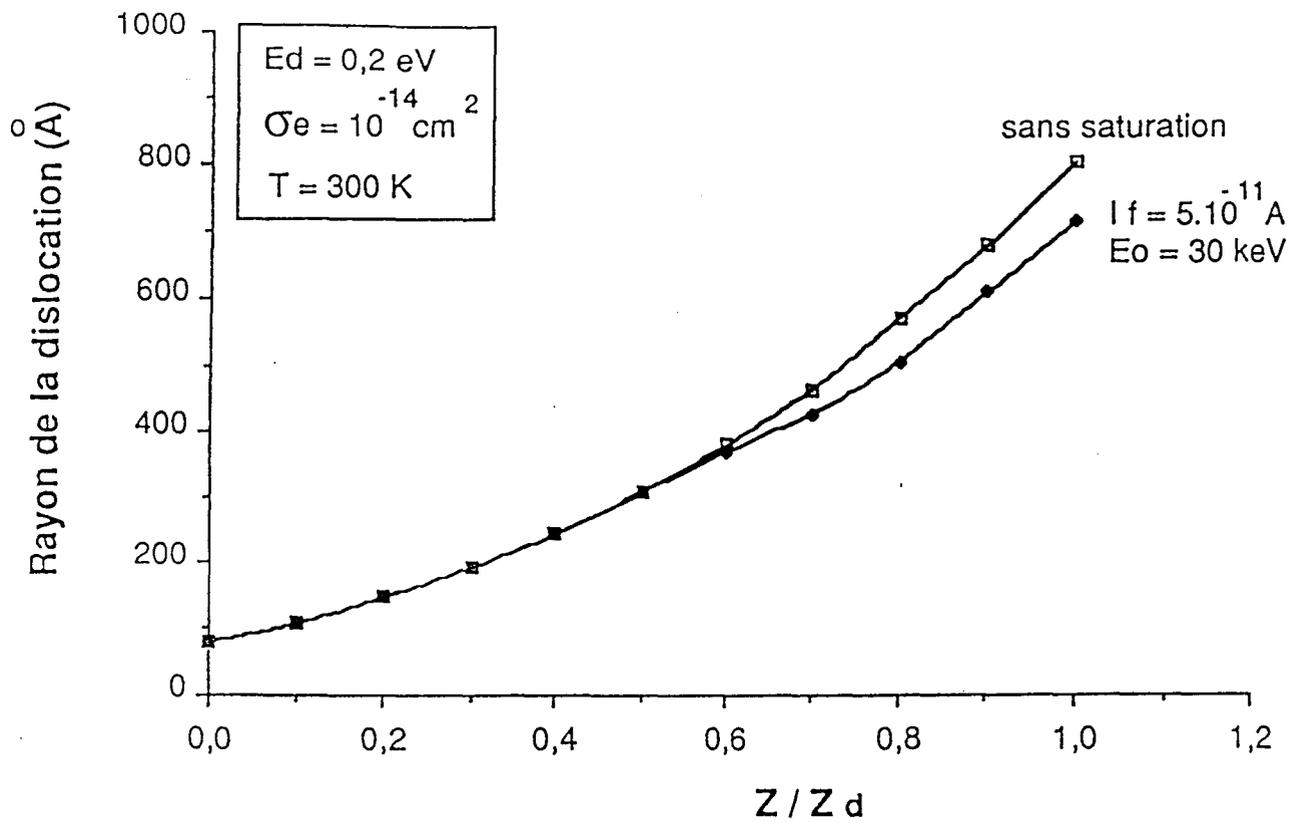


Figure III-13: Influence du courant de faisceau sur la variation du rayon de la dislocation dans la zone de charge d'espace.

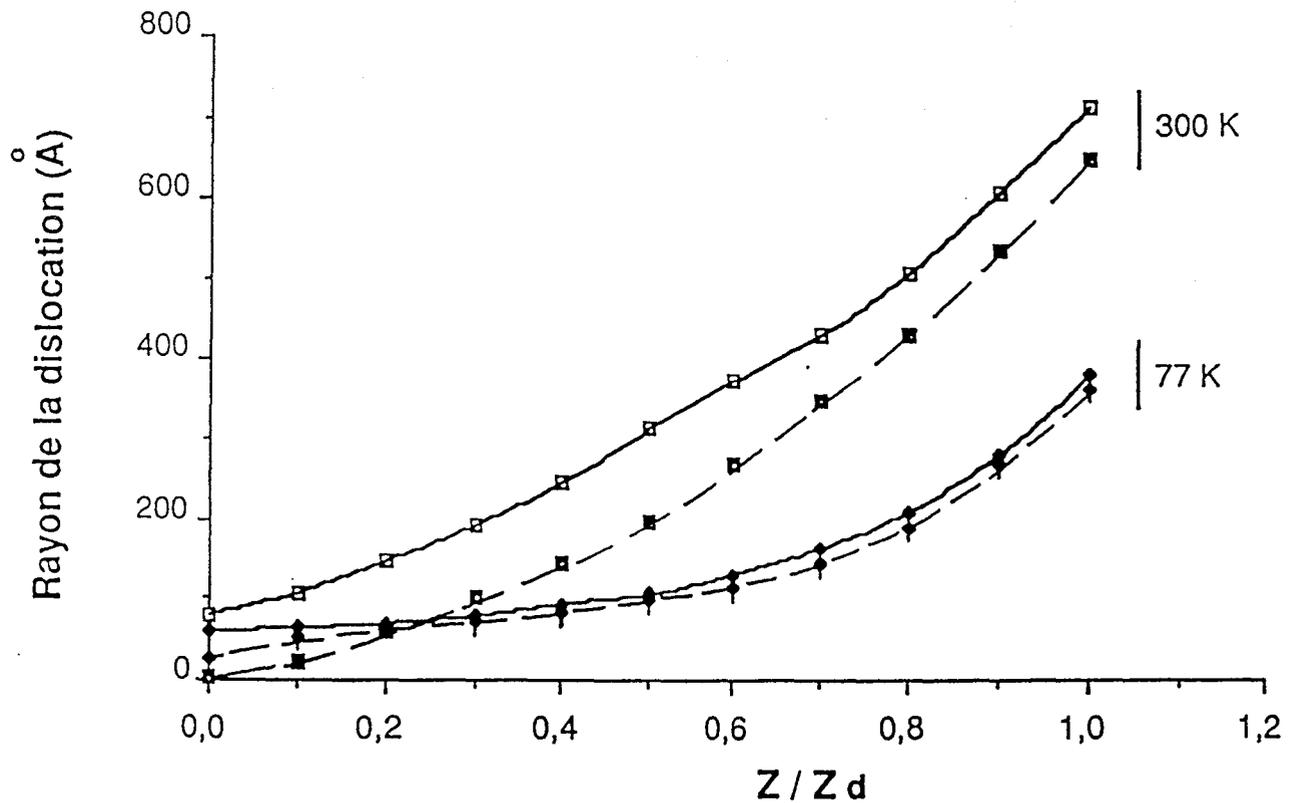


Figure III-14: Influence de la température sur la variation du rayon de la dislocation dans la zone de charge d'espace.

En supposant que tous les porteurs générés à l'intérieur du cylindre entourant la dislocation sont instantanément recombinés, on peut écrire:

$$\delta p_c = \int_0^{R(z)} g(r, z) d^2 r \quad (2.3.7)$$

et le taux d'occupation de la dislocation s'exprime alors sous la forme

$$f(z) = \frac{1 - \frac{\delta p_c \exp(\frac{W}{kT})}{n_0 C_e 2D}}{1 + \exp(\frac{E_d + W - E_F}{kT})} \quad (2.3.8)$$

A partir de ces dernières équations, on détermine de façon auto-cohérente, le rayon de la dislocation.

La figure III-13 représente l'influence de l'injection et de la température sur la variation du rayon de la dislocation.

La figure III-14 représente la variation de $R(z=z_d)$ avec la position du niveau de la dislocation et de sa section efficace de capture σ_e à 300K et à 77K.

D) Recombinaison dans la zone de diffusion:

Dans la zone de diffusion, la densité de porteurs minoritaires s'écrit: $p(r) = p_0(r) + \delta p(r)$, où $p_0(r)$ est la solution de l'équation de continuité en absence de la dislocation. En faisant l'hypothèse que la vitesse de recombinaison à la surface du cylindre entourant la dislocation est infinie, les conditions aux limites à l'extérieur du cylindre sont:

- i- $p(r) = 0$ à la surface de l'échantillon et à l'infini.
- ii- $p(r) = 0$ à la surface du cylindre d'écran.

Le courant E.B.I.C δI recombiné à la dislocation est alors la somme de deux termes:

$$\delta I = \underbrace{\frac{e}{\tau} \int_{V_d} \exp(-\frac{z}{L}) p_0(r) dr}_{\delta I_1} - \underbrace{(-eD) \int_{S_d} \exp(-\frac{z}{L}) grad(\delta p) dS}_{\delta I_2} \quad (2.3.9)$$

Le premier terme est analogue à celui de Donolato excepté qu'il n'y a pas de paramètre phénoménologique représentant la "force au défaut", le second terme tient compte de la distribution des porteurs en présence de la dislocation.

Remarque: ce calcul ne tient pas compte de l'effet de saturation, il n'est valable que pour des tensions d'accélération telles que la fonction de génération est spatialement étendue ce qui implique une capture moins importante des porteurs minoritaires.

II.3.2. Résultats numériques:

à partir des simulations numériques, on peut tirer les résultats suivants:

E _d (eV)	Rayon Z=Z _d	Contraste en (%)		
		Zone de charge d'espace	Zone de diffusion	total
0.2	800	3.6	9.7	13.3
	730	3.1	9.4	12.5
	650	2.5	9	11.5

TableauIII-1

$N_d=510^{16} \text{ cm}^{-3}$. $L=0.3\mu\text{m}$. L'effet de saturation dans la zone de charge d'espace n'est pas pris en compte.

1) A partir du tableau III-1 on remarque que le contraste est d'autant plus important que les niveaux associés aux dislocations sont plus éloignés du niveau de Fermi, le contraste E.B.I.C est proportionnel à l'écart entre le niveau de Fermi et le niveau de la dislocation.

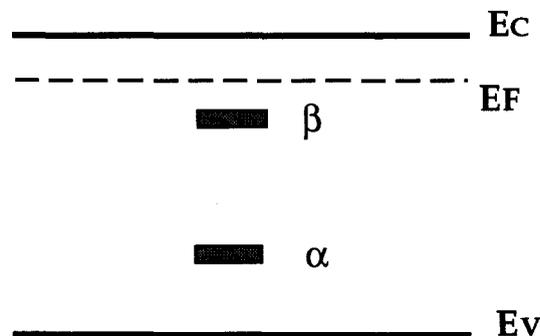


Figure III-15: Position des niveaux des dislocations α (As(g)) et β (Ga(g)) dans un semiconducteur de type n

E_d (eV)	Courant de faisceau (A)	σ_e (cm ²)	Rayon $z=z_d$	Contraste en (%)		
				Zone de charge d'espace	Zone de diffusion	total
0.2	300	10 ⁻¹⁴	710	3	9.4	12.4
	77	10 ⁻¹⁴	380	1.5	4.35	5.85
0.6	300	10 ⁻¹⁴	650	2.5	9	11.5
		10 ⁻¹⁶	645	2.45	8.95	11.4
	77	10 ⁻¹⁴	380	1.5	4.35	5.85
		10 ⁻¹⁶	340	1.25	4.1	5.35

Tableau III-2

Influence de la température et de la section efficace de capture sur le contraste E.B.I.C. $E_0=30$ KeV. $N_d=510^{16}$ cm⁻³. $L=0.3\mu m$ à 300k et $L=0.15\mu m$ à 77K. L'effet de saturation est pris en compte uniquement dans la zone de charge d'espace. $I_b=510^{-11}$ A. Le contraste a été calculé dans la zone de diffusion en prenant comme rayon R sa valeur en bas de zone de charge d'espace.

2) l'effet de saturation avec la température est plus important pour les dislocations dont le niveau neutre est plus éloigné du niveau de Fermi, le contraste E.B.I.C augmente avec la température.

E _d (eV)	Courant de faisceau (A)	σ _e (cm ²)	Rayon z=z _d	Contraste en (%)		
				Zone de charge d'espace	Zone de diffusion	total
0.2	0	0	800	3.6	9.7	13.3
	510 ⁻¹¹	10 ⁻¹⁴	710	3	9.4	12.4
		10 ⁻¹⁵	700	2.8	9.25	12.05
	510 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁴	700	2.8	9.25	12.05
		10 ⁻¹⁵	670	2.6	9.15	11.75
	0.6	0	0	650	2.5	9
510 ⁻¹¹		10 ⁻¹⁴	650	2.5	9	11.5
		10 ⁻¹⁶	645	2.45	8.95	11.4
510 ⁻¹⁰		10 ⁻¹⁴	650	2.5	9	11.5
		10 ⁻¹⁶	640	2.4	8.9	11.3

Tableau III-3

Influence du courant de faisceau et de la section efficace de capture sur le contraste E.B.I.C. E₀=30KeV, N_d=510¹⁶ cm⁻³ et L=0.3μm.

L'effet de saturation est pris en compte uniquement dans la zone de charge d'espace.

Le contraste a été calculé dans la zone de diffusion en prenant comme rayon R sa valeur en bas de zone de charge d'espace.

3) Le tableau III-3 indique que dans la zone de charge d'espace, l'effet de saturation est d'autant plus important que le niveau de la dislocation est éloigné du niveau de Fermi (à section de capture égale).

En résumé:

Sans saturation ($\delta p_c=0$): Les valeurs théoriques de contraste E.B.I.C sont du même ordre de grandeur que les contrastes expérimentaux. Les résultats numériques ont également révélé un contraste plus important pour les dislocations α que pour les dislocations β , ceci semble qualitativement cohérent avec la position respective de leur niveau par rapport au niveau de Fermi. D'autre part, ces calculs introduisent la dépendance en température du contraste par l'intermédiaire soit de la longueur de diffusion, soit de l'effet de saturation correspondant au franchissement thermique de la barrière.

Avec saturation ($\delta p_c \neq 0$): Les valeurs de contraste E.B.I.C obtenues sont très faibles par rapport aux valeurs expérimentales; pas de distinction entre les dislocations α et β .

II.3.3. Conclusion:

Ce modèle est arrivé pour la première fois sans introduire le moindre paramètre phénoménologique, à estimer des valeurs quantitatives de contraste E.B.I.C. Dans l'équation de diffusion on a tenu compte pour la première fois du champ électrique de la dislocation et ceci de façon auto-cohérente. Ce modèle permet également de positionner les dislocations α et β dans la bande interdite dans le GaAs de type [n] [37] et [p] [38]: ces résultats sont en accord avec ceux obtenus en photoluminescence [39], à partir des mesures d'effet Hall [40] et d'absorption optique [41]. A partir de la concordance des valeurs théoriques et expérimentales, ce modèle apporte une preuve supplémentaire que la recombinaison intrinsèque aux dislocations ne peut être exclue. La faible valeur des contrastes calculés numériquement en tenant compte de l'effet de saturation, montre clairement que la recombinaison des porteurs minoritaires, ne peut pas être limitée par la capture thermique des majoritaires, telle que l'a suggérée Wilshaw. Farvacque et Sieber, ont alors introduit pour cela, l'idée d'un courant de majoritaires le long de la ligne de la dislocation ($\delta n_f(z)$).

Néanmoins ce modèle reste incomplet; en effet les sections efficaces de capture des dislocations ne sont pas calculées numériquement. Ce modèle ne tient donc pas compte de la variation de ces paramètres en fonction de la température et de l'injection. Par ailleurs, en raison de la difficulté de la résolution de l'équation de continuité dans la zone de diffusion,

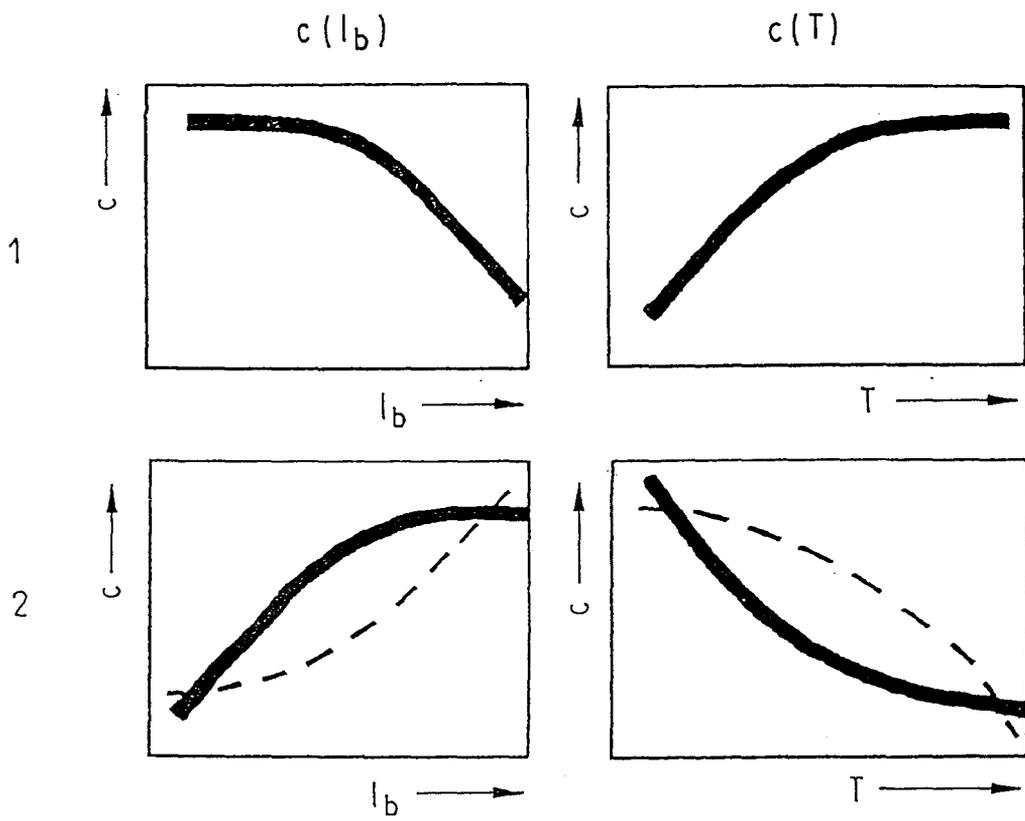


Figure III-16: Illustration des deux groupes de comportement du contraste.

ce modèle ne peut pas calculer l'effet de saturation des dislocations α et β en dehors de la zone de charge d'espace.

II.4. Réflexion sur la dépendance du contraste en injection et température [42]:

Introduction:

Kittler et al se sont intéressés à la dépendance du contraste E.B.I.C et CL des défauts étendus en fonction de l'injection et de la température. Ils ont observé deux groupes distincts de comportement du contraste des dislocations (figure III-16). Le premier groupe est caractérisé par une pente $C(I_b)$ négative et une pente $C(T)$ positive, le deuxième par une pente $C(I_b)$ positive et une pente $C(T)$ négative. Les auteurs associent le premier comportement aux défauts chargés (niveaux profonds) et le second aux niveaux légers.

II.4.1. Dépendance du contraste E.B.I.C et CL en fonction de l'injection et de la température:

Pour chaque groupe, les dépendances $C(I_b)$ et $C(T)$ forment un couple, donc pour un même type de dislocations, les deux comportements peuvent exister. Ce comportement n'est donc à priori, pas lié au caractère intrinsèque de la recombinaison, mais est plutôt relié à la nature des défauts se trouvant au coeur des dislocations (centres profonds ou niveaux légers).

Le premier groupe i.e. pente négative pour $C(I_b)$ et positive pour $C(T)$ observé expérimentalement par Wilshaw et al, résulte du remplissage par les porteurs créés par le faisceau, du niveau profond extrinsèque associé à la dislocation.

Ce comportement a été également observé sur des précipités de $NiSi_2$ dans du Si de type n [43], il est attribué, à l'existence d'une zone de charge d'espace entourant ces particules, qui jouerait alors, le même rôle qu'une barrière de potentiel d'une diode de Schottky. Ces derniers résultats expérimentaux concordent parfaitement avec les simulations de contraste théoriques obtenues par Donolato dans le cas d'un défaut sphérique [18]. Donolato, a en effet montré, que l'extension spatiale du champ électrique associé à de tels défauts, est de l'ordre du micron, analogue à une zone de charge d'espace entourant ces précipités.

Le deuxième groupe est quant à lui associé à la présence des niveaux légers dans les dislocations. En effet, en utilisant la théorie de recombinaison de Shockley-Read-Hall (S-R-H), on trouve que pour des niveaux légers, le contraste E.B.I.C ou CL des dislocations, augmente quand l'injection augmente à température constante et diminue lorsque la température augmente à courant de faisceau constant.

II.4.2. Modélisation du contraste Kittler et al [44]:

Selon Donolato le contraste E.B.I.C est inversement proportionnel à la durée de vie des porteurs minoritaires: $C \propto \frac{1}{D\tau}$ (2.4.1)
 τ est la durée de vie des porteurs à l'intérieur du volume du défaut.
 D est le coefficient de diffusion.

En supposant que la durée de vie des porteurs à l'intérieur du volume du défaut, est contrôlée par un certain type de centres de recombinaison sans interactions, auquel cas, la théorie de recombinaison S-R-H est applicable, on obtient l'expression du coefficient de recombinaison R:

$$R = \frac{np - n_i^2}{(n + n_1)\tau_{p0} + (p + p_1)\tau_{n0}}$$

avec $\tau_{p0} = \frac{1}{N_t \sigma_p \langle V_{th} \rangle_p}$

$$\tau_{n0} = \frac{1}{N_t \sigma_n \langle V_{th} \rangle_n}$$

$$n_1 = N_c \exp\left(\frac{E_t - E_C}{kT}\right) \quad (2.4.2)$$

et $p_1 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right)$

où n et p sont respectivement les densités d'électrons et de trous hors équilibre.

n_i est la concentration intrinsèque des électrons.

