

Réorganisation et effets des défauts en volume dans les imageurs irradiés

Kevin Lemiere

▶ **To cite this version:**

Kevin Lemiere. Réorganisation et effets des défauts en volume dans les imageurs irradiés. Electronique. Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2020. Français. ⟨NNT : ⟩. ⟨tel-03158242⟩

HAL Id: tel-03158242

https://hal.science/tel-03158242v1

Submitted on 3 Mar 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Université Fédérale
Toulouse Midi-Pyrénées

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace

---

Présentée et soutenue par

Kevin LEMIERE

Le 3 décembre 2020

Réorganisation et effets des défauts en volume dans les imageurs irradiés

---

Ecole doctorale : **GEET - Génie Electrique Electronique et Télécommunications : du système au nanosystème**

Spécialité : **Photonique et Systèmes Optoélectronique**

Unité de recherche :
ISAE-ONERA OLIMPES Optronique, Laser, Imagerie Physique et Environnement Spatial

Thèse dirigée par
Christophe INGUIMBERT et Thierry NUNS

Jury

Mme Helena ZAPOLSKY, Rapporteure
M. Olivier GRAVRAND, Rapporteur
M. Guilhem ALMUNEAU, Examinateur
M. Christophe INGUIMBERT, Directeur de thèse
M. Laurent DUSSEAU, Président

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE LAB

A mon père Didier, à mon frère Adrien, à ma cousine Andréa et à ses enfants,

A ma petite femme Marine,

A mes amis

Ce manuscrit vous est dédicacé

Remerciements

Avant toute chose, je tiens à remercier ma famille ainsi que la femme qui partage ma vie depuis 5 ans maintenant pour leur soutien indéfectible durant toutes mes études, depuis la licence, en passant par le master et jusqu'à cette thèse. Je n'ai pas peur de le dire, il est clair que c'est grâce à vous que j'ai pu écrire les pages qui vous sont dédiées dans ce manuscrit, et je ne vous en remercierais jamais assez.

Papa, je n'oublierai jamais nos (très) longues discussions, nos échanges de vannes sans limites ni tabous, mais également les fois où tu m'as bousculé, où tu m'as demandé de me remettre en question, toujours dans le but de me faire progresser et de donner le meilleur de moi-même, sans jamais avoir de regrets. Tu vois finalement j'ai peut-être retenu quelque chose de nos discussions ! Je te remercie infiniment d'avoir toujours été là pour moi papa, dans les moments d'euphorie comme dans les traversées du désert. Ce manuscrit t'est tout particulièrement dédié, car on sait tous les deux par où nous sommes passés pour aboutir à ces pages. Je ne sais pas d'où tu tiens cette force de vivre, mais j'espère vraiment en avoir hérité ! Par ces quelques lignes de remerciements, j'espère te rendre un hommage à la hauteur de tout ce que tu as fait pour moi.

Mon Fréro, comment te dire que je suis fier de toi ! Même si tu as 6 ans de moins que moi, et que tu fais mon poids en muscles, tu resteras toujours un petit bézot pour moi ! Je te remercie pour ton franc parlé, et pour l'intérêt que tu as porté à mes études tout au long de ces années, même si j'ai bien dû te saouler parfois ! Nos parties en équipe aux jeux vidéo jusqu'à pas d'heure, nos victoires, nos défaites, nos embrouilles pour un tir manqué ou une action ratée… Je me souviendrai de tout mon petit frère. Tu verras on en reparlera encore pendant des années comme des vieux cons, mais sache que tous ces petits moments entre frères ont compté avant et pendant la thèse, et compteront toujours à mes yeux.

Ma cousine adorée, c'est toujours un vrai régal de passer du temps avec toi ! Nos balades en bord de mer, nos sorties entre cousins ou avec tes enfants ont été de vraies bouffées d'oxygène pendant ces études, et je n'oublierai jamais ton sourire et ta bonne humeur qui te caractérisent tant ! Et bien sûr je n'oublie pas notre projet de sortir un disque de reprises des musiques de Disney version Hip Hop ! Je m'excuse pour toutes ces fois où je t'ai fait lever très tôt pour chopper ce fameux train à la gare d'Yvetot ! Je te remercie d'avoir toujours su répondre présente quand il le fallait.

Ma petite femme, je te remercie de tout cœur pour ton soutien pendant ces 5 ans (déjà !). Tu m'apportes beaucoup de bonheur et je suis très fier de ta réussite dans ton doctorat ! Nos voyages à travers la France et le monde ont été de vrais moments d'échappatoires pour respirer pendant ce travail de longue haleine. Notre soutien mutuel a été une vraie force au cours de ces 3 années de thèse, et cela restera à jamais gravé en moi. J'ai beaucoup de chance d'avoir une femme comme toi à mes côtés ! Tant de rires et de complicité durant ces dernières années ! Nous avons fait nos études ensemble, nous avons passé notre doctorat ensemble, si ce n'est pas beau je ne sais pas comment appeler cela ! Ce manuscrit est l'aboutissement d'une aventure commune, à nous d'écrire de nouveaux chapitres pour les années à venir !

Eudes, Guillaume, merci les gars pour votre bonne humeur et vos bonnes blagues ! Faut que l'on se refasse nos soirées jeux et barbecues, ça me manque trop là sérieux ! Ces

années de thèse n'auraient pas été pareilles sans vous c'est clair ! Loanne, alias la co-bureau lanceuse de calculatrice et dessinatrice hors-pair (mon ancien bureau se souviendra très longtemps de tes dessins !), ça va manquer quand même les jeux improvisés dans le bureau ! Entre le tennis et le golf on se débrouillait pas si mal ! Abdes, je prendrai ta seule venue chez moi comme un compliment hors du commun, vu que personne d'autre n'a réussi à te faire sortir de ta cachette après le boulot ! Nourallah, surtout continue de sortir des pépites (petite référence cachée ici pour toi) lors de tes interventions à l'oral, c'est comme ça qu'on t'aime ! Chloé, François, j'espère que l'on pourra se refaire nos bonnes soirées déconnades sans limites très bientôt dans votre nouveau chez vous, avec votre petite Lysa qui grandit si vite !

Un gros big up à Marie-Cécile Ursule pour tes précieux conseils ! Je te remercie d'avoir pris le temps de me former alors que tu devais gérer ta fin de thèse. Ton investissement a permis de faire un super passage de témoin, et je t'en suis reconnaissant.

Un grand merci à Christine et Gisèle pour vos nombreux coups de main administratifs, votre réactivité en a sauvé plus d'un je pense ! Angélica, je te remercie pour tes encouragements pour la soutenance, ça fait toujours plaisir des ondes positives. Vincent… Je ne sais pas ce que je pourrai faire pour te sauver… Car je pense que tu es un cas désespéré… Mais tes blaguounettes quotidiennes étaient toujours des moments sympas de la semaine ! Et merci pour ta petite démonstration sur le développement photo, très instructive. Je tiens également à remercier Sophie pour avoir fait en sorte que mon intégration au sein de l'équipe ECM se passe bien, et également Laurent pour avoir toujours veillé sur l'avancement de ma thèse, toujours avec un œil discret mais attentif. Nos échanges étaient toujours très intéressants et constructifs.

Christophe, Thierry, ou papa-maman si vous préférez… Mais il me semble que les rôles ne sont pas toujours fixés non ? Plus sérieusement, je vous remercie sincèrement de m'avoir fait confiance au cours de ces 3 ans et demi de boulot passés avec vous. Je me suis vraiment éclaté sur ce sujet de recherche, et j'ai apprécié votre soutien lors de la préparation de présentations orales, sans parler de nos incalculables allers-retours au sujet de cette fameuse publication. Par contre Thierry, je pense que je suis marqué à vie concernant… les règles de ponctuation française ! Christophe, j'ai beaucoup apprécié ton geste à la fin de ma soutenance, c'était très gentil de ta part.

Je souhaite enfin remercier l'ensemble de l'équipe ECM et plus généralement le département DESP/DPHY de l'ONERA, pour votre accueil pendant la thèse. Un petit salut aux mascottes du département, je parle bien évidemment de Stéphane, artiste pyrotechnique incompris, maîtrisant le lancement de fusées improvisées comme personne, ainsi que de Claude, la seule personne au monde où l'on connaît l'aspect de son fessier avant même son prénom ! Spéciale dédicace à Sabine, toujours bienveillante, souriante et disponible à n'importe quel moment de l'année !

Je profite également de ces quelques lignes pour souhaiter un bon courage à l'ensemble des doctorants du département en ces temps difficiles, et j'espère que vous pourrez continuer malgré tout les petites traditions qui caractérisent le DPHY que les doctorants se passent de promotion en promotion.

Un dernier merci à tous ceux que je viens de citer, et peut être à ceux que j'aurais pu malencontreusement oublier.