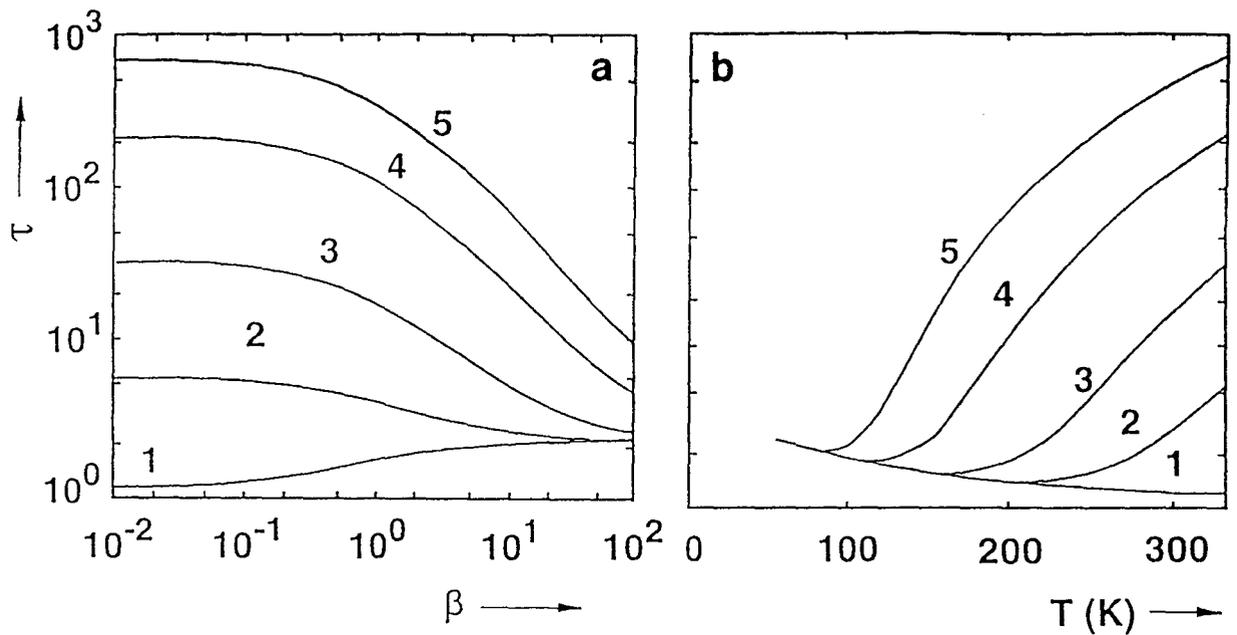


Figure III-17: Variation de la durée de vie de recombinaison selon la théorie SRH pour:

1) $E_d=0.5$ eV, 2) $E_d=0.2$ eV, 3) $E_d=0.15$ eV, 4) $E_d=0.1$ eV, 5) $E_d=0.07$ eV au dessus de la bande de valence: a) en fonction de l'injection β à $T=300$ K, b) en fonction de la température à faible injection ($\beta=0.01$).

τ_{n0} , σ_n et $\langle V_{th} \rangle_n$ sont respectivement la durée de vie des porteurs minoritaires, la section efficace de capture et la vitesse thermique des électrons.

τ_{p0} , σ_p et $\langle V_{th} \rangle_p$ les valeurs correspondantes aux trous.

N_t est la densité de pièges.

E_t est la position du niveau d'énergie des pièges dans la bande interdite.

E_c et E_v sont respectivement les densités d'état dans la bande de conduction et dans la bande de valence.

Sachant que $n=n_0+\Delta n$ et $p=p_0+\Delta p$, avec n_0 et p_0 les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre thermodynamique, et Δn la densité de porteurs en excès avec:

$$\tau = \frac{\Delta n}{R} \quad \text{on obtient} \quad \tau = \frac{(n_0 + n_1 + \Delta n)\tau_{p0} + (p_0 + p_1 + \Delta n)\tau_{n0}}{n_0 + p_0 + \Delta n} \quad (2.4.3)$$

Pour un semiconducteur de type p, avec $\tau_{n0} = \tau_{p0} = \tau_0$, l'expression de la durée de vie devient:

$$\tau = \frac{\tau_0(1 + 2\beta + \frac{n_1}{p_0} + \frac{p_1}{p_0})}{(1 + \beta)} \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{\Delta n}{p_0} \quad (\text{le niveau d'injection}) \quad (2.4.4)$$

La figure III-17 montre la variation de la durée de vie S-R-H en fonction de l'injection et de la température, pour différentes positions E_d du défaut par rapport à la bande de valence.

Dépendance du contraste en température et en injection:

Comme

$$D \propto \mu T \quad \text{et en supposant que} \quad \mu \propto T^{-1} \Rightarrow$$

$$D \text{ est indépendant de la température} \Rightarrow C \propto \tau^{-1}(T)$$

donc:

$$(2.4.5)$$

$$C(T) \propto \tau^{-1}(T)$$

$$\text{et} \quad C(I_b) \propto \tau^{-1}(I_b)$$

On remarque à partir de la variation de la durée de vie S-R-H en fonction de l'injection et de la température que pour un niveau léger, le contraste augmente quand la température augmente ou l'injection diminue. De même qu'une diminution du contraste quand la température augmente, ou l'injection diminue, caractérise un niveau profond.

II.4.3. Conclusion:

Dans ce modèle Kittler et al en utilisant une simple théorie de recombinaison (théorie S-R-H), expliquent les variations qualitatives du contraste E.B.I.C et CL des dislocations, en fonction de la température et de l'injection. Ce modèle interprète pour la première fois, les courbes de contraste en fonction de l'injection à pente $C(I_b)$ positive [47], alors que les théories précédentes, en raison de l'effet de saturation, ne pouvaient justifier des augmentations de contraste en fonction de l'injection. Selon ce modèle, la recombinaison des porteurs aux dislocations, est un mécanisme purement extrinsèque, lié uniquement à la présence de défauts au coeur des dislocations. Cependant, des calculs basés sur un mécanisme de recombinaison intrinsèque, ont montrés que des dislocations "propres", peuvent produire un contraste E.B.I.C [36].

Bien que les simulations théoriques de la variation du contraste E.B.I.C et CL, en fonction de l'injection et de la température, soient en parfait accord avec les résultats expérimentaux [47, 44, 48], le modèle de Kittler et al ne permet pas de remonter aux valeurs quantitatives. De plus, ce modèle ne tient pas compte de la physique de la dislocation (charge, niveau d'énergie et statistique d'occupation des niveaux d'énergie de la dislocation).

III. Conclusion générale

Toutes les théories citées antérieurement tentent d'interpréter ou plus exactement, de justifier des résultats de contraste E.B.I.C ou CL obtenus expérimentalement. Mais la plupart du temps, ces théories ne font pas appel aux propriétés électroniques des dislocations. Malheureusement, cette démarche ne peut aboutir à un véritable modèle physique, capable d'interpréter les mécanismes de recombinaison associés aux dislocations, en fonction des paramètres physiques extrinsèques, tels que l'injection et la température ou intrinsèques, tels que le caractère α ou β des dislocations 60° (dans les composés III-V).

A notre connaissance, aucun modèle théorique n'a été développé dans la littérature, concernant l'étude des mécanismes de capture de la dislocation et donc la détermination quantitative de la section efficace de capture des porteurs minoritaires. Ce paramètre représente évidemment, la solution indispensable au développement des modèles théoriques de contrastes E.B.I.C et CL. Les coefficients de capture des porteurs minoritaires et majoritaires, devront naturellement être calculés de manière auto-cohérente, sous injection en fonction des propriétés électroniques du milieu, dans lequel se trouve la dislocation. De cette manière, nous pourrions approfondir nos connaissances sur les processus de recombinaison associés aux dislocations. Ce dernier point fera l'objet du chapitre suivant "Mécanismes de recombinaison des porteurs minoritaires aux dislocations et conséquences sur le contraste E.B.I.C".

Bibliographie du chapitre III

- [1]: C Donolato., *Optik*, **52**, 19, (1978/79).
 - [2]: L Pasemann., *Ultramicroscopy*, **6**, 237, (1981).
 - [3]: T Figielski., *Solid. State. Electron*, **21**, 1403, (1978).
 - [4]: R Labush., *J. Physique*, **40**, C6-81, (1979).
 - [5]: C Donolato., *J. Appl.Phys* , **54** (3), 1314, (1983).
 - [6]: C Donolato and H. Klann, *J. Appl. Phys*, **51**(3), 1624, (1980).
 - [7]: C Donolato., *Optik*, **52**, 19, (1978/79).
 - [8]: C Donolato., *Proc. SEM Symp. IITRI., Chicago*, 257, (1979).
 - [9]: C Donolato. and P Venturi., *Phys. Stat. Sol (a)*, **73**, 377, (1982).
 - [10]: C Donolato., *Applly. Phys. Lett.*, **34**, 80, (1979).
 - [11]: M Kittler. and W Seifert., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **66**, 573, (1981).
 - [12]: A Ourmazd., *Cryst. Res. and Techn.*, **16**, 137, (1981).
 - [13]: L Pasemann. , *Phys. Stat. Sol. (a)*, **69**, K199, (1982).
 - [14]: C Donolatol., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **65**, 649, (1981).
 - [15]: C Donolatol., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **66**, 445, (1981).
 - [16]: C Donolato. and H Klann., *J. Apply. Phys.*, **51**, 1624, (1980).
 - [17]: M Kittler. and W Seifert., *Cryst. Res. and Techn.*, **16**, 157, (1981).
 - [18]: C Donolato., *Semic. Sci. Technol.*, **7**, 37, (1992).
 - [19]: M Kittler., J Lärz., W Seifert., M Seibt. and W Schrötter., *Apply. Phys. Lett.*, **58**, 911, (1991).
 - [20]: C Donolato., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **135**, K13, (1993).
 - [21]: A Ourmazd. and G R Booker., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **55**, 771, (1979).
 - [22]: P M Petroff., R A Logan. and A Savage., *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 287, (1980).
-

- [23]: P M Petroff., R A Logan. and A Savage., J. of Microscopy, **118**, 255, (1980).
- [24]: H Blumtritt. and R Gleichmann., Ultramicroscopy, **2**, 405, (1977).
- [25]: H Menniger., H Raidt. and R Gleichmann, Phys. Stat. Sol (a), **58**, 173, (1980).
- [26]: M Beer., H Menniger., H Raidt. and W Rohrbeck., Phys. Stat. Sol (a), **61**, 365, (1980).
- [27]: B Sieber., Colloque C6, **suppl. n°6**, tome 24, (1989).
- [28]: J-L Farvacque. and B Sieber., Revue. Phys. Appl. **25**, 353, (1990).
- [29]: J-L Farvacque., A Miri. and B Sieber to be published in Scanning. Microscopy (Toronto Marsh 1994).
- [30]: M Lax., Phys. Rev., **119**, 1502, (1960).
- [31]: P Wilshaw. and G R Booker., Inst. Phys. Conf. Ser **76**, section 8, (1985).
- [32]: S A Galloway., P Wilshaw. and T S Fell., Inst. Phys. Conf. Ser. **134**, section 2, (1993).
- [33]: P R Wilshaw., T S Fell. and G R Booker., Point and extended defects in Semiconductors (eds. G. Bendek, A Cavallini., W Schrötter), Plenum Publishing Corps., (1989).
- [34]: P R Wilshaw. and T S Fell., Inst. Phys. Conf. Ser. **104**, 85, (1989).
- [35]: P R Wilshaw., T S Fell. and M D Coteau., Journal de phys. IV. C6, **Suppl. au J. de phys III, Vol 1**, (1991).
- [36]: J-L Farvacque. and B Sieber., Revue. Phys. Appl. **C6**, 165, (1989).
- [37]: P Carton thèse de physique "Caractérisation de GaAs massif et contraste E.B.I.C des dislocations". Université des sciences et techniques de Lille I (1990).
- [38]: B Sieber., J-L Farvacque. and A Miri., Phys. Stat. Sol. (a), **138**, 673, (1993).
-

- [39]: D. Vignaud and J.L. Farvacque, J. Appl. Phys, **87**, 281, (1989).
- [40]: D. Ferré and J.L. Farvacque, R.P.A. **25**, 353, (1990).
- [41]: D. Vignaud and J.L. Farvacque, J. of Appl. Phys, **65**, 1516, (1989).
- [42]: M Kittler. and W Seifert., Phys. Stat. Sol. (a), **138**, 687, (1993).
- [43]: M Kittler., W Seifert. and Z J Radzimski., Appl. Phys. Lett., **62**, 2513, (1993).
- [44]: M Kittler. and W Seifert., Mat. Sci. and Eng. B., **24**, 78, (1994).
- [45]: L Pasemann., Phys. Stat. Sol. (a), **84**, 133, (1984).
- [46]: M Kittler., J Lärz., W Seifert., M Seibt. and W Schrötter., Appl. Phys. Letters., **58**, 911, (1991).
- [47]: M Kittler., C Ulhaq-Bouillet. and V Higgs., Mat. Sci. and Eng., **B24**, 52, (1994).
- [48]: M Kittler., C Ulhaq-Bouillet. and V Higgs. to be submitted to . Appl. Phys. (1995).
- [49]: E B Sokolova., Sov. Phys. Semiconductors., **3**, 1266, (1970).
- [50]: W. T. Read. Phil. Mag. **45**, 775, (1954).
- [51]: R. Labush and W. Schrötter. Collective treatise on dislocations. Ed by FNR Nabarro. Vol. 5 127, (1980).
- [52]: B.Sieber, Phil. Mag. B., **55**, 585, (1987).

Chapitre IV

**Mécanismes de
recombinaison des
porteurs aux dislocations:
Conséquences sur le
contraste E.B.I.C**

I.Introduction:

A notre connaissance, aucune tentative théorique n'a été réalisée dans l'étude des mécanismes de recombinaison des porteurs minoritaires aux dislocations, notamment concernant la détermination théorique de la section efficace de capture des minoritaires. Ce dernier paramètre est manifestement la clef indispensable, pour la compréhension des mécanismes physiques, liés à la recombinaison des porteurs aux dislocations.

Dans ce chapitre, nous citerons d'abord les propriétés les plus importantes des différents champs électriques associés aux dislocations, ensuite, nous introduirons les concepts physiques concernant la recombinaison non radiative en présence d'un champ électrique, concepts clairement établis par Abakumov et al [1]. Ces derniers concepts nous ont permis de proposer un nouveau modèle physique, conduisant à déterminer de manière auto-cohérente, l'efficacité de recombinaison des porteurs minoritaires d'une dislocation, due à l'existence d'un champ électrique entourant la ligne de la dislocation. Puis, nous relierons ce coefficient de capture auto-cohérent, à la force du défaut établie par Donolato [2].

La solution au premier ordre de l'équation de diffusion est utilisée, afin d'obtenir des valeurs quantitatives et qualitatives du contraste E.B.I.C des dislocations, en fonction des paramètres intrinsèques tels que le type As(g) (α) ou Ga(g) (β) des dislocations 60° (dans les composés III-V) i.e, à travers leurs états électroniques et les caractéristiques du dopage du matériau massif [3], ou à travers des paramètres extrinsèques, tels que la température [4 à 11] et l'injection [12,13,14].

Pour une revue détaillée voir [15].

Nous verrons qu'une comparaison des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux, nous permettra d'approfondir nos connaissances sur les propriétés physiques des dislocations et de déterminer la structure de bande associée à chaque type de dislocation. Plus particulièrement, nous montrerons que le potentiel de déformation dû au champ de contraintes des dislocations, joue un rôle fondamental pour obtenir des valeurs réalistes de contraste E.B.I.C et permet également de déterminer la variation du contraste

en fonction de la température, de l'injection et des caractéristiques physiques des dislocations telles que leur densité de charge linéaire.

I.1. Introduction du modèle:

L'efficacité de recombinaison R correspond à la capture simultanée des porteurs minoritaires et majoritaires. Ainsi, afin d'obtenir des résultats auto-cohérents, on doit établir une équation d'équilibre des flux de porteurs à la dislocation. Ceci constitue en fait la base de notre modèle physique .

D'autre part, le mécanisme de capture est efficacement contrôlé par le mécanisme le plus lent.

Nous avons vu au chapitre I que les dislocations agissent soit à travers leurs propriétés extrinsèques i.e, leur atmosphère de Cottrell, soit à travers leurs propriétés intrinsèques reliées soit, aux niveaux d'énergie unidimensionnels introduits dans la bande interdite, soit au champ de déformation que les dislocations créent autour d'elles. Ces effets intrinsèques peuvent simplement être décrits par l'existence d'un champ électrique ou de manière équivalente par un décalage rigide des bandes dû à l'existence d'un potentiel électrique $V(r)$, qui dans le cas des effets de coeur est attractif pour les porteurs minoritaires et répulsif pour les majoritaires, mais qui est attractif pour les deux types de porteurs dans le cas des potentiels associés au champ de déformation.

I.2. Champ électrique dû aux effets de coeur:

En raison des liaisons pendantes non appariées et même si reconstruction du coeur il y avait, les dislocations sont à l'origine de l'existence de niveaux électroniques unidimensionnels dans la bande interdite. Dans un tel cas, en fonction de la position du niveau de Fermi, la ligne de la dislocation possède une densité de charges linéaire λ qui crée un potentiel d'interaction électrostatique infini. Afin de rendre finie cette interaction électrostatique il faut calculer cette densité de charges λ de manière auto-cohérente en tenant compte bien sûr des effets d'écrantage. Pour cela deux modèles sont communément utilisés:

i-approximation de Debye-Hückel où l'écrantage est réalisé par une redistribution des porteurs libres [16,17,18].

ii-approximation de Read où l'écrantage est assuré par une extraionisation des impuretés [19,20].

Bien que différents, tous ces modèles permettent de calculer de manière auto-cohérente, la densité de charges linéaire λ .

Soit une dislocation alignée le long de l'axe oz dans un système de référence donné, avec une densité de charges linéaire λ . La distribution de n charges élémentaires piégées par unité de volume, sur des dislocations alignées suivant l'axe z est donnée par:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{-ne}{D} \delta(x)\delta(y) = \lambda\delta(x)\delta(y)$$

et l'expression du potentiel non écrané dans l'espace réciproque est

$$\boxed{V_{ext}(q) = \frac{2\pi\lambda\delta(q_z)}{\epsilon_0 q^2}} \quad (IV.1.1)$$

En divisant l'expression (IV.1.1) par la fonction diélectrique statique de Debye-Hückel $\epsilon(q)$ tel que $\epsilon(q) = \epsilon_r \left(1 + \frac{k_{DH}^2}{q^2}\right)$ afin d'obtenir la transformée de Fourier du potentiel total et en appliquant la transformée de Fourier inverse, on obtient immédiatement l'expression du potentiel électrostatique dans l'espace direct:

$$\boxed{V_Q(r) = \frac{\lambda K_0(k_{DH}r)}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}} \quad (IV.1.2)$$

où K_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro de second espèce, k_{DH} est le vecteur d'onde de Debye-Hückel ($K_{DH} = \frac{1}{\lambda_{DH}}$) calculé à partir de l'écrantage dû au porteurs libres uniquement correspondant à

$$K_{DH}^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0\epsilon_r kT} \quad (IV.1.3)$$

I.3. Potentiel de déformation:

Le champ de déformation associé aux dislocations est responsable d'un déplacement hétérogène des différentes mailles du réseau cristallin. De ce déplacement résulte un potentiel cristallin qui ne possède plus la périodicité du cristal parfait et joue donc le rôle d'un potentiel diffuseur pour les électrons libres. Par analogie avec le potentiel de déformation introduit par Bardeen et Shockley [21] pour l'étude de la diffusion des porteurs libres par les phonons, Dexter et Seitz [22] ont associé un potentiel de déformation à la dilatation locale introduite par le champ de déformation des dislocations (coin).

Pour un semiconducteur à gap direct, le potentiel est donné en un point r de l'espace par [51]:

$$V_{\text{def}}(r) = E_D \text{Tr}(\overline{\overline{\varepsilon(r)}}) \quad (\text{IV.1.4})$$

où E_D est la constante de déformation (déterminée de façon expérimentale sur des matériaux déformés de façon homogène).

Pour une dislocation coin et en présence d'un milieu isotrope la trace $\text{Tr}(\overline{\overline{\varepsilon(r)}})$ du tenseur de contraintes est donnée par:

$$\text{Tr}(\overline{\overline{\varepsilon(r)}}) = \frac{b_c(1-2\nu)}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin(\theta)}{r} \quad (\text{IV.1.5})$$

où b_c est la composante coin du vecteur de Burgers et θ est l'angle (r , b_c).

En divisant la transformée de Fourier du potentiel $V_{\text{def}}(r)$ par la fonction diélectrique de Debye-Hückel, afin d'obtenir l'expression du potentiel écranté dans l'espace de Fourier, et en appliquant une nouvelle fois la transformée de Fourier inverse de l'expression totale, on obtient immédiatement l'expression du potentiel de déformation dans l'espace direct:

$$V_{\text{def}}(r, \theta) = -\frac{E_D b_c (1 - 2\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \sin(\theta) k_{\text{DH}} K_1(k_{\text{DH}} \cdot r) \quad (\text{IV.1.6})$$

où K_1 est la fonction de Bessel de second espèce d'ordre un .

Remarque:

Un potentiel de déformation phénoménologique proposé par Bonch-Bruëvich [23], peut également être relié aux composantes de cisaillement du champ de contraintes des dislocations et implique de ce fait, des effets de potentiel de déformation pour des dislocations vis.

1.4. Potentiel piézoélectrique:

Hormis la modification apportée aux positions des mailles cristallines qui donnent naissance au potentiel de déformation, le champ de déformation de la dislocation modifie également la position relative des différents atomes constituant la maille primitive (agencement des atomes du motif). Du fait du caractère ionique des atomes constituant le motif dans les matériaux non centrosymétriques (composés III-V par exemple), cette déformation de la maille élémentaire induit l'existence de dipôles électriques, dont la résultante macroscopique constitue l'effet piézoélectrique.

A la polarisation induite $\overline{P}(\mathbf{r})$ est associée un potentiel piézoélectrique $V_p(\mathbf{r})$. Le potentiel piézoélectrique ou le mécanisme de diffusion associé au champ de déformation des dislocations par couplage piézoélectrique, fût introduit pour la première fois, par Merten [24] et fût étudié expérimentalement par Faivre et Saada dans le cas du Tellure [25] et par Ferré dans le cas de InSb et de GaAs [26].