Sommaire

Introduction 4

Chapitre I : Les capteurs d'images 7

I.1 Revue des capteurs d'image modernes 7
I.2 Evolution des capteurs CMOS 9
I.2.1 CMOS de type Passive Pixel Sensor (PPS) 9
I.2.2 CMOS de type Active Pixel Sensor (APS) 9
I.3 Principe de fonctionnement des imageurs modernes 10
I.3.1 La génération des photo-charges 11
I.3.2 La collection des charges 11
I.3.3 Le transfert des charges 16
I.3.4 La conversion des charges 16
I.4 Origine des différentes perturbations liées aux capteurs d'image 17
I.4.1 Les bruits temporels 17
I.4.2 Les bruits spatiaux 19
I.5 Les principaux procédés de fabrication 20
I.5.1 Principales méthodes de fabrication d'un monocristal de silicium 20
I.5.2 Principales techniques de dopage du silicium 24
I.5.3 Description de la fabrication d'un composant électronique de type CMOS 26
I.5.4 Les impuretés cristallines 28
I.6 Conclusions du chapitre 31

Chapitre II : Description des différentes sources de rayonnement radiatif de l'environnement spatial et des dégradations subies par les imageurs dans cet environnement 35

II.1 L'environnement radiatif spatial 35
II.1.1 L'activité solaire 35
II.1.2 Le rayonnement cosmique 37
II.1.3 Les ceintures de radiation 37
II.2 Interactions rayonnement spatial – matière 39
II.2.1 Les interactions avec le cortège électronique 39
II.2.2 Les interactions avec les noyaux atomiques 41
II.2.3 Rayonnement continu de freinage (Bremsstrahlung) 44
II.3 Description de la perte d'énergie suivant les différents mécanismes liés aux interactions rayonnement-matière 45
II.3.1 Section efficace d'interaction 45
II.3.2 Notion de pouvoir d'arrêt ionisant et non-ionisant 46
II.3.3 Doses ionisante et non-ionisante 48
II.4 Description à l'échelle macroscopique des dégradations des capteurs d'image liées aux interactions rayonnement-matière 49
II.5 Description à l'échelle microscopique de la dégradation de la matière : les défauts cristallins 53
II.5.1 Mécanismes physiques à l'origine des défauts cristallins 54
II.5.2 Propriétés électriques des défauts cristallins : la théorie Shockley-Read-Hall 58
II.5.3 Propriétés et évolution structurelles des défauts cristallins : la réorganisation de la matière 65

II.5.4 Principales techniques de détection et caractérisation des défauts structurels de la matière cristalline 72
II.5.5 Inventaire des défauts cristallins rencontrés dans le silicium après irradiation 75
II.6 Conclusions du chapitre 78

Chapitre III : Le courant d'obscurité : son origine et ses méthodes d'estimation 88
III.1 Définition du courant d'obscurité 88
III.1.1 Le courant de génération 89
III.1.2 Le courant de diffusion des porteurs minoritaires 90
III.1.3 Dépendances paramétriques du courant d'obscurité 90
III.1.4 Dispersion du courant d'obscurité et les moyens actuels de limitation ... 91
III.2 Historique des méthodes de prédiction du courant d'obscurité 93
III.3 Présentation de la méthode d'estimation du courant d'obscurité dans les imageurs utilisée pendant la thèse 97
III.3.1 L'application *GEANT4* pour les imageurs : *ARAMIS* 99
III.3.2 L'outil de calcul numérique par méthode Monte Carlo : *DAAN* 101
III.3.3 Prise en compte des effets du champ électrique en une dimension dans *DAAN* 105
III.3.4 Comparaison du modèle *DAAN* avec des mesures expérimentales 114
III.4 Conclusions du chapitre 118

Chapitre IV : Etude d'un modèle original d'effets de champ électrique en trois dimensions sur l'amplification du courant d'obscurité 123
IV.1 Développement d'un modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions ... 124
IV.1.1 Formulation analytique du modèle 3D 124
IV.1.2 Validation du modèle 3D 126
IV.2 Comparaison du modèle 3D avec le modèle 1D par études paramétriques 134
IV.2.1 Etudes paramétriques sur le niveau d'énergie des pièges 135
IV.2.2 Etudes paramétriques sur les sections efficaces de capture des défauts 137
IV.2.3 Influence de la température 140
IV.2.4 Comparaison avec l'état de l'art précédent 141
IV.3 Intégration du modèle 3D dans l'outil de prédiction du courant d'obscurité 142
IV.4 Comparaison avec des données expérimentales 143
IV.5 Cas d'une population mixte de défauts 151
IV.5.1 Le facteur moyen d'amplification 151
IV.5.2 Variation du facteur moyen d'amplification en fonction de la population de défauts 152
IV.6 Conclusion du chapitre 155