Dans l'approximation linéaire de Voigt, le tenseur de contraintes et de déformation, le champ électrique \overline{E} et l'excitation électrique \overline{D} sont reliés par les tenseurs élastiques $\overline{\overline{C}}$, piézoélectrique $\overline{\overline{e}}$ et diélectrique $\overline{\overline{\chi}}$ du matériau selon les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \bar{C}:\bar{\varepsilon} + \bar{e} \cdot \bar{E} \\ \bar{D} &= \bar{e}:\bar{\varepsilon} - \bar{\chi} \cdot \bar{E} \end{aligned} \quad (IV.1.7)$$

De manière générale, on montre que le terme piézoélectrique $\bar{e} \cdot \bar{E}$ contribue de façon négligeable à la valeur du tenseur de contraintes. La première équation peut donc être résolue en faisant l'approximation que le matériau n'est pas piézoélectrique. Ceci, permet d'utiliser les résultats standards exprimant le champ de déformation $\bar{\varepsilon}$ associé aux dislocations.

La densité de charge piézoélectrique (non écrantée) induite au voisinage de la dislocation est donc simplement donnée par:

$$\rho(r) = \text{div}[(e \cdot \varepsilon) \chi^{-1}] \quad (IV.1.8)$$

Enfin, la transformée de Fourier du potentiel non écranté associé à cette distribution de charges est donné par:

$$V_p(\bar{q}) = -i \frac{\bar{q} \cdot \bar{e} \cdot \bar{\varepsilon}}{\varepsilon_0 \varepsilon_L q^2} \quad (IV.1.9)$$

Le calcul du potentiel piézoélectrique associé aux dislocations coins dans le cas des composés III-V a été effectué par Vignaud, Farvacque et Ferré [27]. Ces auteurs ont montré que l'on pouvait négliger l'anisotropie élastique de ces matériaux et que dans ce cas on obtient pour une dislocation coin dans un système cubique élastique et isotrope:

$$V_p(q) = \frac{2\pi b_c e_{14}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r \sqrt{3}} \frac{\delta(q_z)}{q^2} f(\Phi) \quad (IV.1.10)$$

où e_{14} est la composante (14) du tenseur piézoélectrique, b_c est la composante coin du vecteur de Burgers et $f(\Phi)$ est une fonction décrivant la

dépendance angulaire du potentiel dans un plan perpendiculaire à la ligne de la dislocation.

$$f(\Phi) = \frac{\sin(4\Phi)}{4} + \frac{5\cos(4\Phi)}{4\sqrt{2}} - \frac{(1-2\nu)}{2}\sin(2\Phi) + \frac{(\nu-1)}{\sqrt{2}}\cos(2\Phi) \quad (\text{IV.1.11})$$

Comme d'habitude, le potentiel écranté est obtenu dans le cadre d'un écrantage par les porteurs libres, en divisant le potentiel non écranté par la fonction diélectrique statique de Debye-Hückel et en appliquant la transformée de Fourier inverse.

Malheureusement la dépendance angulaire complexe de la formule (IV.1.11) ne permet pas d'obtenir un résultat final sous forme analytique. Par contre, une intégration analytique peut à notre connaissance, être menée jusqu'à l'intégration en fonction de Φ , ce qui donne:

$$V_p(r, \theta) = \frac{b_c e_{14}}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{3}} \left[\frac{\sin(4\theta)}{4} + \frac{5\cos(4\theta)}{4\sqrt{2}} \right] \int \frac{qJ_4(q.r)}{(q^2 + k_{DH}^2)} dq$$

$$+ \dots + \frac{b_c e_{14}}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{3}} \left[\frac{(1-2\nu)\sin(2\theta)}{2} + \frac{(1-\nu)\cos(2\theta)}{\sqrt{2}} \right] \int \frac{qJ_2(q.r)}{(q^2 + k_{DH}^2)} dq$$

et l'intégrale finale en q doit être réalisée numériquement.

J_n sont les fonctions de Bessel de première espèce, d'ordre n .

Evidemment tous ces potentiels agissent simultanément et conduisent par conséquent à un décalage rigide des bandes, la ligne de la dislocation est alors entourée par un champ électrique local, attractif pour les porteurs minoritaires et répulsif pour les porteurs majoritaires, excepté les majoritaires dont l'énergie est supérieure à la hauteur $W(\lambda)$ de la barrière de potentiel. Cette barrière de potentiel $W(\lambda)$ est modulée par la densité de charge λ . En effet, une diminution de la densité de charge de la dislocation, entraîne un abaissement de cette barrière de potentiel qui va permettre à une densité de charge donnée, le passage des porteurs majoritaires.

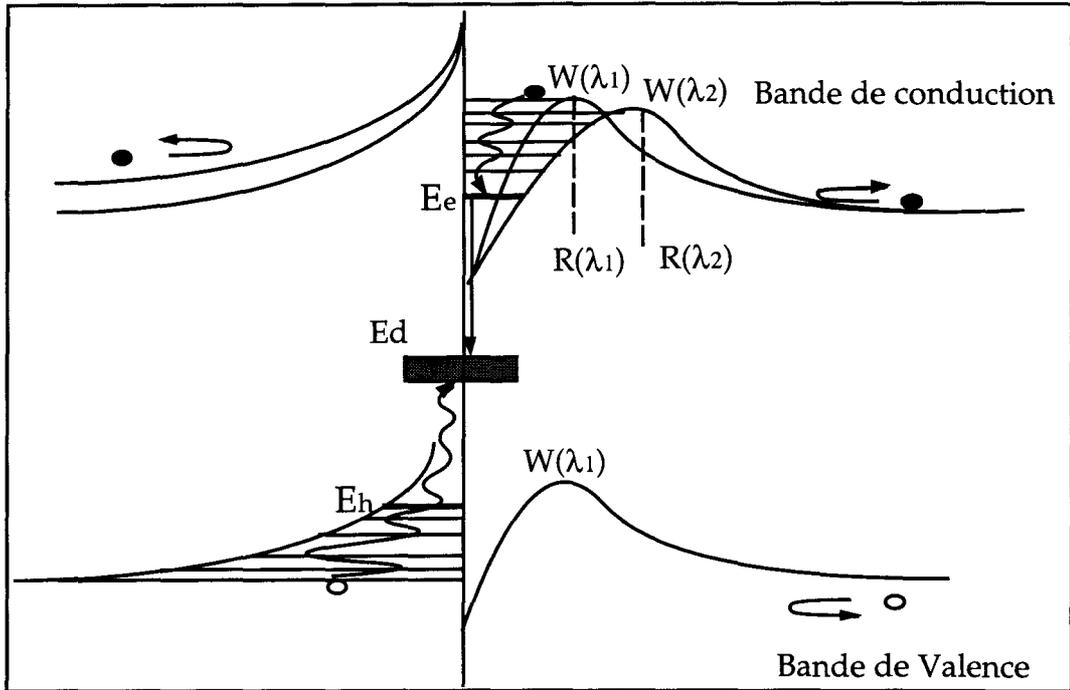


Figure IV.1: Variation du potentiel total de la dislocation en fonction de la densité de charges λ .

Dans la région attractive il existe une série de niveaux légers situés à au voisinage du coeur de la dislocation.

En raison de la complexité du potentiel total de la dislocation, une détermination du niveau fondamental de ces niveaux légers n'est pas facile mais peut être approximée comme suite: considérons seulement la zone attractive du potentiel de déformation et négligeant les effets d'écrantage, ce potentiel total est alors de la forme $-A/r$. Ensuite, à partir de la relation d'Heisenberg, on détermine l'impulsion d'une particule localisée dans une région r où règne un potentiel $V(r)$ tel que $r \cdot p \approx \hbar$. Cette particule possède par conséquent pour énergie cinétique la quantité $\frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2}$

et dont l'énergie totale E_T est donnée par $E_T = E_{\text{pot}} + E_{\text{cin}} = \frac{-A}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}$.

Le niveau fondamental est caractérisé par la valeur de r_G , qui minimise l'énergie totale.

$$\left. \frac{\partial E_T}{\partial r} \right|_{r=r_G} = 0 \Rightarrow r_G = \frac{\hbar^2}{mA} \text{ soit:}$$

$$\boxed{E_{e,h} = \frac{-m_{c,v}A^2}{2\hbar^2}} \quad \text{IV.1.13)}$$

Nous verrons par la suite que la position du niveau fondamental $E_{e,h}$, joue un rôle essentiel dans la détermination du contraste E.B.I.C des dislocations.

II. Mécanismes de recombinaison.

La recombinaison d'une paire électron-trou consiste tout simplement en la libération de l'excès d'énergie stockée par un électron qui, sous l'effet d'une perturbation extérieure, quitte sa position d'énergie à l'équilibre thermodynamique. Cette dissipation de l'énergie se fait suivant deux mécanismes fondamentaux. En effet, l'électron excité peut interagir avec soit:

- i-le champ électromagnétique====> interaction électron-photon
- ii-le champ de vibration thermique du réseau====> interaction électron-phonon.

Si la transition est directe, l'interaction est à deux particules i.e. un électron et un photon, si la transition est indirecte l'interaction est à trois particules, un électron un photon et un phonon.

II.1. Transitions radiatives:

Les champs E et B d'une onde électromagnétique se propageant dans un milieu diélectrique peuvent être exprimés à l'aide d'un potentiel vecteur A tel que

$$\boxed{E = \frac{-1}{v} \frac{\partial A}{\partial t} \text{ et } B = \text{rot}(A)} \quad \text{(IV.2.1)}$$

Dans cette équation, nous avons implicitement supposé qu'il n'existe aucune origine électrostatique du champ électrique du photon. C'est pour cela que le potentiel scalaire n'apparaît pas dans la définition de E . Ceci implique de plus, que la jauge de Lorentz couramment utilisée dans l'étude des phénomènes dépendant du temps se réduit à la jauge de Coulomb $\text{div}(\mathbf{A})=0$, que l'on nomme dans ce cas particulier 'jauge de radiation'.

II.1.a. Couplage électron-photon.

Soit un système constitué d'un électron en interaction avec un champ électromagnétique, l'hamiltonien d'un tel système s'écrit H_T :

$$H_T = H_e + H_{em} = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + H_{em} \quad (\text{IV.2.2})$$

où \mathbf{p} est l'impulsion de la particule, e est la charge élémentaire de l'électron.

En développant le carré apparaissant dans l'expression (IV.2.2) et en utilisant la jauge de radiation ($\text{div}(\mathbf{A})=0$), l'hamiltonien du système s'écrit:

$$H_T = H_e^0 + H_{em} + P \quad (\text{IV.2.3})$$

où $H_e^0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ et P l'opérateur d'interaction est donné par l'expression suivante:

$$P = -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{q}}}} (a e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + a^+ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \vec{\zeta}_{\mathbf{p}} \quad (\text{IV.2.4})$$

où $\omega_{\mathbf{q}}$ est la fréquence angulaire du photon de vecteur d'onde \mathbf{q} , $\vec{\zeta}$ est un vecteur unitaire représentant la polarisation du vecteur \mathbf{A} . a et a^+ sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création d'un photon définis par:

$$\begin{aligned} a_q |n_q\rangle &= \sqrt{n_q} |n_q - 1\rangle \text{ avec } a_q |0\rangle = 0 \\ a_q^+ |n_q\rangle &= \sqrt{n_q + 1} |n_q + 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.2.5})$$

II.1.b. Probabilité de transition: règle d'or de Fermi.

La théorie des perturbations dépendantes du temps indique que sous l'effet d'une perturbation $P(t) = W(\omega_q) \exp(i(\omega_q t - q \cdot r))$, la probabilité de transition par unité de temps entre deux états stationnaires d'un système quelconque est donnée par:

$$w_q(i, f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i | W(\omega_q) | f \rangle|^2 f_i (1 - f_f) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_q) \quad (\text{IV.2.6})$$

où f_i et f_f sont les taux d'occupation électronique de l'état initial (i) et final (f).

En utilisant les propriétés des opérateurs de création et d'annihilation d'un photon, on obtient l'expression suivante:

$$w_q(k, k') = \frac{4\pi^2 c \hbar \alpha_0 n_q}{\epsilon_r(\omega_q) m^2 \omega_q} |\langle k | e^{iq \cdot r} \zeta \cdot p | k' \rangle|^2 f_k (1 - f_{k'}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_q) \quad (\text{IV.2.7})$$

correspondant à l'absorption d'un photon tel que $E_{k'} > E_k$ ou

$$w_q(k, k') = \frac{4\pi^2 c \hbar \alpha_0 (n_q + 1)}{\epsilon_r(\omega_q) m^2 \omega_q} |\langle k | e^{iq \cdot r} \zeta \cdot p | k' \rangle|^2 f_k (1 - f_{k'}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_q) \quad (\text{IV.2.8})$$

correspondant à l'émission d'un photon.

α_0 est la constante de structure fine ($\alpha_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$) et $\epsilon_r(\omega_q)$ est la permittivité relative.

Remarque:

Comme les longueurs d'onde optique sont de l'ordre du micron donc de vecteurs d'onde environ 10000 fois plus petits que les vecteurs d'onde des électrons, on peut écrire $e^{-iq \cdot r} = 1$ et les transitions sont quasi verticales

En absence de champ extérieur, $nq=0$ est le seul terme restant, est celui qui correspond à une émission spontanée de photons.

II.2. Transitions non radiatives:

Dans un tel processus, l'électron est couplé aux vibrations thermiques du réseau et peut impliquer aussi bien des phonons optiques que des phonons acoustiques. Nous nous intéresserons au cas particulier des phonons acoustiques car seul ce type de phonon intervient dans un processus de capture par cascade, l'énergie des phonons optiques étant trop grande devant les écarts en énergie entre les niveaux légers.

En revanche, les phonons optiques sont souvent impliqués dans des mécanismes de recombinaison sur un niveau profond [48].

II.2.1. Interaction électron-phonon:

L'hamiltonien total d'un système composé d'un électron et d'un phonon acoustique s'écrit:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (IV.2.9)$$

tel que

$$H_e |k\rangle = E(k) |k\rangle \text{ et } H_{ph} |n, q\rangle = \hbar \omega_q (N_q + \frac{1}{2}) |n, q\rangle \quad (IV.2.10)$$

où l'opérateur N_q est défini comme suite: $N_q = a_{qv}^+ a_{qv}$.

a_{qv}^+ et a_{qv} sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un phonon de vecteur d'onde q correspondant à la branche v .

$$\langle N_{q,v} + 1 | a_{q,v}^+ | N_{q,v} \rangle = \left[\frac{\hbar(N_{q,v} + 1)}{2\rho_c \omega_{q,v} V} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.2.11})$$

et

$$\langle N_{q,v} - 1 | a_{q,v} | N_{q,v} \rangle = \left[\frac{\hbar N_{q,v}}{2\rho_c \omega_{q,v} V} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.2.12})$$

où ρ_c est la densité du cristal, V le volume normalisé et ω_{qv} est la fréquence du phonon.

Sous l'effet d'une perturbation, la probabilité de transition d'un électron d'un état d'énergie E_1 en absence de phonon, vers un état d'énergie E_2 avec apparition d'un phonon (de vecteur d'onde q , le long de la branche v) d'énergie $\hbar\omega_{qv}$ est donné par la règle d'or de Fermi:

$$W(E_1, E_2) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k, 0, q | H_{e-ph} | k', 1, q \rangle \right|^2 \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega_{qv}) \quad (\text{IV.2.14})$$

Soit:

$$\langle k, 0, q | H_{e-ph} | k', 1, q \rangle = \sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha, \beta} \epsilon_{\alpha, \beta}^*(v, q) \left[\frac{\hbar}{2\rho_c \omega_{q,v} V} \right]^{\frac{1}{2}} M_{21}(q)$$

avec

$$M_{21}(q) = \int F_2^*(r) e^{-iq \cdot r} F_1(r) d^3r.$$

$F_2(r)$ et $F_1(r)$ sont respectivement les fonctions d'onde correspondant à l'état final et initial de l'électron. Dans le cas des électrons libres ce sont des ondes planes représentées par:

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r} \quad \text{et} \quad F_2 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik' \cdot r}.$$

L'hamiltonien d'interaction électron-phonon peut également être exprimé en fonction des opérateurs de création et d'annihilation d'un phonon sous la forme suivante:

$$H_{e-ph} = C(q) \left[a e^{iq \cdot r} + a^+ e^{-iq \cdot r} \right] \quad (IV.2.15)$$

où $C(q)$ est un coefficient à déterminer selon le type de couplage (déformation ou piézoélectrique) dépendant du vecteur d'onde q du phonon.

L'expression de la probabilité de transition devient dans ce cas là

$$W(E_1, E_2) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |C(q)|^2 |\langle 0 | a^+ | 1 \rangle|^2 \delta_{k-q, k}^2 \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega_{q, \nu}) \quad (IV.2.16)$$

En remplaçant la sommation sur q par une intégrale, l'expression (IV.2.16) devient:

$$W(E_1, E_2) = \frac{2\pi}{\hbar} \int |C(q)|^2 \frac{q^2}{\omega_{q, \nu}} \delta_{k-q, k}^2 \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega_{q, \nu}) dq d\Omega_q \quad (IV.2.17)$$

Notons que $\hbar\omega_{q, \nu} = qS_\nu$ où S_ν est la vitesse du son de vecteur d'onde q dans la direction ν .

$$W(E_1, E_2) = \frac{\nu}{2\rho_c \hbar S (2\pi)^2} \int \frac{q^2}{\omega_q} |C(q)|^2 \delta_{k-q, k}^2 \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega_q) d(\hbar q S) d^2q \quad (IV.2.18)$$

Ce qui donne après intégration par rapport à q :

$$W(E_1, E_2) = \frac{\nu}{2\rho_c \hbar S (2\pi)^2} \frac{q^2}{\omega_q} |C(q)|^2 \int \delta(E_1 - E_2 - \hbar q S) \sin \Phi d\Phi \int_0^{2\pi} d\theta \quad (IV.2.19)$$

où l'intégrale se fait sur toutes les orientations angulaires du vecteur d'onde q , déterminées par la loi de conservation de l'énergie: $q = \frac{|E_1 - E_2|}{\hbar S}$ et illustrée sur la figure ci-dessous.

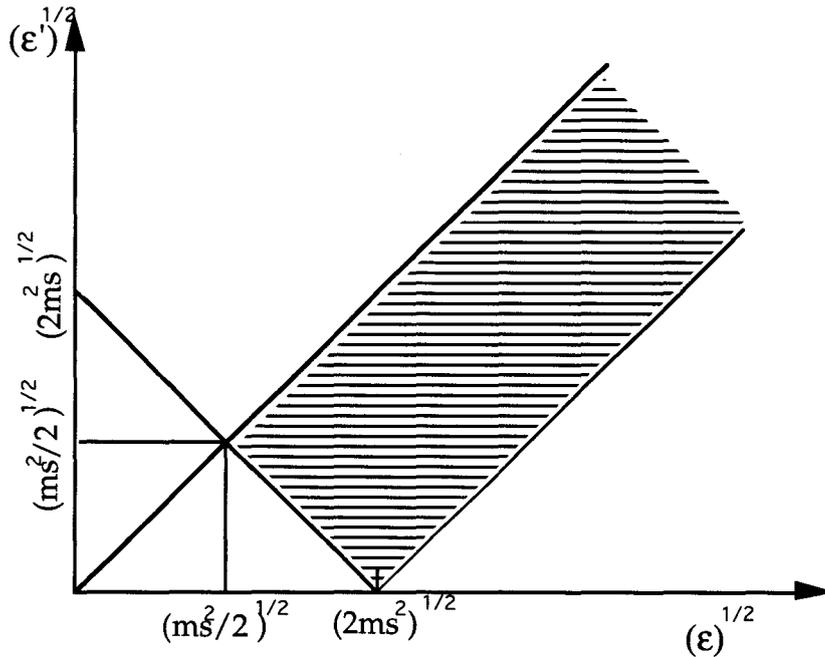


Figure IV.2: Valeurs d'énergie cinétiques initiales ϵ et finales ϵ' permises de l'électron selon la loi de conservation de l'énergie, dans le cas de l'émission d'un phonon acoustique.

$$W(E_1, E_2) = \frac{mv}{4\pi\rho_c\hbar^3S} \left[\frac{q^2}{kq\omega_{q,v}} |C(q)|^2 \right] \int (\cos(\Phi) - \frac{q}{2k} - \frac{mqS}{\hbar k}) d(\cos \Phi) \quad (\text{IV.2.20})$$

Soit:

$$W(E_1, E_2) = \frac{mv}{4\pi\rho_c\hbar^3S} \left[\frac{q^2}{kq\omega_{q,v}} |C(q)|^2 \right]_{q=\frac{|E_1-E_2|}{\hbar S}} \quad (\text{IV.2.21})$$

A) Couplage au potentiel de déformation:

Dans ce cas l'hamiltonien de l'interaction électron-phonon s'écrit:

$$H_{e-ph} = E_D i q a^+ e^{-iq \cdot r} \Rightarrow C(q) = iq E_D \quad (IV.2.22)$$

Soit:

$$W(E_1, E_2) = \frac{mvE_D^2}{4\pi\rho_c\hbar^3S} \left[\frac{q^2}{kS} \right]_{q=\frac{|E_1-E_2|}{\hbar S}} \quad (IV.2.23)$$

$$-\frac{dE}{dt} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} W(E, E')(E - E') dE' \quad (IV.2.24)$$

comme $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ la probabilité de transition non radiative s'écrit:

$$W(E_1, E_2) = \frac{mvE_D^2}{4\pi\rho_c\hbar^4S(2mE_1)^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{|E_1 - E_2|^2}{S^3} \right] \quad (IV.2.25)$$

Remarque:

Si E_1 et E_2 sont à l'intérieur de la zone hachurée de la figure (VI.2), la probabilité de transition $W(E_1, E_2)$ est égale à l'expression (IV.2.25), sinon elle vaut zéro.