Chapitre V : Etude la réorganisation des défauts cristallins avec le temps au moyen d'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) 158
V.1 Les outils courants de modélisation des effets des radiations dans la matière 159
V.2 Description de l'algorithme Kinetic Monte Carlo 160
V.3 Développement d'un algorithme KMC pour simuler la recombinaison et l'association des défauts cristallins dans le silicium 167
V.3.1 Gestion des interactions dans une simulation KMC 168
V.3.2 Architecture de l'algorithme KMC 169

V.3.3 Conditions initiales d'implantation des défauts dans le volume de simulation 170
V.3.4 Conditions aux limites du volume de simulation 171
V.3.5 La matrice de rayons d'interaction spécifique 172
V.3.6 Prise de décision de l'interaction lors d'une itération KMC 173
V.3.7 Optimisation de la méthode de recherche des défauts cristallins 174
V.3.8 Choix des propriétés de migration des défauts 175
V.4 Validation de l'algorithme KMC 178
V.5 Etude paramétrique sur le taux de guérison 180
V.5.1 Influence du volume d'implantation des défauts 181
V.5.2 Le calcul du pas de temps Δt 181
V.5.3 Le taux d'amorphisation 182
V.5.4 Le rôle des impuretés 183
V.5.5 Conclusions des études paramétriques 184
V.6 Evolution des populations de défauts en fonction du temps 185
V.7 Conclusions du chapitre 187

Chapitre VI : Développement d'une chaîne de simulation pour étudier l'influence de la réorganisation des défauts sur la prédiction du courant d'obscurité 191
VI.1 Utilisation de *GEANT4* (application *ARAMIS*) pour simuler une cascade de dommage 192
VI.1.1 Modifications d'*ARAMIS* pour enregistrer la position des défauts 192
VI.1.2 Conditions de simulation 192
VI.2 Etude statistique de la guérison des cascades de dommage en fonction de l'énergie incidente de la particule via l'algorithme KMC 193
VI.2.1 Choix des particules énergétiques pour simuler la cascade de dommage 194
VI.2.2 Influence de l'énergie incidente des particules sur le facteur de guérison 195
VI.3 Couplage de l'algorithme KMC avec l'outil de calcul prédictif du courant d'obscurité 200
VI.3.1 Modifications de *DAAN* pour tenir compte des données de sortie du KMC 200
VI.3.2 Comparaisons des résultats de simulation avec des données expérimentales 202
VI.4 Bilan sur les différentes méthodes de calcul du courant d'obscurité 215
VI.4.1 Evolution de la méthode de calcul du courant d'obscurité 215
VI.4.2 Discussion sur le facteur de dommage universel 219
VI.5 Conclusion du chapitre 221

Conclusions et perspectives 224

Annexe A 230
Annexe B 238
Annexe C 240
Annexe D 246

Résumé de la thèse 248

Introduction

Les satellites intègrent de nombreux appareils de mesures et de télécommunications dédiés aux applications scientifiques, militaires ou commerciales. Certains de ces dispositifs font partie de la famille des capteurs d'image, également appelés imageurs. Ces instruments, s'apparentant à des matrices de pixels et souvent construits à base de matériaux semi-conducteurs, peuvent avoir des rôles divers à bord d'un satellite. Ils peuvent servir notamment à prendre des clichés de la surface de la Terre dans le cadre de missions de surveillance et d'observations scientifiques, ou dans une autre mesure à fournir l'attitude d'un satellite en orbite. Les capteurs d'image jouent donc un rôle critique lors du déroulement de la mission du satellite.

Cependant, l'environnement spatial est un milieu hostile pour des composants électroniques tels que les imageurs. Au cours de sa vie, un satellite sera exposé à des flux de particules énergétiques (protons, électrons, ions ou encore photons) avec un large spectre en énergie (du keV au GeV). Ces flux de particules vont dégrader les fonctionnalités des composants électroniques embarqués à bord des satellites. Les imageurs sont sensibles à cette exposition au rayonnement spatial. Ces altérations se produisent par le biais des interactions entre le rayonnement énergétique et la matière. L'un des résultats les plus critiques de ces interactions entre les particules énergétiques incidentes et la matière est la création de déplacements atomiques au sein du réseau cristallin. Ces déplacements atomiques vont introduire des défauts cristallins dans la matière irradiée. Un mécanisme de réorganisation de ces défauts se met ensuite en place, au cours duquel les défauts peuvent soit retrouver une place normale dans le réseau cristallin, soit s'associer entre eux pour former des défauts plus complexes. Ce réarrangement atomique altère la structure cristalline du semi-conducteur et modifie ses propriétés électriques.