Temps de relaxation de l'énergie:

Le temps de relaxation de l'énergie d'un électron d'énergie E , dû à une émission spontanée d'un phonon acoustique, est donné par: $-\frac{dE}{dt} = -\frac{E}{\tau_E}$, où $-\frac{dE}{dt}$ est l'énergie moyenne perdue par l'électron par unité de temps.

$$-\frac{dE}{dt} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} W(E, E')(E - E') dE' \quad (IV.2.26)$$

où E_{\min} est égal à E et E_{\max} correspond au retournement complet du vecteur d'onde $q=2k$. D'où $\Delta E = \hbar\omega_q = \hbar S 2k$ soit

$$\Delta E = 2\hbar S(2mE)^{\frac{1}{2}} = (8mS^2)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow E_{\max} = E - (8mS^2E)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.2.27})$$

L'intégration donne:

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} (E - E')^3 dE' = \frac{1}{4} \left[|E - E'|^4 \right]_E^{(8mS^2)^{\frac{1}{2}}} = 16m^2 S^4 E^2 \quad (\text{IV.2.28})$$

On obtient finalement:

$$\frac{E}{\tau_E} = \frac{4m^3 v E_D^2}{\pi(2mE)^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \rho_c} E^2$$

(IV.2.29)

B) Couplage piézoélectrique [49]:

Selon leur direction de propagation, les ondes acoustiques aussi bien longitudinales que transversales créent des termes de cisaillement dans le tenseur de déformation, par conséquent il apparaît une polarisation $\vec{P} = -\vec{e} : \vec{\varepsilon}$ dont la divergence représente la charge piézoélectrique induite:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = -e_{14} \sum_{i,j,k} q_i q_j \zeta_k \left[a e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + a^+ e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\text{IV.2.30})$$

où $\vec{\zeta}$ est le vecteur de polarisation.

Le potentiel piézoélectrique associé à cette charge induite, est donné par l'équation de Poisson. Ce potentiel s'écrit également en fonction des opérateurs de création et d'annihilation et se met sous la forme suivante:

$$V(\mathbf{r}) = C(\mathbf{q}) \left[a e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + a^+ e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\text{IV.2.31})$$

Avec:

$$C(q) = -e_{14} \sum_{i,j,k} q_i q_j \bar{\zeta}_k \quad (IV.2.32)$$

La probabilité de transition conduisant à la création d'un phonon est donc donnée par:

$$W(E, E') = \frac{mve^2 e_{14}^2}{4\pi\rho_c S(q)\hbar^3} \left[\frac{q^2}{kq\omega_q} \left| \sum_{i,j,k} \frac{q_i q_j \zeta_k}{q^2} \right| \right]_{q=\frac{|E-E'|}{\hbar S(q)}} \quad (IV.2.33)$$

Remarque:

La vitesse $S(q)$ de propagation de l'onde dépend de sa direction de propagation i.e:

$$W(E, E') = \frac{mve^2 e_{14}^2}{4\pi\rho_c k\hbar^3} \left[\frac{(q_x q_y \zeta_z^\alpha + q_y q_z \zeta_x^\alpha + q_z q_x \zeta_y^\alpha)^2}{q^4 c_\alpha^2(q)} \right] \quad (IV.2.34)$$

L'indice α indique que ce calcul ne concerne qu'une direction particulière de propagation, pour un seul type d'onde α et le calcul peut se faire selon deux méthodes:

i-soit en utilisant une valeur moyenne de toute l'expression [28]:

$$\left\langle \frac{1}{c} \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int \left[\frac{(q_x q_y \zeta_z^\alpha + q_y q_z \zeta_x^\alpha + q_z q_x \zeta_y^\alpha)^2}{\rho_c q^4 c_\alpha^2(q)} \right] d\Omega_q \quad (IV.2.35)$$

ii-soit en utilisant un moyenne pondérée sur toutes les directions principales de propagation $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ [29].

On obtient ainsi:

$$\langle W(E, E') \rangle = \frac{mve^2 e_{14}^2}{4\pi k \hbar^3 \langle c \rangle} = \frac{(2m)^{\frac{1}{2}} v e^2 e_{14}^2}{8\pi \hbar^2 \langle c \rangle} E^{-\frac{1}{2}} \quad (IV.2.36)$$

D'où le temps de relaxation de l'énergie:

$$\boxed{\frac{E}{\tau_E} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} v e^2 e_{14}^2 E^{\frac{1}{2}}}{4\pi\hbar^2 \rho_c}} \quad (IV.2.37)$$

III. Section de capture des dislocations.

Deux cas limites pour la capture:

Considérons une distribution de porteurs décrite par une densité $N(\vec{r}, E)$, où \vec{r} , représente les coordonnées spatiales et E l'énergie totale des porteurs. Localement, le matériau contient un défaut caractérisé par un potentiel $V(r)$, donc par un champ électrique $\vec{\zeta}$. Afin de déterminer la section de capture d'un tel défaut, on suppose qu'il n'existe pas d'autres centres de recombinaison dans ce matériau.

Une équation de continuité exprimée dans l'espace quadridimensionnel peut se mettre sous la forme suivante:

$$\frac{\partial N(x)}{\partial t} = -\text{div}[j(x)] \quad (IV.3.1)$$

où x représente un quadrivecteur (\vec{r}, E) où l'opérateur 'divergence', est un opérateur agissant à quatre dimensions.

On peut montrer en intégrant sur l'énergie E , que l'équation (IV.3.1) donne dans l'espace réel, l'équation de diffusion classique. Dans ce cas là, en présence d'un champ électrique, la densité de particules spatiale est donnée par:

$$j(\vec{r}) = n(\vec{r})\mu\vec{\zeta} - D\text{grad}(n) \quad (IV.3.2)$$

où n est la densité de porteurs au point \vec{r} , μ leur mobilité et $D = \frac{\mu kT}{e}$ le coefficient de diffusion.

De même après intégration de l'équation (IV.3.1) dans l'espace réel, on obtient cette fois-ci l'équation de diffusion dans l'espace des énergies:

$$\frac{\partial \rho(E)}{\partial t} = -\frac{\partial j_E}{\partial E} \quad (IV.3.3)$$

où nous avons utilisés les notations suivantes:

$$\rho(E) = \frac{1}{V} \int_V N(\vec{r}, E) d^3r \quad (IV.3.4)$$

et

$$j(E) = \rho(E) V_E = \rho(E) \frac{\partial E}{\partial t} \quad (IV.3.5)$$

Deux cas limites doivent être considérés pour calculer la section de capture des porteurs:

i- en raison d'une faible valeur de la mobilité des porteurs, c'est la diffusion dans l'espace réel qui limite le flux de porteurs vers le défaut. Cela implique que tous les porteurs qui diffusent vers le défaut peuvent être considérés comme instantanément recombinés.

Ou au contraire,

ii- à cause d'une grande valeur de la mobilité, c'est la diffusion dans l'espace des énergies qui limite le processus de capture des porteurs. En effet même si les porteurs sont facilement drainés vers la ligne de la dislocation, il faut néanmoins qu'ils aient le temps de perdre leur énergie (à travers des collisions inélastiques) pour transiter de leur état libre vers le niveau d'énergie du potentiel attractif du défaut.

III.1. Capture limitée par la diffusion des porteurs dans l'espace réel:

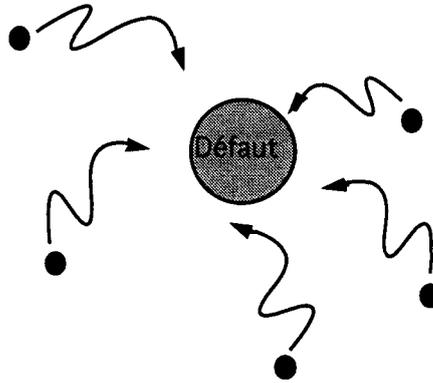


Figure IV.3: Diffusion des porteurs libres au voisinage d'un défaut

Par souci de clarté on n'utilisera qu'une approche simple due à Langevin [31,32] adaptée au cas de la dislocation.

Cette approche est la suivante:

On néglige l'écrantage et on ne considère que le champ électrique de la dislocation créé par une densité de charges linéaire λ . Alors le théorème de Gauss nous donne immédiatement l'amplitude de ce champ électrique:

$$\boxed{\zeta(r) = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon r}} \quad (\text{IV.3.6})$$

où ϵ est la constante diélectrique.

Puis on néglige la diffusion à l'intérieur de la zone où règne ce champ électrique. Par conséquent, la densité de courant correspondant à la contribution d'entraînement, est alors donné pour une distribution homogène de porteurs p_0 , par: $j = p_0\mu_p\zeta$ dont le flux à travers un cylindre de rayon r vaut

$$I = 2\pi r j = \frac{p_0\mu_p\lambda}{\epsilon} \quad (\text{IV.3.7})$$

et le coefficient de capture se définit comme étant:

$$C_p(\lambda) = \frac{I}{P_0} \Rightarrow C_p(\lambda) = \frac{\mu_p \lambda}{\varepsilon} \quad (IV.3.8)$$

Le champ électrique de l'expression (IV.3.5) est répulsif pour les porteurs majoritaires et en absence d'injection de minoritaires, le courant de porteurs majoritaires est constitué de deux termes: un terme de conduction et un terme de diffusion qui disparaissent ne donnant ainsi lieu à aucun courant de majoritaires le long de la ligne de la dislocation. C'est pour ce la qu'une injection de porteurs minoritaires, ayant pour effet immédiat une modification $\delta\zeta = \frac{\delta\lambda}{2\pi\varepsilon}$ du champ électrique à l'équilibre ou ce qui est équivalent, une modification λ' de la charge de la dislocation, est une condition sine qua non pour la capture des majoritaires par le champ électrique $\delta\zeta$.

En appliquant les mêmes arguments que précédemment, on peut alors définir comme pour les porteurs minoritaires, un coefficient de capture des majoritaires donné par:

$$C_e = \frac{\mu_e \delta\lambda}{\varepsilon} \quad (IV.3.9)$$

Ce simple résultat associé à l'équation (IV.3.5), conduit à une détermination auto-cohérente de la charge λ' , basée sur l'équation d'équilibre suivante:

$$p_0 C_p(\lambda') = n_0 C_e(\lambda') \quad (IV.3.10)$$

où n_0 et p_0 sont respectivement les densités de porteurs majoritaires et minoritaires.

On obtient ainsi le coefficient de recombinaison $R = C_p(\lambda')$ donné par:

$$C_p(\lambda') = C_p(\lambda) \frac{n_0 \mu_e}{n_0 \mu_e + p_0 \mu_p} \quad (IV.3.11)$$



Les mêmes résultats sont obtenus si on adapte au potentiel répulsif l'approche sophistiquée de Pekar [32].

Remarque:

Le coefficient de capture calculé à partir de la diffusion des porteurs dans l'espace réel, donne des valeurs de contraste E.B.I.C irréalistes de l'ordre de 100%!!!. Ceci indique clairement que la diffusion des porteurs dans l'espace réel, ne peut pas être le mécanisme qui contrôle la recombinaison des porteurs aux dislocations.

III.2 Capture limitée par la diffusion dans l'espace des énergies:

Les porteurs sont en absence de défaut, distribués uniformément dans le matériau et thermalisent rapidement en bord de bande. Par conséquent, leur distribution en énergie suit la statistique de Boltzmann. La figure IV.4 représente dans le cas de GaAs, le potentiel total (ligne chargée, piézoélectrique et déformation) en fonction de r (pour $\theta = \frac{\pi}{2}$) pour différentes valeurs de la densité de charge linéaire λ .

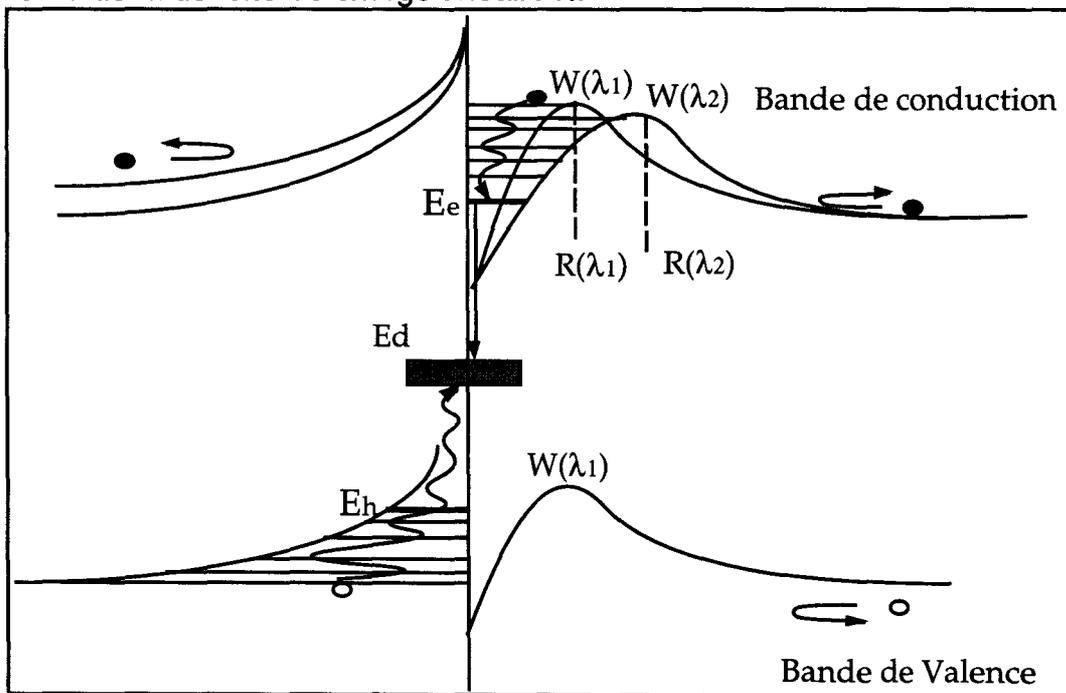


Figure IV.4: potentiel total de la dislocation (ligne chargée +piézoélectrique+déformation) le long d'une direction perpendiculaire au vecteur de burgers, pour différentes valeurs de λ ($\lambda_1 > \lambda_2$).

Cette figure montre clairement, qu'un tel potentiel est toujours attractif pour les porteurs minoritaires en l'occurrence des trous. Contrairement, la capture des porteurs majoritaires est protégée par la présence d'une barrière de potentiel, minimale en $\theta = \frac{\pi}{2}$ mais dont l'amplitude $W(\lambda)$, décroît lorsque la densité de charges linéaire λ diminue.

Comme l'a initialement suggéré Schröter [34], c'est ce potentiel qui doit être considéré dans le processus de recombinaison des porteurs. D'autre part, il a été déjà montré que la capture des minoritaires entraîne une diminution de la densité de charges λ , qui représente la condition indispensable pour la capture des porteurs majoritaires. Par conséquent, pour une injection de minoritaires donnée, le maximum du potentiel total de la dislocation localisé par $R(\lambda)$ (voir figure IV.4), définit alors un domaine de l'espace réel $[0, R(\lambda)]$ dans lequel les porteurs majoritaires seront attirés par le potentiel total de la dislocation. Pour les porteurs minoritaires, la région attractive de ce potentiel est située entre $-\infty$ et zéro (figure IV.4).

Ainsi, chaque porteur piégé doit perdre son excès d'énergie et ceci à travers des collisions inélastiques sur tous les niveaux d'énergie situés dans la région attractive du potentiel du défaut. Ces collisions inélastiques sont de deux types:

i-interaction électron-phonon acoustiques, pour laquelle les porteurs majoritaires tombent en cascade du niveau d'énergie $E=W(\lambda)$ jusqu'au niveau fondamental, des niveaux légers associés au potentiel total de la dislocation E_e . Alors que les porteurs minoritaires, se dirigent du niveau $E=0$ au niveau fondamental E_h . Le mécanisme de recombinaison est non-radiatif.

ii-interaction électron-photon: on remarque à partir de la figure IV.4, que pour des énergies situées entre E_e et E_D et entre E_h et E_D , le potentiel total de la dislocation n'est plus en mesure de fournir les niveaux légers qui sont indispensables au mécanisme de collision électron-phonon acoustique. Par conséquent, les porteurs situés sur les niveaux E_e et E_h ne peuvent perdre leur énergie en excès que par une transition radiative entre les niveaux E_e et E_D ou E_h et E_D respectivement pour les électrons et les trous.

D'autre part, en supposant que le niveau introduit par la dislocation est constitué d'un continuum de niveaux d'énergie, alors la transition du niveau E_e ou E_h vers E_D peut se faire dans ce cas là de manière non-radiative par cascade des porteurs sur ces niveaux, qui assurent le prolongement des niveaux légers jusqu'au niveau fondamental E_D de la dislocation.

Récemment [44] Farvacque a montré dans le cas d'un semiconducteur à gap direct, que la probabilité de cette transition (radiative) est très grande devant la probabilité de transition non-radiative. Par conséquent, nous nous intéresserons dans nos calculs, aux seules interactions de type électron-phonon acoustique et nous postulerons également que les niveaux fondamentaux du potentiel total de la dislocation E_e ou E_h , coïncident dans certains cas avec le niveau d'énergie E_D de la dislocation.

De manière générale, les mécanismes de collisions inélastiques ne mettent en jeu qu'une faible fraction de l'énergie du porteur (électron ou trou), par conséquent ce mécanisme n'est possible que si des niveaux légers sont fournis par le potentiel électrique du défaut. Par ailleurs, il a déjà été montré en utilisant la méthode variationnelle [35] l'existence de niveaux fondamentaux pour les trous soumis au potentiel électrique associé au champ de contraintes de la dislocation (potentiel de déformation + potentiel piézoélectrique).

Evidemment de tels calculs peuvent être également réalisés dans le cas du potentiel total de la dislocation, pour les porteurs majoritaires sous injection.

Ainsi, nous faisons l'hypothèse, en accord avec les suggestions d'Ourmazd [36], que les potentiels électriques associés aux dislocations sont en effet responsables de l'existence des niveaux légers, le long desquels intervient le mécanisme de capture des porteurs par cascade, mécanisme introduit initialement par Lax [37]. Cependant, au lieu d'utiliser la procédure de calcul de Lax [37] nous avons adapté à notre modèle une méthode de calcul développée récemment par Abakumov et Pitaïevskii [38,39].

Cette méthode est la suivante:

Au cours de leur capture, les porteurs se trouvant à l'intérieur du volume du défaut en une position r de l'espace et d'énergie totale E , comprise

entre le niveau d'énergie du défaut E_D et leur état d'énergie libre, obéissent à une fonction statistique $f(E)$ différente de la fonction statistique à l'équilibre thermodynamique, la statistique de Boltzmann $f_0(E)$. Dans tous les cas, leur densité vérifie l'équation de continuité (IV.3.3) avec la densité de courant définie en (IV.3.4).

Soit l'équation de continuité suivante:

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} = \sigma(x) - \text{div}(J) \quad (\text{IV.3.12})$$

Dans cette équation x peut être n'importe quelle quantité scalaire ou vectorielle, qui définit l'espace dans lequel on regarde la diffusion. Si l'on choisit l'espace (à une dimension) de l'énergie alors,

$$\frac{\partial \rho(E)}{\partial t} = \sigma(E) - \frac{\partial J(E)}{\partial E} \quad (\text{IV.3.13})$$

où l'énergie E est la somme de l'énergie cinétique ε et de l'énergie potentielle.

Pour les électrons, la densité d'énergie $\rho(E)$ correspond au produit de la densité d'état $n(E)$ et de la probabilité d'occupation $f(E)$ hors équilibre.

$$\rho(E) = n(E).f(E) \quad (\text{IV.3.14})$$

A partir du moment où nous sommes dans un processus de Markov, cette densité $\rho(E)$ vérifie nécessairement l'équation de Fokker Planck.

$$\frac{\partial \rho(E)}{\partial t} = -\frac{\partial [c(E)\rho(E)]}{\partial E} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} [D(E)\rho(E)] \quad (\text{IV.3.15})$$

Notons qu'en absence de toute génération (ou recombinaison), l'équation (IV.3.15) possède une primitive naturelle:

$$J(E) = c(E)\rho(E) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial E} [D(E)\rho(E)] + \text{cste} \quad (\text{IV.3.16})$$

De toute évidence, la constante est nulle car il n'existe aucun porteur et ne peut y avoir de courant dans l'espace des énergies.

Si l'on remplace à présent la densité de courant par son expression donnée en (IV.3.14), l'équation (IV.3.15) devient:

$$J(E) = \left[\frac{c(E)n(E) - n(E)}{2 \frac{\partial D}{\partial E}} \right] f(E) + D(E)n(E) \frac{\partial f}{\partial E} \quad (IV.3.17)$$

et peut s'écrire sous la forme suivante:

$$\boxed{J(E) = B(E)f(E) + A(E) \frac{\partial f}{\partial E}} \quad (IV.3.18)$$

Lorsque la distribution des électrons est celle de l'équilibre i.e. distribution de Boltzmann soit:

$$f(E) = f_0(E) = \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (IV.3.19)$$

alors il n'existe aucun flux ($J=0$) d'où:

$$B(E) = \frac{A(E)}{kT} \quad (IV.3.20)$$

Ainsi l'équation vérifiée par J , se met sous la forme suivante:

$$J(E) = B(E) \left[f(E) + kT \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right] \quad (IV.3.21)$$

On reconnaît une expression analogue à celle de l'espace direct où, en présence d'un champ électrique et de phénomènes de diffusion l'on aurait:

$$\vec{J}(E) = n\mu_n \vec{\zeta} - D \text{grad}(\bar{n}) \quad (IV.3.22)$$

Ainsi, dans l'équation (IV.3.21) le terme proportionnel à $f(E)$ est l'analogie d'un terme de dérive alors que le terme proportionnel à la dérivée est l'analogie d'un terme de diffusion. De façon à identifier la fonction $B(E)$, on suppose qu'il n'y a pas de diffusion. Alors, la seule densité de courant doit être égale à un courant de dérive dans l'espace des énergies et vaut:

$$J(E) = B(E)f(E) = n(E)f(E) \frac{\partial E}{\partial t} \Rightarrow B(E) = n(E) \frac{dE}{dt} \quad (IV.3.23)$$

Il faut noter que les seules relaxations d'énergie correspondent à la variation de l'énergie cinétique des particules. Ainsi, on peut calculer la fonction $B(E)$ en considérant la valeur moyenne spatiale de la relaxation de l'énergie cinétique. On introduit pour cela, la densité d'état cinétique $n(\varepsilon)$, il vient:

$$B(E) = \langle \rho(E) \frac{d\varepsilon}{dt} \rangle \quad (IV.3.24)$$

où ε est l'énergie cinétique des particules et où le symbole $\langle \rangle$ correspond à la valeur moyenne dans l'espace.

Dans l'expression de $B(E)$, la quantité $\frac{d\varepsilon}{dt}$ représente l'énergie perdue par unité de temps lors de collisions inélastiques calculée dans le cas de phonons acoustiques dans le paragraphe II.2

Dans un régime stationnaire, la densité de courant $J(E)$ est constante. Ceci conduit à une intégration immédiate de l'expression (IV.3.21) qui donne:

$$f(E) - f(E_2) = \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \frac{J}{kT} \int_{E_2}^E \frac{\exp\left(\frac{E'}{kT}\right)}{B(E')} dE' \quad (IV.3.25)$$

Suivant Pitaïevskii [39], on fait l'hypothèse que lorsque le niveau d'énergie E_2 est égal au niveau d'énergie E_h ou E_e , les porteurs sont instantanément recombinés. Par conséquent $f(E_2=E_e=E_h)=0$. Contrairement, à l'extérieur du défaut, la fonction de distribution des porteurs tend vers la distribution à l'équilibre de Boltzmann soit;

$$f_0(E) = \frac{p_0}{N_v} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \text{ pour les trous}$$

et

$$f_0(E) = \frac{n_0}{N_c} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \text{ pour les électrons.}$$

N_v et N_c sont respectivement les densités d'état effectives de la bande de valence et de la bande de conduction.

Donc, en posant $E=0$ pour les porteurs minoritaires et $E=W(\lambda)$ pour les porteurs majoritaires dans l'équation (IV.4.15) et en identifiant $f(E)$ à la fonction de distribution $f_0(E)$ de Boltzmann, on obtient directement la constante J et finalement le coefficient de capture

des minoritaires $C_{\min}(\lambda) = \frac{J}{p_0}$

et

des majoritaires $C_{\maj}(\lambda) = \frac{J}{n_0}$

Soit finalement

$$C_{\min}(\lambda) = \frac{kT}{N_v \int_{-|E_h|}^0 \frac{\exp\left(\frac{E}{kT}\right)}{B(E, \lambda)} dE} ; C_{\maj}(\lambda) = \frac{kT}{N_c \int_{-|E_e|}^{W(\lambda)} \frac{\exp\left(\frac{E}{kT}\right)}{B(E, \lambda)} dE}$$

(IV.3.26)

L'auto-cohérence du calcul est alors assurée par l'égalité du flux des électrons et des trous soit:

$$p_0 C_{\min}(\lambda) = n_0 C_{\maj}(\lambda)$$

(IV.3.27)

III.2.1 Calcul du coefficient B(E):

Nous avons vu dans la section précédente que $B(E) = \int N(E) \frac{dE}{dt} d^3r$, où E est l'énergie totale de la particule $E = \epsilon + V(r)$. De plus, la variation de l'énergie totale ne concerne que l'énergie cinétique, par conséquent: $\frac{dE}{dt} = \frac{d\epsilon}{dt}$ avec $\frac{d\epsilon}{dt} = \int w(\epsilon, \epsilon') (\epsilon' - \epsilon) d\epsilon' = \frac{\epsilon}{\tau(\epsilon)}$

La densité d'état N(E) correspond également à la densité d'état associée à l'énergie cinétique $n(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}}$, soit

$$B(E) = \int n(\epsilon) \frac{\epsilon}{\tau(\epsilon)} \delta[E - \epsilon - V(r)] d\epsilon d^3r \quad (IV.3.28)$$

Deux types de couplage des phonons acoustiques sont possibles:

i-couplage au potentiel de déformation.

On rappelle l'expression de $\frac{\epsilon}{\tau(\epsilon)} = \frac{mVE_D^2}{(2m\epsilon)^{\frac{1}{2}} \pi \hbar^4 \rho_c} 4m^2 \epsilon^2$ soit:

$$B(E) = \frac{2mVE_D^2}{\hbar^7 \pi^3 \rho_c} \int [E - V(r)]^2 d^3r \quad (IV.3.29)$$

ii-couplage au potentiel piézoélectrique.

Dans ce cas $\frac{\epsilon}{\tau(\epsilon)}$ est donnée par: $\frac{\epsilon}{\tau(\epsilon)} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}} V e_{14}^2 e^2}{4\pi \hbar^2 \rho_c} \epsilon^{\frac{1}{2}}$

soit:

$$B(E) = \frac{mVe^2 e_{14}^2}{8\hbar^5 \pi^3 \rho_c} \int |E - V(r)| d^3r \quad (IV.3.30)$$

VI.1. Détermination du contraste E.B.I.C.

Afin de relier le coefficient de capture C à la notion de force au défaut introduite précédemment par les différents auteurs [2,40,12], on considère la définition du temps de relaxation τ' vérifiant la relation suivante:

$$N_D \sigma \langle v \rangle \tau' = N_D C \tau' = 1 \quad (\text{IV.4.1})$$

où N_D est la densité de centres de recombinaisons, $\langle v \rangle$ est la vitesse moyenne du porteur assimilé généralement à la vitesse thermique, σ est la section efficace de capture, C le coefficient de capture et τ' est le temps de relaxation.

Dans le cas d'une dislocation occupant un volume V , la densité N_D vaut $1/V$ et le temps de relaxation τ' est donné par : $\frac{1}{\tau'} = \frac{C}{V}$.

Si on introduit à présent le concept de Donolato [40] suivant lequel la dislocation est représentée par un cylindre fermé à l'intérieur duquel, la durée de vie des porteurs est τ' , l'équation de continuité devient en présence de la dislocation:

$$D\Delta p(r) = \frac{p(r)}{\tau} + p(r) \left[\frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right] e(r) - G(r) \quad (\text{IV.4.2})$$

où $p(r)$ est la densité de porteurs minoritaires, $G(r)$ la fonction de génération, D le coefficient de diffusion relié à la longueur de diffusion par la relation $L = \sqrt{D\tau}$, et $e(r)$ est une fonction telle que: $e(r)=1$ si $r < R$ et zéro ailleurs.

En posant; γ , 'la force au défaut', tel que

$$\gamma = \frac{1}{D} \left[\frac{1}{\tau'} - \frac{1}{\tau} \right] = \frac{1}{D} \left[\frac{C}{V} - \frac{1}{\tau} \right] \quad (\text{IV.4.3})$$

l'équation de continuité s'écrit également

$$\Delta p(r) = \frac{p(r)}{L^2} + p(r)\gamma - \frac{G(r)}{D} \quad (\text{IV.4.4})$$

Prenons la transformée de Fourier de (IV.4.4) par rapport à r , où R est le rayon du cylindre entourant la dislocation.

$$\frac{\partial^2 p(q, z)}{\partial^2 z} = p(q, z) \left[q^2 + \frac{1}{L^2} \right] + \gamma \int_0^R p(r, z) e^{iq \cdot r} d\vec{r} - \frac{G(q, z)}{D} \quad (\text{IV.4.5})$$

puis remplaçons la densité $p(r, z)$ par sa transformée de Fourier inverse

$$p(r, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int p(q', z) e^{-iq' \cdot r} d\vec{q}' \quad (\text{IV.4.6})$$

alors l'équation (IV.4.5) devient

$$\frac{\partial^2 p(q, z)}{\partial^2 z} = p(q, z) \left[q^2 + \frac{1}{L^2} \right] + \frac{\gamma(z)}{(2\pi)^2} \int_0^R p(q', z) e^{i|q-q'| \cdot r} d\vec{r} d\vec{q}' - \frac{G(q, z)}{D} \quad (\text{IV.4.7})$$

Remarque:

$\gamma(z)$ est une fonction de la variable z puisque le coefficient de recombinaison auto-cohérente ne dépend que de la valeur locale de $p(r, z)$. Comme les solutions $p(q, z)$ possèdent la symétrie cylindrique et par conséquent ne dépendent pas de l'orientation angulaire θ , l'intégration en θ donne

$$\begin{aligned} \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} e^{i|q-q'| \cdot r} d\theta &= \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} e^{i(q-q')r \cos \theta} d\theta \\ &= 2\pi \int_0^R r J_0(|q-q'| \cdot r) dr \end{aligned} \quad (\text{IV.4.8})$$

où J_0 est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre zéro.

Afin d'éliminer le volume V de la dislocation, on fait tendre R vers zéro. Sachant que pour de faibles valeurs de x $J_0(x) \cong 1 - 0(x^2)$ il vient

$$\lim_{R \rightarrow 0} \frac{\gamma}{(2\pi)^2} 2\pi \int_0^R r J_0(|q-q'| \cdot r) dr \rightarrow \frac{C}{D(2\pi^2)} \quad (\text{IV.4.9})$$

et l'équation (IV.4.7) devient:

$$\frac{\partial^2 p(q, z)}{\partial z^2} = p(q, z) \left[q^2 + \frac{1}{L^2} \right] + \frac{C}{D(2\pi^2)} \int p(q', z) d\bar{q}' - \frac{G(q, z)}{D} \quad (\text{IV.4.10})$$

où bien évidemment, l'intégrale

$$\frac{1}{(2\pi^2)} \int p(q', z) d\bar{q}' = \left[\frac{1}{(2\pi^2)} \int p(q', z) e^{-iq'.r} d\bar{q}' \right]_{r=0} = p(0, z)$$

Finalement on obtient

$$\frac{\partial^2 p(q, z)}{\partial z^2} = p(q, z) \left[q^2 + \frac{1}{L^2} \right] + \frac{C}{D} p(0, z) - \frac{G(q, z)}{D} \quad (\text{IV.4.11})$$

Remarque:

On aurait obtenu obtenir plus rapidement l'équation différentielle si l'on avait postulé que la dislocation introduisait dans l'équation de diffusion un terme de type $C\delta(x)\delta(y)$. En effet, si on prend la transformée de Fourier inverse de (IV.4.11) on obtient

$$\Delta p(r, z) = \frac{p(r, z)}{L^2} + \frac{C}{D} p(0, z) \delta(x) \delta(y) - \frac{G(r, z)}{D} \quad (\text{IV.4.12})$$

Ceci montre l'équivalence stricte entre l'introduction de la force au défaut et le coefficient de recombinaison C , associé à la ligne de la dislocation. Dans cette dernière manière de procéder, on élimine ainsi aisément la notion de volume du défaut, en introduisant tout simplement un terme C que l'on peut déterminer à partir de modèles physiques.

IV.1.2. Contraste E.B.I.C d'une dislocation.

La solution générale de l'équation différentielle (IV.4.11) tenant compte de la présence de la dislocation est:

$$p(q, z) = p_0(q, z) - C \int \chi(q, z, z') p(0, z') dz' \quad (\text{IV.4.13})$$

En prenant la transformée de Fourier inverse

$$p(r, z) = p_0(r, z) - C \frac{1}{(2\pi)^2} \int \chi(q, z, z') p(0, z') dz' e^{-iq \cdot r} d\vec{q}' \quad (\text{IV.4.14})$$

en $r=0$, cette solution devient

$$p(0, z) = p_0(0, z) - C \frac{1}{(2\pi)^2} \int \chi(q, z, z') p(0, z') dz' d\vec{q}' \quad (\text{IV.4.15})$$

où

$$p_0(0, z') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \chi(q, z', z'') G(q', z'') dz' d\vec{q}' \quad (\text{IV.4.16})$$

Remarque:

$\chi(q, z, z')$ est la fonction de Green, solution standard de l'équation

$$\frac{\partial^2 \chi(q, z, z')}{\partial z^2} = \chi(q, z, z') \left[q^2 + \frac{1}{L^2} \right] - \frac{\chi(q, z, z')}{D} \quad (\text{IV.4.17})$$

correspondant clairement aux conditions limites dans le cas de l'E.B.I.C, i.e. $\chi(q, 0, z')=0$.

La solution $\chi(q, z, z')$ est donnée par:

$$\chi(q, z, z') = \frac{\exp\left[\sqrt{q^2 + \frac{1}{L^2}}|z - z'|\right] - \exp\left[\sqrt{q^2 + \frac{1}{L^2}}|z + z'|\right]}{2D\sqrt{q^2 + \frac{1}{L^2}}} \quad (\text{IV.4.18})$$

Afin de simplifier le calcul, on se limitera au développement premier ordre, et l'on fera l'hypothèse dans le terme correctif que $P(0, z')$ est égal à $p_0(0, z')$.

Dans le cadre de cette approximation, $p(q, z)$ est alors donnée par:

$$p(q, z) = p_0(q, z) - C \frac{1}{(2\pi)^2} \int \chi(q, z, z') \chi(q', z', z'') dz' dz'' d\bar{q}' \quad (\text{IV.4.19})$$

Finalement le courant E.B.I.C est donné par:

$$I = -eD \left[\int_s \text{grad}(p(r, z)) ds \right]_{z=0} = -eD \left[\frac{\partial p(q=0, z)}{\partial z} \right]_{z=0} \quad (\text{IV.4.20})$$

La dérivée de $\chi(0, z', z'')$ par rapport à z calculée en $z=0$ est évidemment égale à

$$\left[\frac{\partial \chi(0, z, z')}{\partial z} \right]_{z=0} = \frac{1}{D} e^{-\frac{z'}{L}} \quad (\text{IV.4.21})$$

La variation δI du courant E.B.I.C due à la présence de la dislocation est donnée par:

$$\delta I = \frac{-e}{(2\pi)^2} \int_0^\infty C(z) e^{-\frac{z}{L}} \chi(q', z, z') G(q', z') dz dz' d\bar{q}' \quad (\text{IV.4.22})$$

et le courant E.B.I.C de référence I_0 est égal à

$$I_0 = -e \int e^{-\frac{z'}{L}} G(0, z') dz' \quad (\text{IV.4.23})$$

Ainsi, le contraste E.B.I.C est donné par

$$C = \frac{\delta I}{I_0} = \frac{\int_0^\infty C(z) e^{-\frac{z}{L}} p_0(0, z) dz}{\int_0^\infty e^{-\frac{z}{L}} G(0, z) dz} \quad (\text{IV.4.24})$$

V.11a : Dislocations α (x) et β (\blacklozenge)

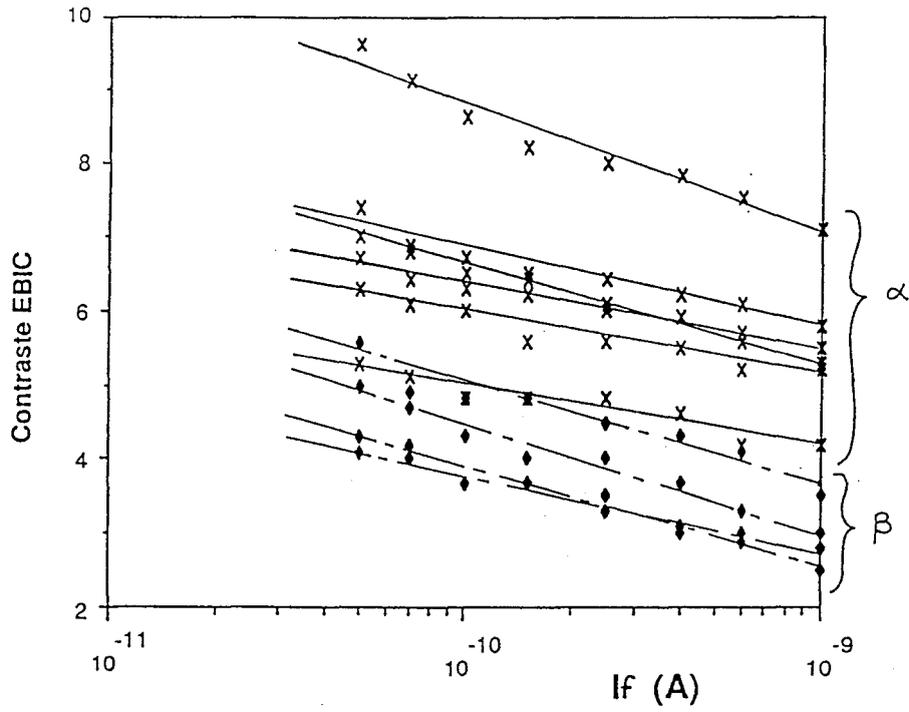


Figure IV.5: Contraste E.B.I.C des dislocations α et β en fonction de l'injection à 300K, dans le GaAs de type n.

Soit finalement:

$$C = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\int_0^{\infty} C(z) e^{-\frac{z}{L}} \chi(q, z, z') G(q, z') dz dz' d\bar{q}}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{z}{L}} G(0, z) dz} \quad (\text{IV.4.25})$$

V. Résultats numériques et discussions.

Afin de tester notre modèle, nous avons effectué des calculs numériques dans le cas de GaAs, pour les deux types de dislocations α et β . En effet, le contraste E.B.I.C et CL mesuré sur les dislocations α et β dans le cas de GaAs, a fait l'objet de plusieurs études en fonction de l'injection et de la température [14,26,41]. Parallèlement, à partir de mesures macroscopiques telles que des mesures d'absorption optique [42] ou des mesures de transport électrique [43], on a pu attribuer aux dislocations α et β des niveaux d'énergie unidimensionnels situés respectivement en milieu de la bande interdite pour la dislocation Ga(g) ($0,5\text{eV} \leq E_{\text{Ga}} \leq 1\text{eV}$) et proche de la bande de valence pour la dislocation As(g) ($0\text{eV} \leq E_{\text{As}} \leq 0,4\text{eV}$). La lettre g indique qu'il s'agit de la configuration glide.

Toutefois, la localisation de ces niveaux d'énergie associés à chaque type de dislocation reste imprécise. Pour cela, des mesures locales de contraste E.B.I.C effectuées sur des dislocations individuelles, complétées par un modèle physique réaliste, peuvent en accord avec ces résultats macroscopiques, apporter de nouvelles informations sur la position des niveaux d'énergie et les structures de bandes associées aux dislocations α et β . De plus, ces mesures nous permettront de déterminer la nature des paramètres physiques associés aux mécanismes de recombinaison des porteurs aux dislocations.

La figure IV.5 [52], représente des courbes expérimentales de contraste E.B.I.C, en fonction de l'injection à 300K. Ces courbes correspondent à des mesures de contraste E.B.I.C, réalisées sur des dislocations α et β que l'on a créé par indentation sur du matériau GaAs massif dopé n.

Bien que ces courbes montrent une large dispersion pour chaque type de dislocation on peut toutefois remarquer que statistiquement, les dislocations à coeur d'As(g) (α) possèdent un contraste E.B.I.C supérieur à celui des dislocations à coeur Ga(g) (β).

On constate également pour les deux types de dislocations, un effet de saturation qui correspond à une diminution du contraste E.B.I.C en fonction de l'injection. Cependant, la pente $C(I_f)$ pour la dislocation As(g) est supérieure à la pente $C(I_f)$ pour la dislocation Ga(g).

Quelle que soit la nature du modèle théorique, mathématique ou physique, les prédictions théoriques doivent absolument rendre compte de

- i-l'ordre de grandeur du contraste E.B.I.C
- ii-la sensibilité à chaque type α ou β des dislocations
- iii-l'effet de saturation en courant
- iv-éventuellement de la variation du contraste E.B.I.C en fonction de la température, mais cela exige la connaissance de la variation de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en fonction de la température.

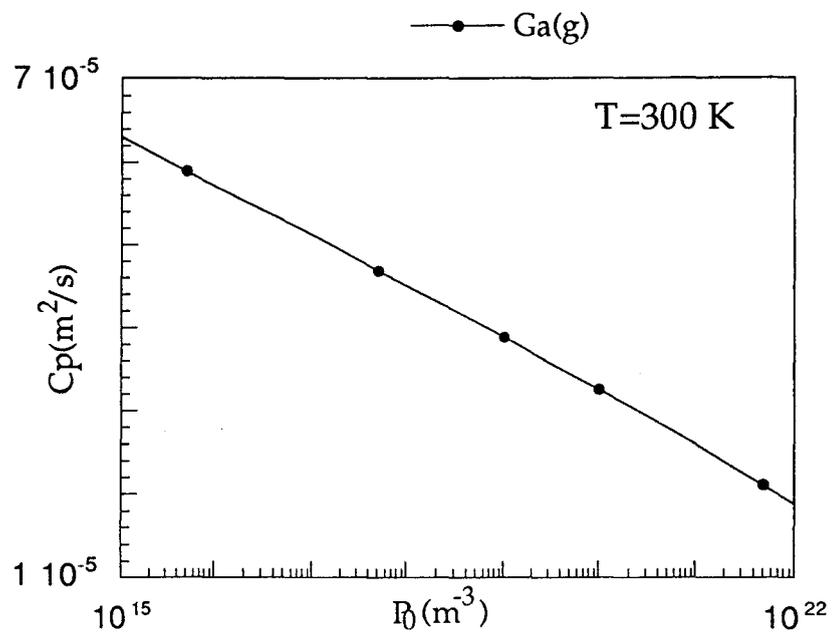


Figure IV.6-a: Coefficients de capture des porteurs minoritaires, calculés en fonction de la densité de porteurs minoritaires, dans le cas du couplage au potentiel piézoélectrique.

V.1 Couplage au potentiel piézoélectriques.

Pour commencer, nous avons considéré le cas du couplage des phonons acoustiques au potentiel piézoélectrique. En utilisant l'expression du coefficient de friction dynamique $B(E)$ donnée en IV.4.18, nous avons réalisé des calculs numériques de coefficients de capture des porteurs minoritaires, en fonction de la densité de porteurs minoritaires P_0 , puis, des calculs de contraste E.B.I.C en fonction de l'intensité du courant de faisceau. Les résultats obtenus sont représentés sur la figure ci-dessous.

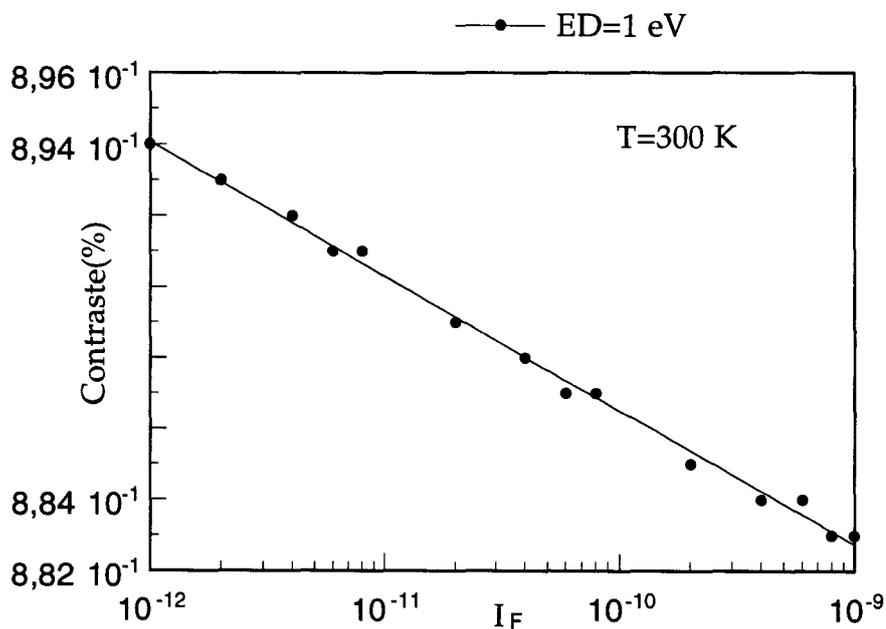


Figure IV.6: Contraste E.B.I.C calculé numériquement pour la dislocation β en fonction de l'injection à 300 K, dans le cas du couplage au potentiel piézoélectrique.

On remarque à partir de cette courbe que le couplage au potentiel piézoélectrique, donne des valeurs de contraste E.B.I.C dont l'ordre de grandeur est très petit (ne dépasse pas 1%). Ceci, ne correspond donc pas à l'ordre de grandeur des valeurs de contraste obtenues expérimentalement. D'autre part, les calculs numériques n'ont montré aucune différence entre les deux types de dislocations.

Par conséquent le couplage au potentiel piézoélectrique, n'est pas le mécanisme qui contrôle la recombinaison des porteurs aux dislocations et nous considérerons dorénavant son effet négligeable.

V.2. Couplage au potentiel de déformation.

V.2.1 Variation de la recombinaison en fonction de l'injection.

La figure (IV.7) représente dans le cas du couplage au potentiel de déformation, la variation du coefficient de capture calculé numériquement à 300K, pour les deux types de dislocations, en fonction du paramètre p_0 .

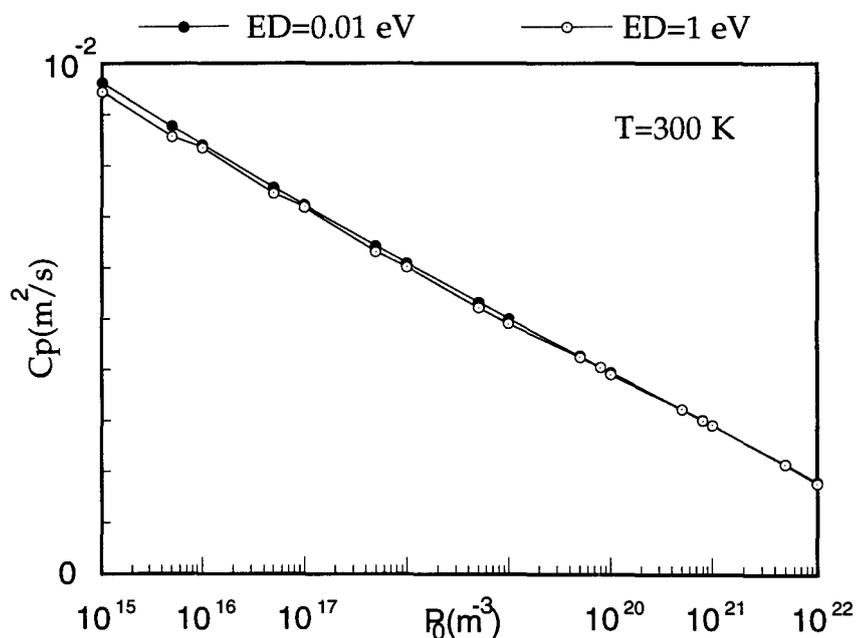


Figure IV.7: coefficients de capture des minoritaires C_p calculés à 300 K, pour les deux types de dislocations $Ga(g)$ ($E_D=1 eV$) et $As(g)$ ($E_D=0.01 eV$), en fonction de la densité de porteurs minoritaires P_0 .

Ces résultats numériques ont été obtenus en introduisant dans nos calculs, les deux types de dislocations α ($As(g)$) et β ($Ga(g)$), affectées respectivement des niveaux $E_D=0,01 eV$ et $E_D=1 eV$ et en supposant que la capture des trous et des électrons se fait par cascade jusqu'au niveau extrinsèque E_D de la dislocation et donc en négligeant le mécanisme de recombinaison radiatif.

On distingue clairement à partir de cette figure, l'effet de saturation pour les deux types de dislocations i.e. la charge de la dislocation diminue quand l'injection augmente.

D'autre part, les deux courbes présentent deux cas limites:

i-une limite supérieure pour de fortes valeurs de p_0 . Ceci correspond dans notre modèle au cas où l'effet de saturation en injection est si important, que la dislocation ne possède quasiment plus de charge sur sa ligne ($\lambda \rightarrow 0$). La figure (IV.8) représente la variation de la charge de la dislocation $Ga(g)$ en fonction de l'injection.

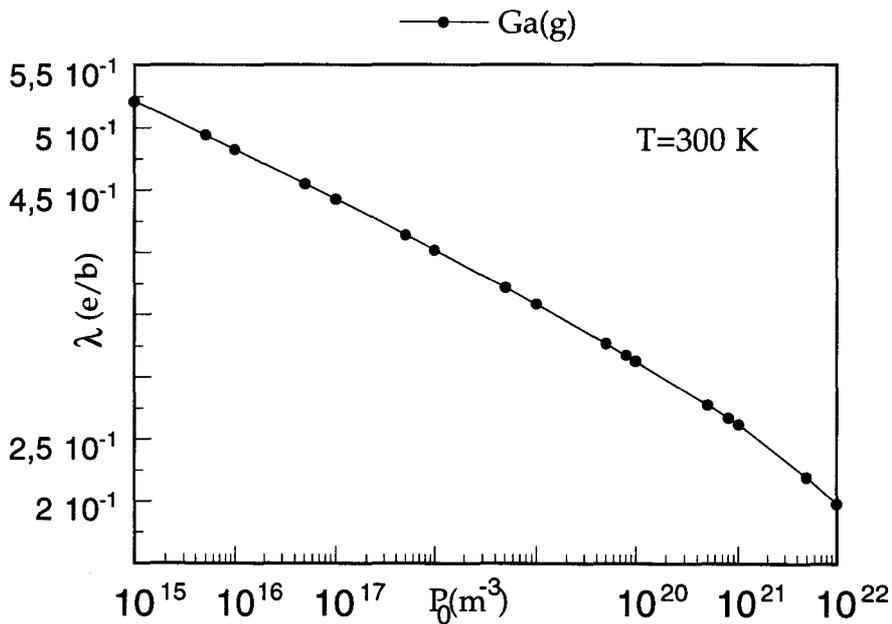


Figure IV.8: variation de la charge linéaire λ de la dislocation $Ga(g)$, en fonction de la densité de porteurs minoritaires P_0 .

ii-le deuxième cas limite apparaît pour de faibles valeurs de p_0 . Pour ces conditions, c'est le potentiel total de la dislocation qui contrôle le mécanisme de recombinaison des porteurs. Par conséquent, la densité de charges linéaire λ est le paramètre clef de la recombinaison des porteurs et au delà de ces valeurs de p_0 , le coefficient de capture diminue quand l'injection augmente.

Notons que dans le cas de la limite supérieure, seuls les potentiels associés au champ de contraintes sont présents et étant donné que ces potentiels sont aussi bien attractifs pour les porteurs majoritaires que pour les porteurs minoritaires, le coefficient de capture est déterminé uniquement à partir de la capture des trous, par cascade sur les niveaux légers, associés au potentiel du champ de contraintes des dislocations. Ainsi, à forte injection i.e. lorsque la densité de charge de la dislocation tend vers zéro, le coefficient de capture des porteurs minoritaires est constant puisque le potentiel électrique associé au champ de contraintes des dislocations, ne dépend pas de l'injection.

Plus important, les courbes de variation du coefficient de capture en fonction de l'injection, sont quasiment identiques. Cela signifie que le fait d'associer aux dislocations As(g) et Ga(g) des niveaux d'énergie situés à des positions différentes dans la bande interdite, ne permet pas de différencier les deux types de dislocations.

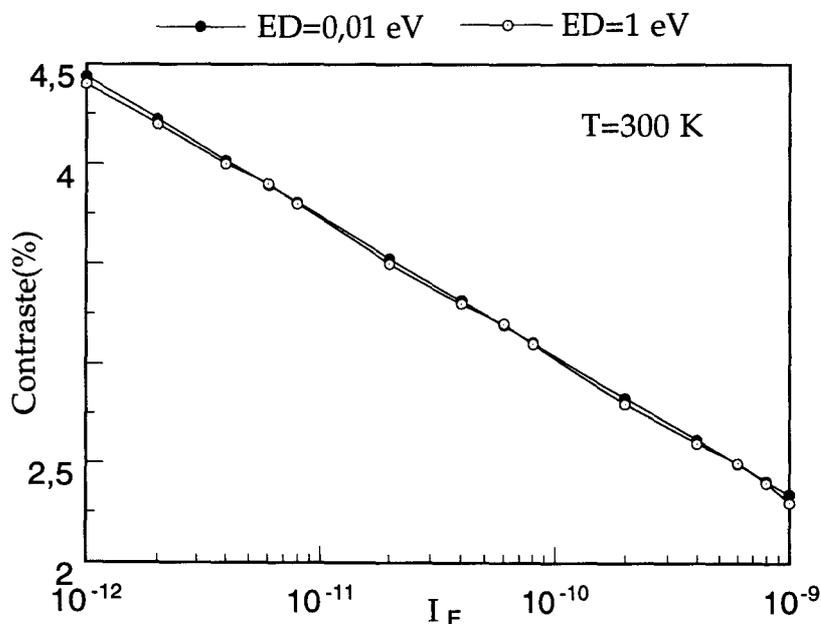


Figure IV.9: Contraste E.B.I.C. calculé numériquement à 300 K en fonction de l'intensité du courant de faisceau I_F , pour les deux types de dislocations As(g) ($E_D=0.01$ eV) et Ga(g) ($E_D=1$ eV).

La figure IV.9 représente le contraste E.B.I.C associé au coefficient de capture calculés numériquement, en fonction de l'injection, à 300K.

L'auto-cohérence est assurée par un calcul préliminaire des densités de porteurs minoritaires $p_0(0,z)$ qui en approximation au premier ordre, sont assimilés aux densités $p(0,z)$ soit, $C(z)=C[p(0,z)]=C[p_0(0,z)]$.

Interprétation:

En ayant adopté le même processus physique de recombinaison de porteurs aux deux dislocations, on s'attendait effectivement, à ne pas voir de différence entre les deux dislocations. En effet, la théorie de la capture par cascade introduite par Abakumov et al, n'est pas sensible à la valeur du niveau E_D tant que ce niveau est un niveau profond. De plus, la charge portée à l'équilibre par la dislocation ne dépend que du mécanisme de relaxation de l'énergie cinétique des porteurs. Cela voudrait dire, que quelle que soit la valeur initiale de la charge portée par chaque dislocation, les charges auto-cohérentes finales sont, à partir du moment où l'on adopte le même processus de capture, égales et indépendantes du niveau de la dislocation. Toutefois, nous pouvons remarquer à partir des courbes de la figure IV.9 que ces résultats vérifient bien le critère de saturation en injection.

Remarque:

Ces résultats numériques sont significatifs, puisqu'ils remettent en question la structure de bande utilisée jusqu'à présent. Celle-ci considérait que les dislocations α et β , introduisaient deux niveaux d'énergie amphotères unidimensionnels, situés respectivement proche de la bande de valence et en milieu de la bande interdite. Or, les résultats numériques ont montré clairement, qu'en adoptant la même structure de bande aux deux dislocations, on obtiendrait rigoureusement les mêmes valeurs de contraste E.B.I.C.

Les courbes expérimentales indiquent également deux points essentiels:

i-l'ordre de grandeur des valeurs de contraste E.B.I.C associées à la dislocation $As(g)$ α est nettement supérieur à celui des dislocations $Ga(g)$ β

ii-l'effet de saturation en injection est plus important pour la dislocation α . Ces deux points indiquent encore une fois que les dislocations α et β possèdent certainement des structures de bande différentes.

Soit à présent le modèle suivant:

Soient deux dislocations α (As(g)) et β (Ga(g)) qui introduisent respectivement un niveau d'énergie situé proche de la bande de valence et un niveau en milieu de la bande interdite. En raison de la reconstruction des liaisons pendantes au coeur des dislocations (transition de Peierls), on lève la dégénérescence du niveau de la dislocation β qui se scinde en deux niveaux, l'un vide situé proche de la bande de conduction ou résonnant, l'autre plein situé quelque part entre le milieu de la bande interdite et la bande de valence. Pour la dislocation α , le niveau intrinsèque se scinde également en deux niveaux, l'un vide situé quelque part entre la bande de conduction et le milieu de la bande interdite, l'autre plein situé à l'intérieur de la bande de valence. Par ailleurs, des calculs ab-initio de clusters (Jones) ont montré que dans le cas de GaAs,

- 1) Reconstruction des liaisons pendantes pour les partielles 90° α et β
- 2) La partielle β introduit une série de niveaux pleins situés à 0.5 eV de la bande de valence.
- 3) La partielle α introduit une série de niveaux pleins situés très proche de la bande de valence ou résonnants.

En fait, on passe pour les niveaux associés aux dislocations, d'un comportement métallique (niveaux d'énergie à moitié pleins) à un comportement semiconducteur (niveaux d'énergie vides ou pleins).

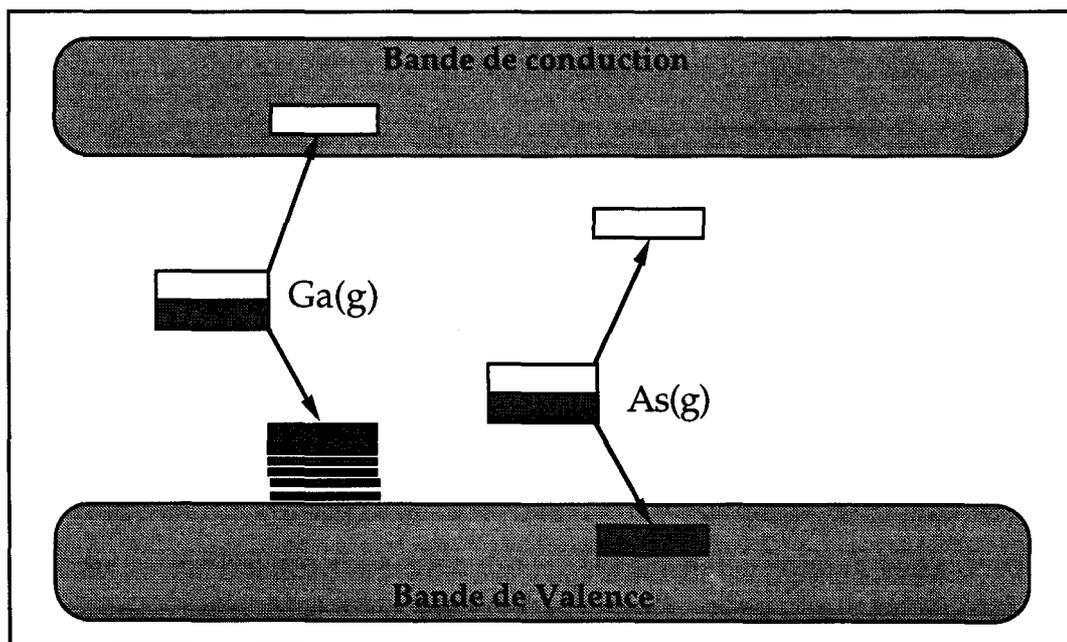


Figure IV.10: Structure de bande des dislocations α et β .

i-Mécanismes de recombinaison associé à la dislocation β .

Nous avons vu au début de ce chapitre, que la capture par cascade des porteurs ne peut se faire que sur les niveaux légers introduits par le potentiel électrique associé au champ de contraintes des dislocations. Seulement, le niveau fondamental de ces niveaux légers, ne dépasse pas une centaine de meV. Par conséquent, le continuum de niveaux d'énergie introduit par la dislocation β , assure la continuité des niveaux légers indispensables à la capture des porteurs minoritaires par cascade, jusqu'au niveau fondamental de la dislocation β .

La capture des majoritaires se fait quant à elle, par cascade des électrons jusqu'au niveau fondamental E_e des niveaux légers introduits par le potentiel électrique associé au champ de contraintes de la dislocation, puis, par recombinaison radiative sur le niveau fondamental de la dislocation.

La figure (IV.11) représente le mécanisme de recombinaison associé à la dislocation β .

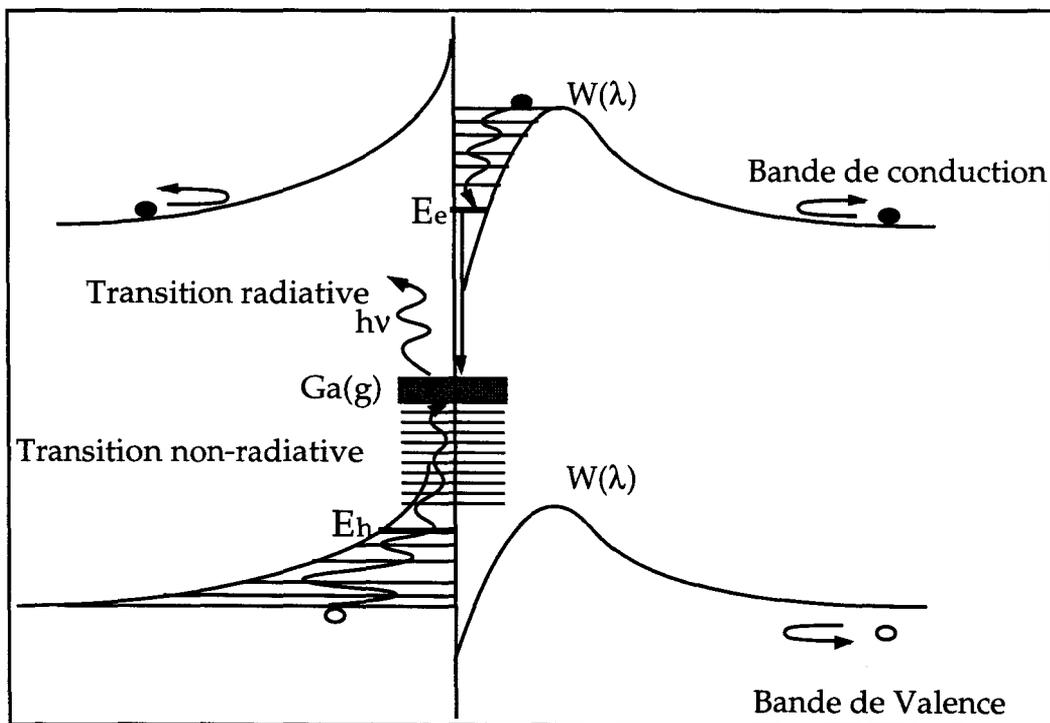


Figure IV.11: Mécanisme de recombinaison des paires électron-trou associé à la dislocation β .

Afin de vérifier ce modèle, nous avons effectué des calculs de variation du coefficient de capture des porteurs minoritaires, en fonction de la densité de porteurs minoritaires P_0 . Nous avons supposé que la capture des trous se fait par cascade jusqu'au niveau $E_D=1$ eV et que la capture des majoritaires se fait en deux temps:

i-capture par cascade sur les niveaux légers du potentiel de déformation, jusqu'au niveau E_e

ii-capture par transition radiative du niveau E_e vers le niveau E_D de la dislocation.

Nous avons également testé l'influence de la position de ce niveau ainsi que l'influence de la position du niveau E_e .

Les résultats obtenus sont représentés sur la figure IV.12

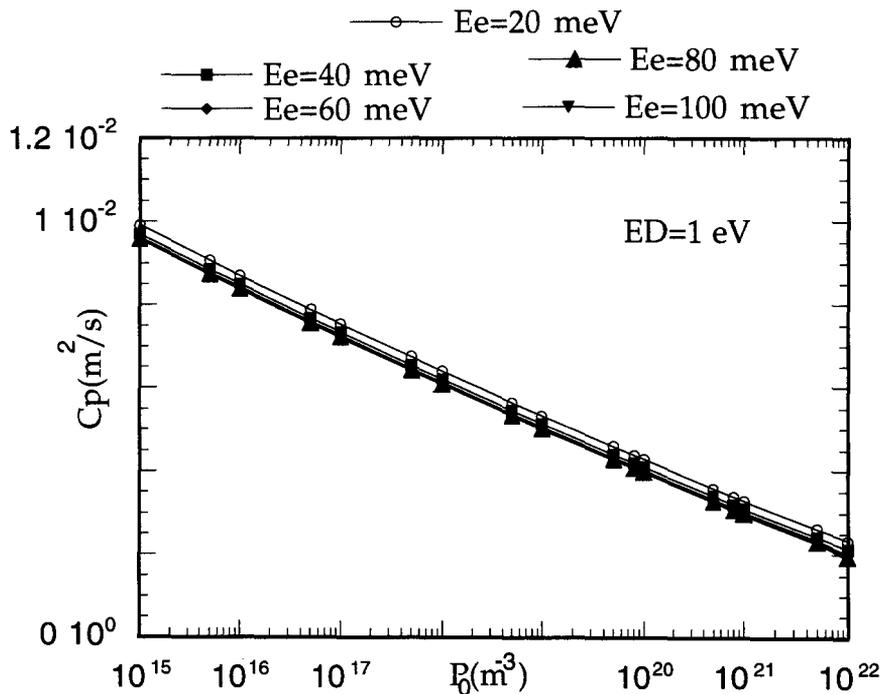


Figure IV.12: Coefficients de capture des porteurs minoritaires C_p calculé numériquement à 300 K pour la dislocation β en fonction de l'injection, pour différentes positions du niveau fondamental E_e .

Cette figure indique que le coefficient de capture des porteurs minoritaires (trous) n'est pas sensible à la valeur du niveau fondamental E_e .

ii-Mécanisme de recombinaison associé à la dislocation α .

Dans ce modèle, les porteurs minoritaires attirés par le potentiel total de la dislocation, tombent en cascade jusqu'au niveau fondamental E_h des niveaux légers, introduits par le potentiel électrique associé au champ de contraintes de la dislocation, puis se recombinent radiativement sur le niveau de la dislocation.

Les porteurs majoritaires ayant franchi la barrière de potentiel $W(\lambda)$, tombent en cascade jusqu'au niveau fondamental E_e associé à la bande de conduction, puis se recombinent radiativement sur le niveau de la dislocation.

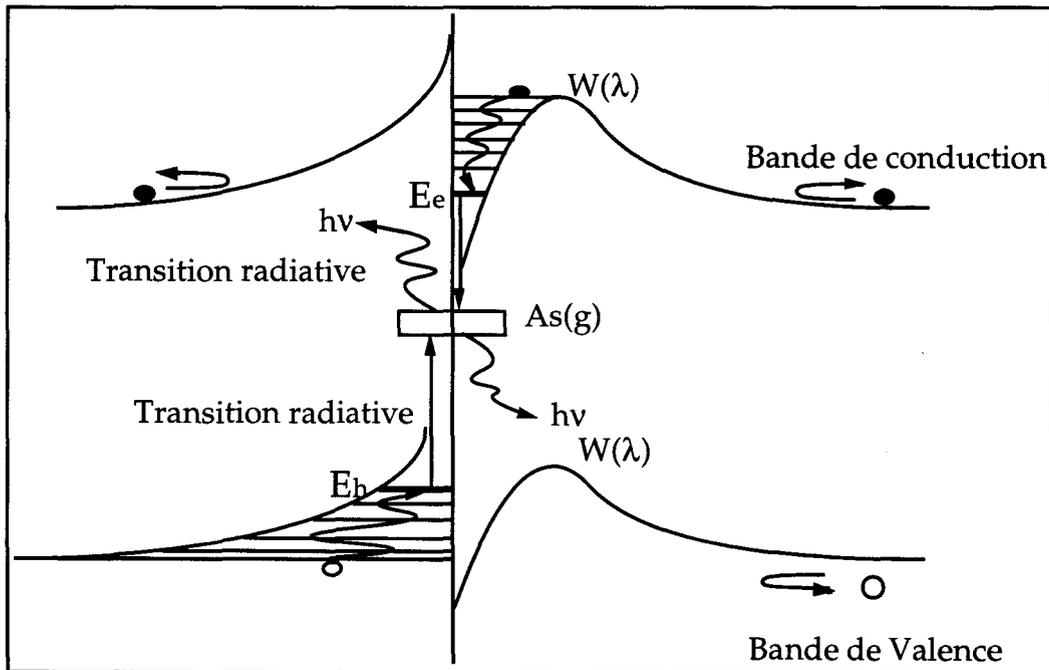


Figure IV.13: Mécanisme de recombinaison des paires électron-trou associé à la dislocation α .

De la même manière que pour la dislocation Ga(g), nous avons effectué des calculs de variation du coefficient de capture des porteurs minoritaires, en fonction de la densité de porteurs P_0 . Nous avons supposé que la capture des porteurs minoritaires se fait par cascade jusqu'au niveau E_h et que la capture des majoritaires se fait par cascade jusqu'au niveau E_e .

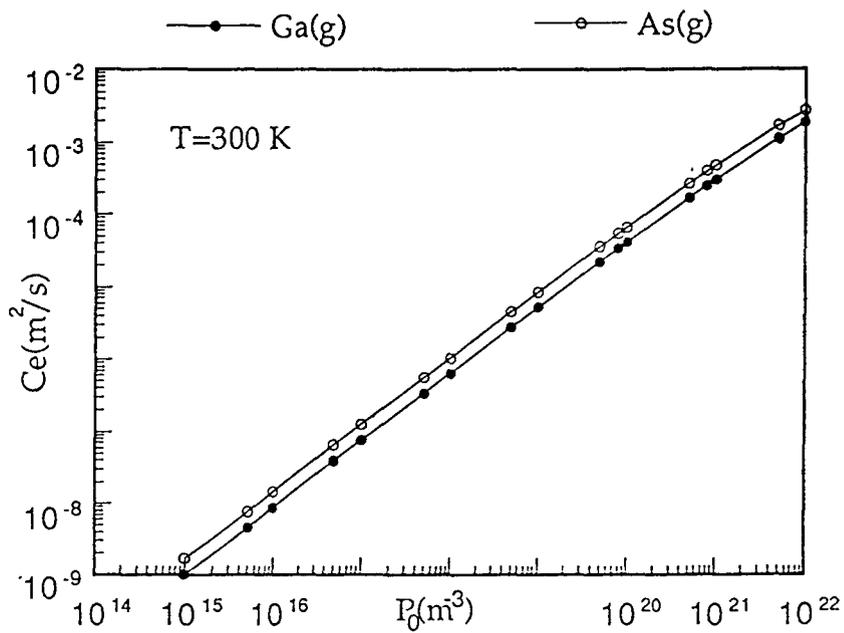


Figure IV.20: Variation du coefficient de capture des porteurs majoritaires à 300 K, en fonction de l'injection.

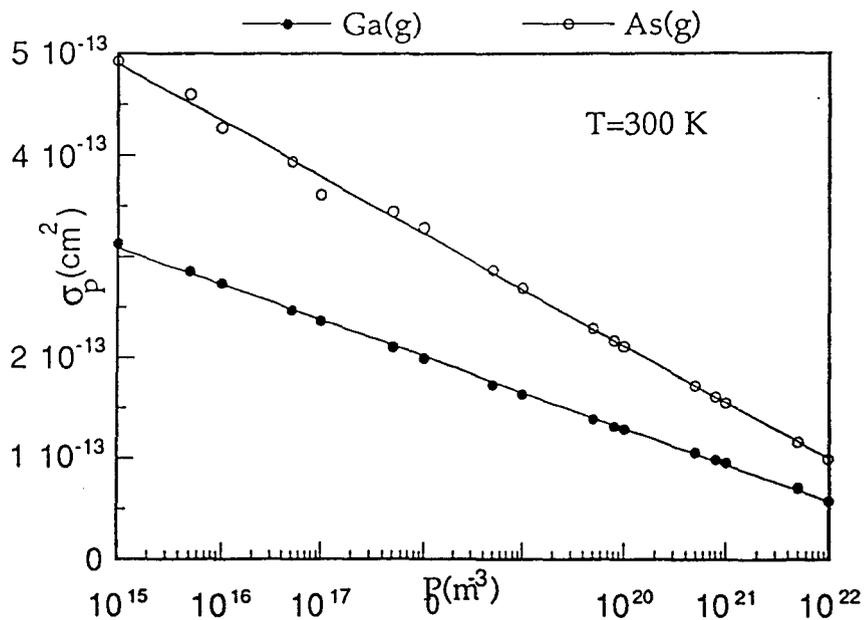


Figure IV.21: Variation de la section efficace de capture des porteurs minoritaires à 300 K, en fonction de l'injection.

Nous avons également testé l'influence de la position de ce niveau ainsi que la position du niveau E_D .

Les résultats obtenus sont représentés sur la figure IV.14

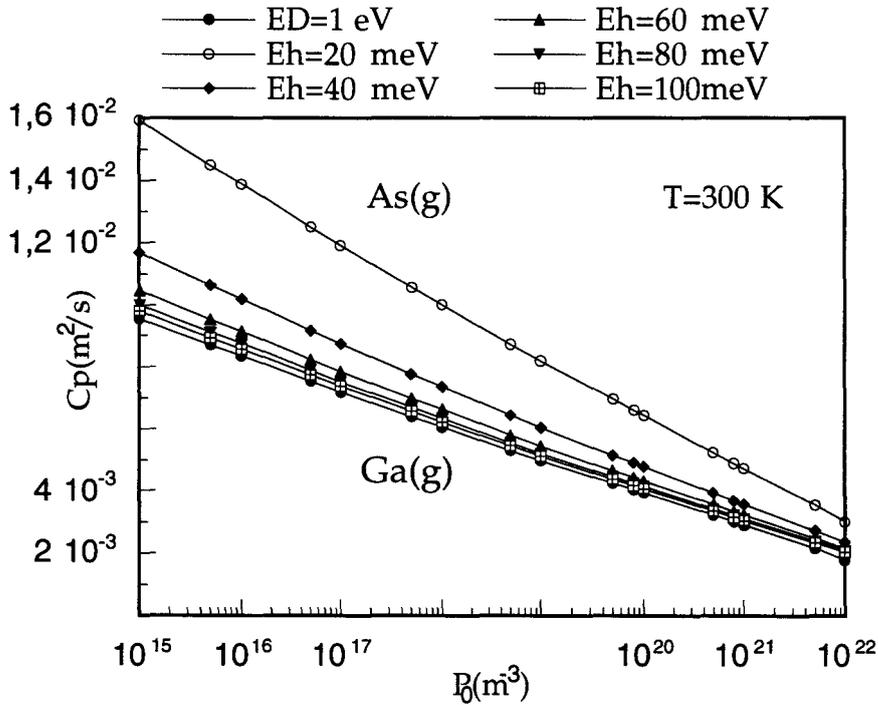


Figure IV.14: Coefficient de capture des minoritaires en fonction de l'injection à 300K pour différentes valeurs de E_h .

Les calculs numériques (figure IV.14) ont indiqué, que le coefficient de capture des porteurs minoritaires associé à la dislocation α , est très sensible à la valeur de la position du niveau fondamental E_h . C'est en effet le choix de la valeur de ce niveau, qui permet de différencier les deux dislocations α et β . Par contre, le coefficient de recombinaison est a priori indifférent:

i-à la valeur du niveau E_e qui correspond au niveau fondamental des niveaux légers pour les électrons

ii-à la valeur de la position du niveau intrinsèque de la dislocation.

La courbe ($E_D=1$ eV) de la figure IV.14, correspond à la dislocation Ga(g) pour laquelle nous avons adopté, rappelons le, le modèle suivant:

cascade des minoritaires jusqu'au niveau fondamental E_D de la dislocation et cascade des majoritaires jusqu'au niveau E_e , puis transition radiative entre le niveau E_e et le niveau fondamental de la dislocation.

A) Contraste E.B.I.C des dislocations α et β à 300K:

La figure IV.15 représente le contraste E.B.I.C des dislocations As(g) (α) et Ga(g) (β), calculés numériquement en utilisant les modèles correspondants à chaque dislocation.

Ces résultats numériques ont été obtenus pour une longueur de diffusion des porteurs minoritaires égale à $0.35 \mu\text{m}$ et pour une mobilité égale à $4.10^{-2} \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$.

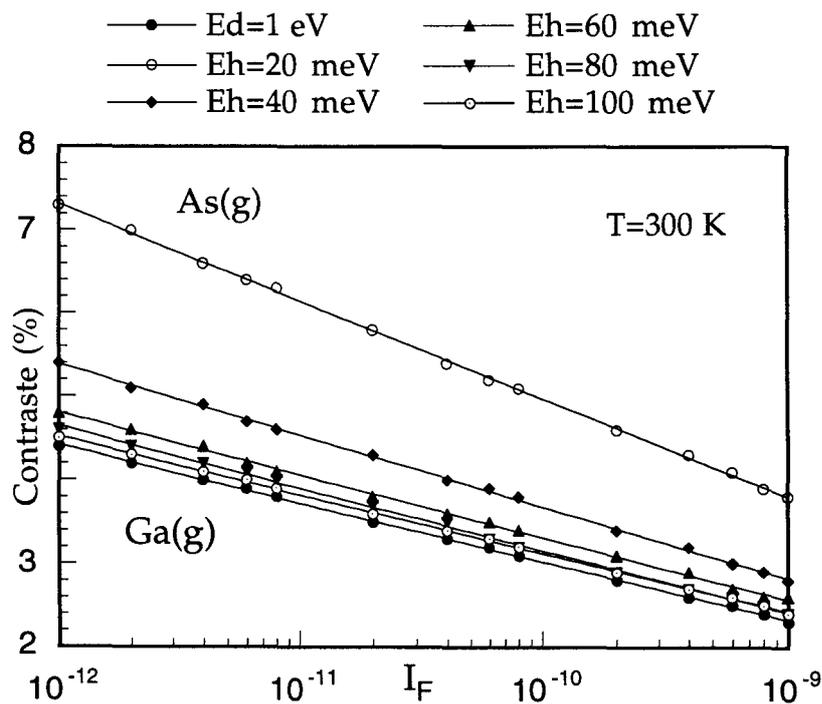


Figure IV.15: Contraste E.B.I.C calculé numériquement pour les dislocations As(g) et Ga(g) à 300 K en fonction de l'intensité du courant de faisceau I_F .

On remarque à présent, une nette distinction entre les deux dislocations, de plus la pente de la courbe de contraste E.B.I.C de la dislocation α est supérieure à la pente de la courbe associée à la dislocation β . Ceci est en parfait accord avec les résultats expérimentaux.

B) Contraste E.B.I.C des dislocations α et β à basse température:

La figure IV.16 représente la variation du contraste E.B.I.C calculé numériquement pour les dislocations As(g) α et Ga(g) β à 77K.

Ces résultats numériques ont été obtenus pour une longueur de diffusion des porteurs minoritaires égale à $0.25 \mu\text{m}$ et pour une mobilité égale à $810^{-2} \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Le niveau $E_h=20 \text{ meV}$, donne la courbe de contraste E.B.I.C qui correspond le mieux aux valeurs expérimentales obtenues pour la dislocation As(g).

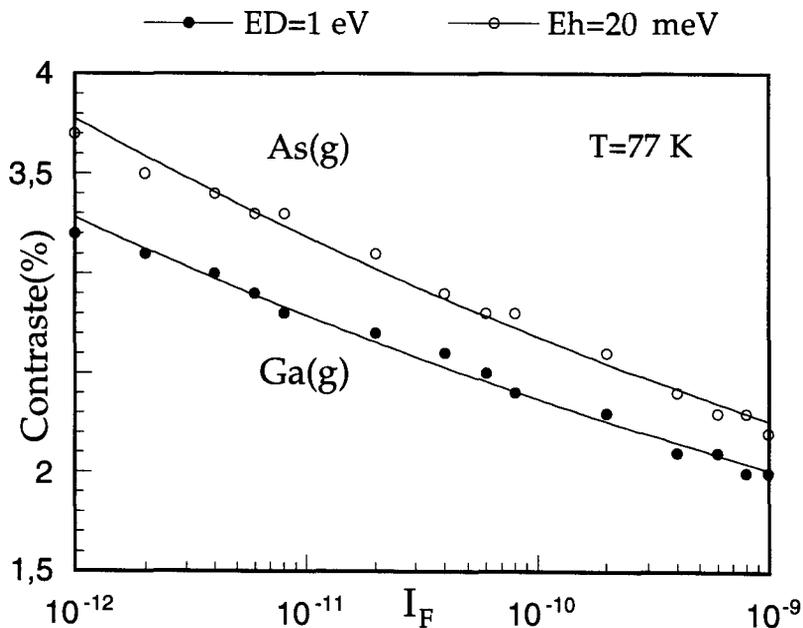


Figure IV.16: Contraste E.B.I.C calculé numériquement à 77 K pour les deux dislocations As(g) et Ga(g), en fonction de l'intensité du courant de faisceau I_F .

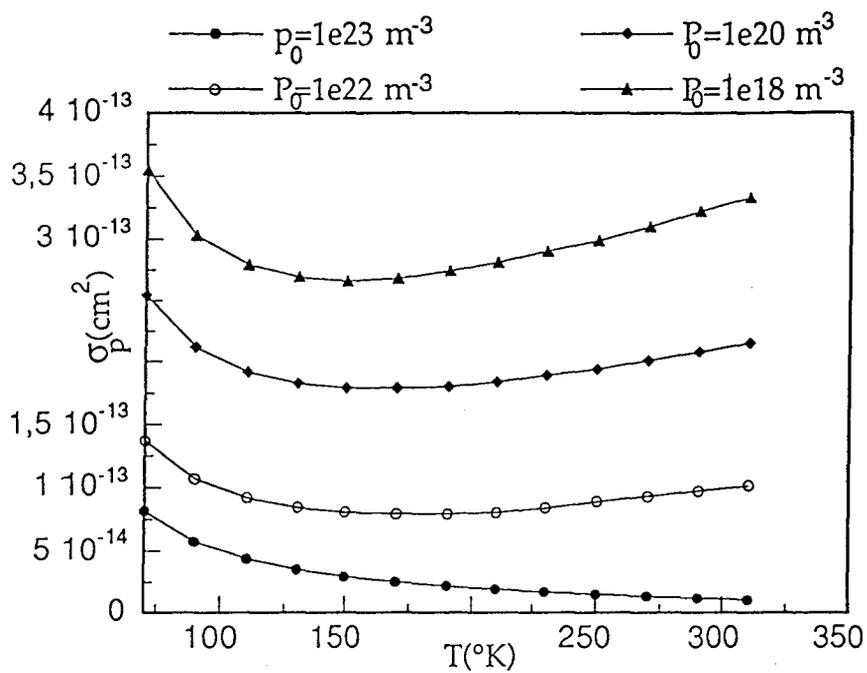


Figure IV.23: Variation de la section efficace de capture des porteurs minoritaires en fonction de la température. Pour différentes valeurs de niveaux d'injection.

On distingue à partir de cette courbe, une nette diminution du contraste E.B.I.C en fonction de la température. Ceci est en accord avec les résultats expérimentaux obtenus à 77 K. En effet, les valeurs de contraste E.B.I.C obtenues expérimentalement à 300 K, sont supérieures aux valeurs obtenues à 77 K.

La diminution du contraste E.B.I.C en fonction de la température se justifie à travers la diminution de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

V.2.2. Variation de la recombinaison en fonction de la température.

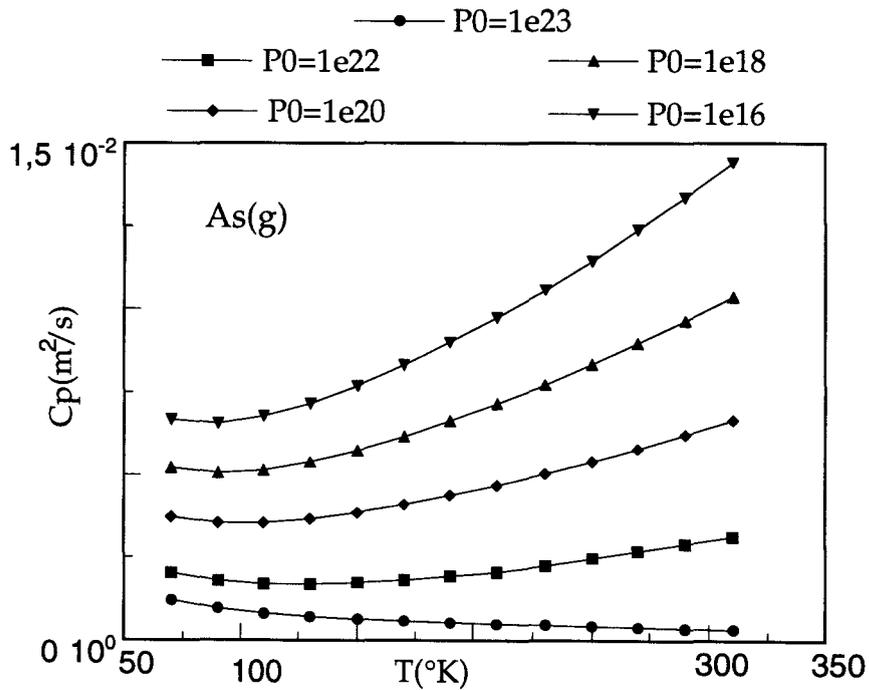


Figure IV.17: Coefficients de recombinaison calculés numériquement en fonction de la température, pour différentes valeurs des densités de porteurs minoritaires p_0 , pour la dislocation Ga(g) .

On remarque à partir de cette courbe, que pour de faibles valeurs d'injection, le coefficient de recombinaison est une fonction croissante de la température, alors qu'en forte injection, la recombinaison diminue quand la température augmente. Ceci explique probablement la raison pour laquelle expérimentalement, on n'observe pas la même dépendance en température entre le contraste CL, qui diminue quand la température augmente [9,41] et

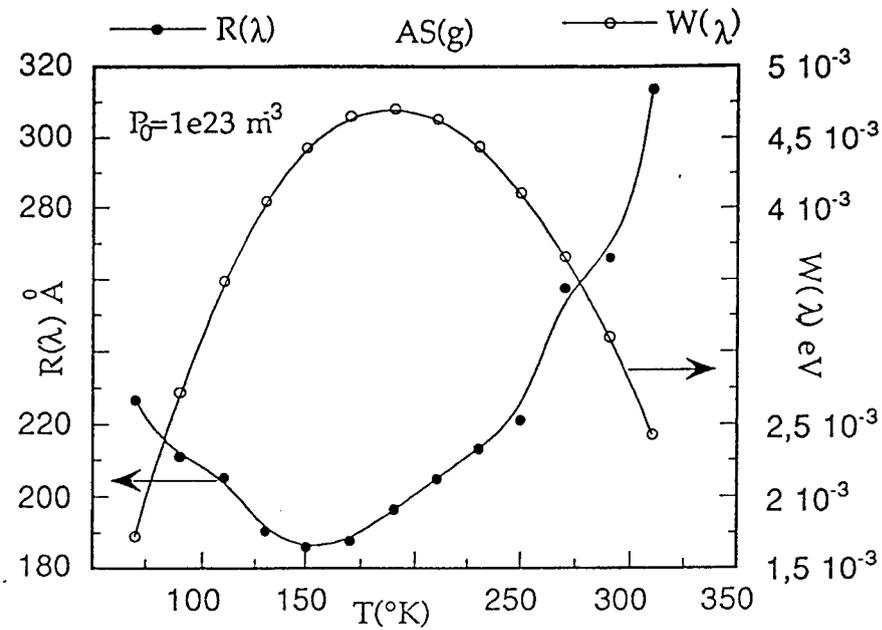


Figure IV.24: Variation du rayon de passage des majoritaires $R(\lambda)$ et de la barrière de potentiel $W(\lambda)$, en fonction de la température, pour une densité de porteurs minoritaires $P_0 = 1e23 \text{ m}^{-3}$

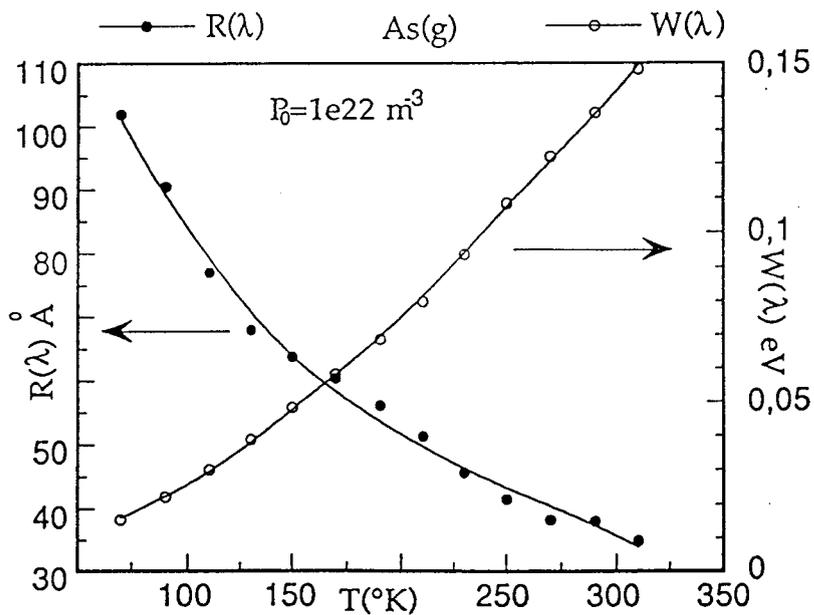


Figure IV.24: Variation du rayon de passage des majoritaires $R(\lambda)$ et de la barrière de potentiel $W(\lambda)$, en fonction de la température, pour une densité de porteurs minoritaires $P_0 = 1e22 \text{ m}^{-3}$

entre le contraste E.B.I.C qui augmente lorsque la température augmente [9,11,26].

Nous pensons que cette différence, est attribuée au fait que les contrastes CL sont mesurés expérimentalement pour de fortes valeurs du niveau d'injection ($I_b > 10^{-8}$ A), alors que les contrastes E.B.I.C sont souvent mesurés à faible injection (10^{-12} A $< I_b < 10^{-9}$ A).

Malheureusement ne pouvant connaître la variation de la longueur de diffusion en fonction de la température, nous ne pouvons calculer les courbes de contraste E.B.I.C en fonction de la température. Néanmoins, nous avons pu vérifier pour le cas de deux températures(300 K et 77 K) que les variations du contraste E.B.I.C sont dans le bon sens.

Remarque:

Quel que soit le mécanisme physique choisi, le principe de la recombinaison des porteurs aux dislocations $As(g)$ ou $Ga(g)$, repose essentiellement sur la diminution de la densité de charge linéaire λ en fonction de l'injection. Cette diminution a pour conséquences immédiates, l'abaissement de la barrière de potentiel $W(\lambda)$, ainsi qu'une augmentation du rayon de passage $R(\lambda)$ des porteurs majoritaires.

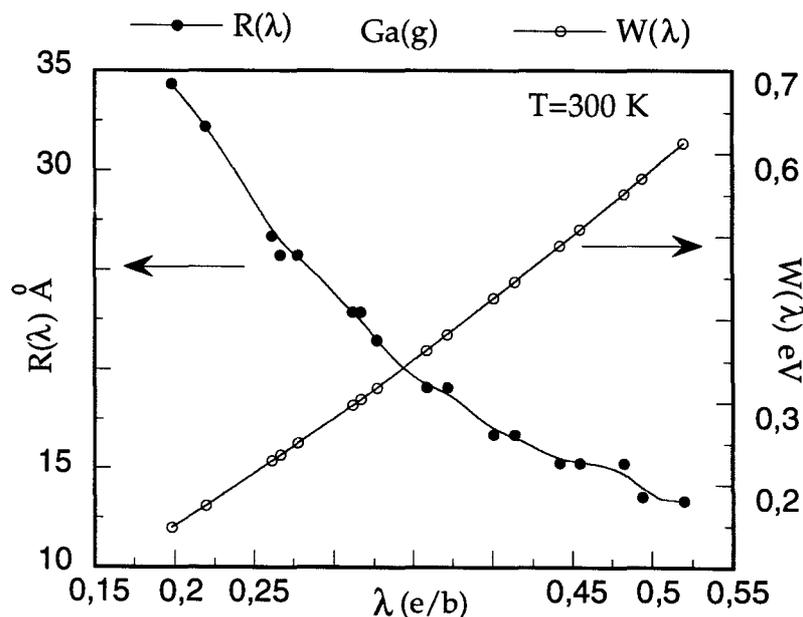


Figure IV.18: Variation du rayon de passage $R(\lambda)$ et de la barrière de potentiel $W(\lambda)$ à 300 K, en fonction de la densité de charge λ .

V.2.3. Mécanismes de recombinaison extrinsèques.

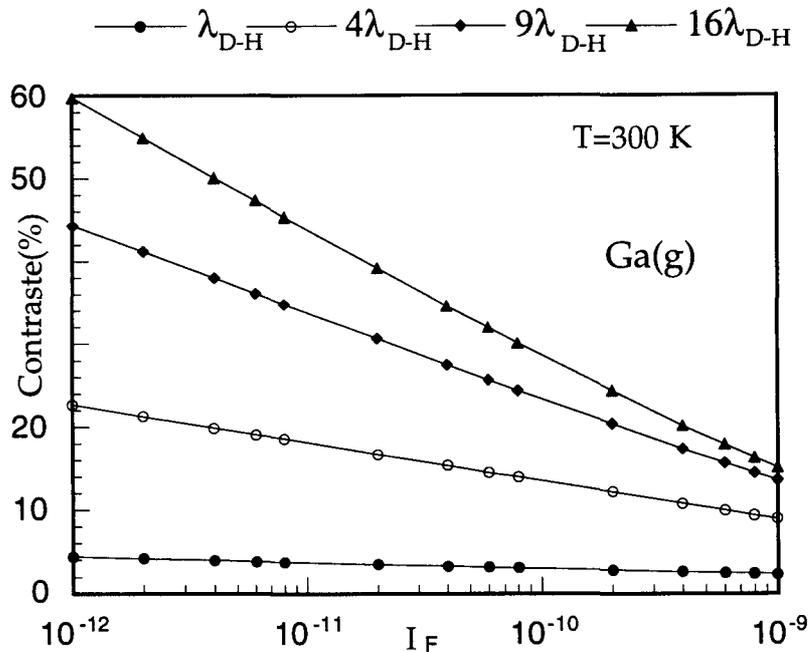


Figure IV.19: Variation du contraste E.B.I.C calculé numériquement en fonction de l'injection pour différentes valeurs de la longueur d'onde d'écrantage (λ_{DH}). Pour la dislocation Ga(g) à 300 K.

Nous avons vu au chapitre I, que l'écrantage pouvait être réalisé à partir de la redistribution des porteurs libres, au voisinage de la dislocation et ceci sur une zone déplétée dont l'extension spatiale est donnée par

$$\lambda_{DH} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r kT}{ne^2}}$$

où n est la densité de porteurs au voisinage de la dislocation.

En augmentant la longueur d'écran λ_{DH} par un facteur quatre, neuf et seize, on réduit ainsi la densité de porteurs libres au voisinage de la dislocation, ceci correspond physiquement à un drainage des impuretés au coeur des dislocations.

Ainsi la décoration des coeurs des dislocations par des impuretés, a pour effet d'augmenter le contraste E.B.I.C des dislocations par rapport au contraste intrinsèque.

Ce dernier point est en effet en parfait accord avec les résultats de microscopie électroniques en transmission [45,46] et les résultats de mesures de contrastes E.B.I.C et CL sur des dislocations avant et après recuit [47].

En effet, les valeurs de contrastes E.B.I.C mesurées sur des dislocations décorées, sont nettement supérieures à 10%, alors que les valeurs de contraste intrinsèque des dislocations α et β , ne dépasse pas quelques pourcent. Pour cela, des observations en microscopie électronique en transmission ont révélé la présence de précipités d'impuretés au coeur de dislocations possédant un grand contraste E.B.I.C(de l'ordre de 20%).

D'autre part, des mesures de contraste E.B.I.C réalisées sur des dislocations introduites par indentation présentaient après recuit, une nette augmentation des valeurs de contraste E.B.I.C par rapport à celles mesurées avant recuit.

Nous avons a priori, toujours su qu'une décoration des coeurs des dislocations par diffusion des impuretés, avait pour effet d'augmenter le contraste E.B.I.C. Malheureusement, jusqu'à nos jours aucun modèle théorique n'a pu expliquer cette augmentation. Pour la première fois, nous montrons clairement qu'un drainage des impuretés au coeur des dislocations i.e., en diminuant la densité effective des porteurs autour de la dislocation, entraîne une augmentation de l'activité électrique des dislocations.

VI. Conclusion:

La comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques, démontre clairement la validité et la performance de ce modèle et de ce fait justifie l'intérêt des études de contraste E.B.I.C et CL des dislocations dans les semiconducteurs.

En s'appuyant sur un modèle théorique, ces études permettent une véritable spectroscopie des états d'énergie associés aux dislocations et déterminent la structure de bande associée à chaque dislocation. Pour la première fois, nous suggérons que les dislocations α et β possèdent des structures de bandes différentes.

Nous avons montré que la reconstruction des coeurs des dislocations (transition de Peierls), conduit en quelque sorte à une séparation des bandes partiellement pleines (métalliques), en des bandes complètement pleines ou vide (bandes semiconductrices). Les résultats numériques ont permis de se faire une opinion précise quant à la nature et à la position des bandes réellement associées aux dislocations. Ce résultat est en parfait accord avec les calculs de Jones [51].

A travers ce modèle, nous avons mis en évidence l'importance du potentiel électrique associé au champ de contraintes des dislocations, dans la physique des processus de recombinaison des porteurs aux dislocations, qui à notre connaissance à été pris en considération pour la première fois.

Nous offrons désormais grâce à ce modèle un outil mathématique de bonne performance, pour le calcul du coefficient de capture et du contraste E.B.I.C en présence d'un champ électrique, adapté à tout les types de défauts.

Par ailleurs, nous avons également montré que dans de tels processus, c'est le niveau fondamental E_H associé aux porteurs minoritaires, qui contrôle le mécanisme de recombinaison aux dislocations.

De plus, pour la première fois nous démontrons et justifions, que l'augmentation du contraste E.B.I.C des dislocations décorées observé

expérimentalement, est tout simplement due à une réduction de la densité de porteurs au voisinage de la dislocation. Ceci correspond au drainage des impuretés au coeur des dislocations.

Il faut toutefois noter, que les résultats théoriques présentent une grande sensibilité aux différents paramètres tels que

- i-le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires
- ii-la longueur de diffusion des porteurs minoritaires
- iii-la densité du dopage local du matériau semiconducteur.

De telles dispersions rendent compte d'hétérogénéité présentes dans le matériau semiconducteur.

Les dislocations deviennent désormais, une puissante sonde pour la spectroscopie locale et l'exploration des propriétés électroniques des milieux semiconducteurs.

Nous verrons également au chapitre suivant, que l'étude du contraste E.B.I.C ou CL de dislocations situés à l'intérieur d'un puits quantique carré ou triangulaire met en évidence les mécanismes de recombinaison des porteurs associés à un tel puits quantique.

Bibliographie du chapitre IV

- [1]: V N. Abakumov, V I. Perel and I N. Yassievich "Non Radiative Recombination in Semiconductors". Modern Problems in Condensed Matter Science, Volume 33 (North Holland).
- [2]: C. Donolato, *Optik*, **52**, 19, (1978/79).
- [3]: B. Sieber, *Solid. State. Phenomena*, **19, 20**, 353,(1991).
- [4]: L C. Kimerling, H J. Leamy and J R. Patel, *Appl. Phys. Lett*, **30**, 2178 (1977).
- [5]: A. Ourmazd and G R. Booker, *Phys. Stat. Sol (a)*, **55**, 575, (1987).
- [6]: A. Ourmazd, P R. Wilshaw and R M. Cripps, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **61**, 519 (1981).
- [7]: M. Lesniak and D V. Holt, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **76**, 337 (1985).
- [8]: M. Kolbe, O. Hollricher, H. Gohchalk and H. Alexander, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **100**, 725 (1989).
- [9]: M. Eckstein and H U. Habermeier, *J. Phys. IV Paris* **C6**, 23 (1991).
- [10]: M. Kittler and W. Seiffert, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **134**, 717 (1993).
- [11]: S A. Galloway and P R. Wilshaw, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **134**, 71 (1993).
- [12]: P R. Wilshaw and G R. Booker, *Inst. Phys. Conf. Ser*, **76**, 329 (1985).
- [13]: P R. Wilshaw, T S. Fell and M D. Coteau, *J. Phys. IV Paris* **C6**, 3-16 (1991).
- [14]: B. Sieber, J-L. Farvacque and P. Carton, *J. Phys. III France*, **2**, 325 (1992).
- [15]: M. Kittler and W. Seiffert, *Phys. Stat. Sol (a)*, **138**, 687 (1993).
- [16]: R. Labush and W. Schröter, *Dislocations in Solids (North Holland)*, **5**, 129 (1980).

- [17]: R A. Masut, C. Penchina and J-L. Farvacque, *J. Appl. Phys*, **53**, 4864 (1982).
- [18]: D. Ferré, A. Diallo and J-L. Farvacque, *Rev. Phys. Appl*, **25**, 177 (1990).
- [19]: W T. Read, *Phil. Mag*, **45**, 335 (1954).
- [20]: W T. Read, *Phil. Mag*, **45**, 1119 (1954).
- [21]: J. Bardeen and W. Schokley, *Phys. Rev*, **80** (1950).
- [22]: D L. Dexter and F. Seitz, *Phys. Rev*, **86**, 964 (1952).
- [23]: V L. Bonch-Bruевич, *Soviet. Phys-Solid State*, **3**, 34 (1961).
- [24]: L. Merten, *Phys. Kondens. Materie*, **2**, 53, (1964).
- [25]: G. Faivre and G. Saada, *Phys. Stat. Sol (b)*, **52**, 127 (1972).
- [26]: D. Ferré, Thèse de Docteur d'Etat ès. Sciences Physiques, U.S.T.L Lille (1987).
- [27]: D. Vignaud, J-L. Farvacque and D. Ferré, *Phys. Stat, Sol (b)*, **2**, 110 (1982).
- [28]: A.R. Hutson, *J. Appl. Phys*, **32(10)**, 2287, (1961).
- [29]: H.J.G. Meijer and D. Polder, *Physica*, **XIX**, 255, (1953).
- [30]: M P. Langevin, *Ann. Chem. Phys*, **28**, 248 (1903).
- [31]: M P. Langevin, *Ann. Chem. Phys*, **28**, 433 (1903).
- [32]: S I. Pekar, *Z H. Eksp & Teor. Fiz*, **20**, 267 (1950).
- [33]: S I. Pekar, N-R-R à vérifier (1950).
- [34]: W. Schröter, *Phys. Stat. Sol (a)*, **19**, 159 (1973).
- [35]: J-L. Farvacque and B. pödör, *Phys. Stat. Sol (b)*, **167**, 687 (1991).
- [36]: A. Ourmazd, *Crystal. Res. Technol*, **16**, 137 (1981).
- [37]: M. Lax, *Phys. Rev*, **119**, 1502 (1960).
- [38]: V N. Abakumov and I N. Yassievich, *Soviet, Phys. JETP*, **44 (2)**, 345 (1976).
- [39]: L P. Pitaevskii, *Sov, Phys. JETP*, **15**, 919 (1962).
- [40]: C. Donolato, *Appl. Phys. Lett*, **34**, 80 (1979).

- [41]: B. Sieber, J-L. Farvacque and A. MIRI, Phys. Stat. Sol (a), **138**, 673 (1993).
- [42]: D. Vignaud and J-L. Farvacque, J. Appl. Phys, **87**, 281 (1998).
- [43]: D. Ferré and J-L. Farvacque R.P.A, **23**, 353 (1990).
- [44]: J.L. Farvacque à paraître (1995).
'Modelling of electron-hole pair recombination in semiconductors'.
- [45]: H. Blumtritt and G. Gleichmann, Ultramicroscopy, **12**, 40, (1977).
- [46]: H. Menniger, H. Raidt and G. Gleichmann, Phys. Stat. Sol (a), **58**, 173, (1995).
- [47]: M. Kittler, C. Ulhaq-Bouillet and V. Higgs, soumis à J. Appl. Phys, (1995).
- [48]: V.N. Abakumov and Z.N. Sokolova, Sov, Phys, Semicond, **12(8)**, 962, (1978).
- [49]: J-L. Farvacque 'Communication personnelle'.
- [50]: J.P. Hirth and J. Lothe, 'Theory of dislocations, 2nd Ed, Wiley-Interscience Publication', (1982).
- [51]: R. Jones, A. Umerski, P. Sith, P. Heggie and S. Öberg. Phys. Stat. Sol(a), **137**, 389, (1993).
- [52]: P. Carton, Thèse de 3^{eme} cycle en Sciences des Matériaux, U.S.T.Lille, (1990).

Chapitre V

**Contraste CL des
dislocations de
désadaptation de réseau
dans un puits quantique
InGaAs/GaAs**

Introduction:

Le contraste E.B.I.C ou CL effectué sur des dislocations α et β , a fait l'objet de plusieurs études en fonction de l'injection et de la température[1]. Ces résultats étaient obtenus, la plupart du temps, sur des dislocations situées dans des matériaux massifs, tels que GaAs [2,3], le Silicium [4] ou InP [5]. En revanche, très peu d'études ont été réalisées sur des dislocations situées à l'interface d'un puits quantique.

Deux types d'analyses locales peuvent être utilisées pour déterminer l'origine de la recombinaison des porteurs associée aux dislocations:

i-Une analyse théorique permettant d'établir les lois physiques des mécanismes de recombinaison des porteurs, associés aux dislocations [6, 8].

ii-Une approche purement expérimentale, permettant de tester l'influence des paramètres expérimentaux tels que l'injection et la température, sur les propriétés électroniques des dislocations.

Nous avons choisi la deuxième approche et nous présentons des résultats de contraste CL, obtenus en fonction de l'injection et de la température, sur des dislocations localisées dans des hétérostructures partiellement contraintes [7] (interface d'un puits quantique InGaAs/GaAs). Les courbes de contraste CL obtenues, sont caractérisés par une pente $C(I_F)$ positive et une pente $C(T)$ négative (I_F et T sont respectivement le courant de faisceau et la température). Nous verrons que, compte tenu de la structure de bandes des dislocations dans le puits quantique, ce comportement est attribué à l'existence de niveaux légers et que dans ce cas, la recombinaison des porteurs aux dislocations est alors, un mécanisme extrinsèque.

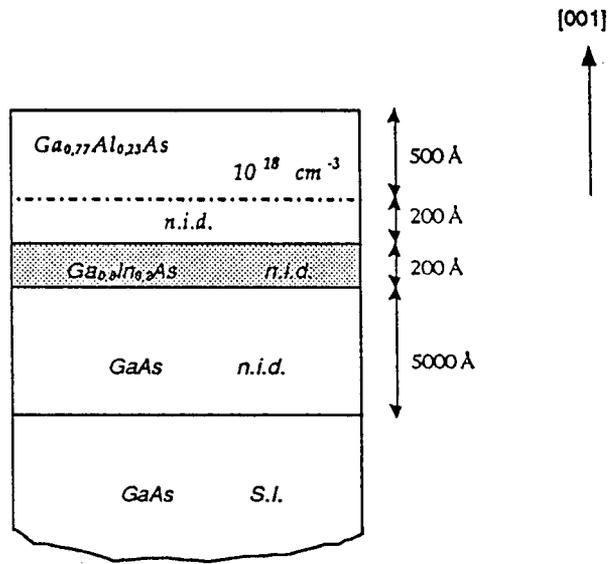


Figure V.1: Caractéristiques de l'hétérostructure utilisée (échantillon p7).

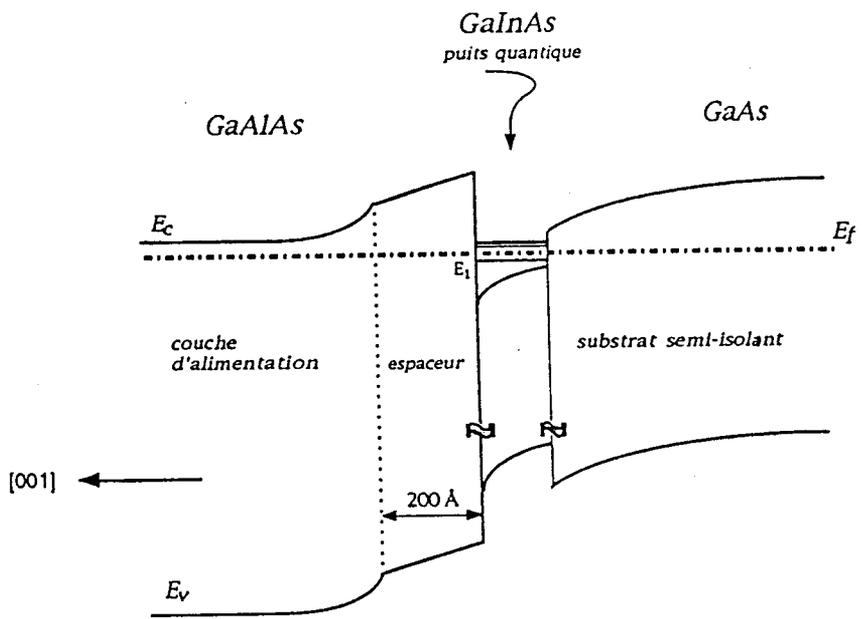


Figure V.2: Schéma de la structure de bande d'une hétérostructure GaAlAs/GaInAs/GaAs.