Même en l'absence de lumière, le pixel d'un imageur collecte un signal, généré par l'agitation thermique des charges électriques. Ce courant électrique intrinsèque est appelé le courant d'obscurité. Le problème avec les défauts complexes est qu'ils sont généralement électriquement actifs. Cela signifie qu'ils sont capables de générer des charges électriques qui s'ajoutent au signal électrique mesuré. L'irradiation aux particules énergétiques induit donc une augmentation du courant d'obscurité qui peut devenir critique pour le bon déroulement de la mission du satellite. D'une part cette augmentation du courant d'obscurité réduit la dynamique utile de l'imageur et le rend moins performant. D'autre part, certains pixels sont tellement dégradés qu'ils présentent une très forte augmentation du courant d'obscurité. Ces pixels particuliers sont appelés pixels « chauds » et perturbent le bon fonctionnement des capteurs d'image, puisque l'information extraite de ces pixels est fausse.

Au vu des situations critiques qu'engendre une exposition aux particules énergétiques sur un imageur, la communauté scientifique a consacré de nombreux travaux de recherche à la prédiction du courant d'obscurité après irradiation dans un capteur d'image depuis les années 1970. Plus récemment, *Inguimbert et al.* [1] ont proposé une méthode numérique, *DAAN*, basée sur la méthode de Monte Carlo et dédiée à l'estimation du courant d'obscurité dans un imageur après irradiation. Cette méthode tient compte des données géométriques du pixel pour déterminer la distribution de déplacements atomiques introduits après irradiation dans une matrice de pixels. Le facteur de dommage

universel de *Srour* [2] est ensuite utilisé pour calculer l'augmentation du courant d'obscurité associée. Les effets d'amplification du champ électrique sur la génération de charge par les défauts cristallins sont également pris en compte dans le calcul du courant d'obscurité. Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit font appel à cette méthode de prédiction. Même si cet outil présente l'avantage d'estimer de manière correcte la forme de la distribution de courant d'obscurité, l'intensité et le nombre de pixels chauds sont surestimés. Il semble donc nécessaire d'apporter des éléments de compréhension pour expliquer la mauvaise prédiction des pixels les plus pénalisants pour un capteur d'image. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les travaux de recherche menés au cours de la thèse.

Pour répondre à cette problématique, les effets et la réorganisation des défauts en volume dans les imageurs irradiés ont été étudiés selon une approche numérique. Ces recherches sont réalisées dans le but d'affiner et d'améliorer l'outil de prédiction du courant d'obscurité *DAAN*. Le critère d'amélioration de l'outil repose sur la comparaison avec les distributions de courant d'obscurité mesurées expérimentalement.

Le premier chapitre a pour objectif de présenter le principe de fonctionnement des capteurs d'image CMOS, les principales méthodes de fabrication des imageurs ainsi que les bruits associés à ces instruments. L'idée est d'introduire les sources de courants électriques parasites et plus particulièrement de comprendre l'origine de la distribution du courant d'obscurité lorsque l'imageur sort de la ligne de production. Le second chapitre a pour but d'introduire les principaux mécanismes qui sont à l'origine de l'augmentation du courant d'obscurité dans un imageur après un bombardement de particules énergétiques. Pour cela, les sources de particules énergétiques dans l'environnement spatial, les différents types d'interactions entre le rayonnement énergétique et la matière ainsi que les processus physiques menant de la cascade de dommage jusqu'à l'introduction de défauts complexes électriquement actifs sont décrits. La méthode de calcul numérique du courant d'obscurité utilisée au cours de la thèse est exposée dans le chapitre III, afin de prendre connaissance des hypothèses de calcul et des moyens utilisés pour simuler le courant d'obscurité après irradiation. Nous nous focaliserons essentiellement sur l'application *GEANT4*, *ARAMIS*, et sur l'outil *DAAN*.

Le programme *DAAN* prend en considération les effets d'amplification du champ électrique sur le calcul du courant d'obscurité. Seulement les mécanismes physiques liés à la présence d'un champ électrique sont modélisés en une dimension. Or d'après *Jonscher* [3] et *Martin et al.* [4], une telle modélisation surestime l'impact du champ électrique sur la génération de charges par les défauts. C'est pourquoi un modèle original d'effets de champ électrique en trois dimensions a été développé au cours de la thèse. Le chapitre IV a pour objectif d'étudier l'influence de ce modèle sur le calcul du courant d'obscurité. De plus dans la littérature, les effets du champ électrique sont généralement étudiés pour un piège situé au milieu de la bande interdite du semi-conducteur avec des paramètres fixés. Cette hypothèse n'est pas forcément représentative de l'influence réelle du champ électrique sur l'augmentation du courant d'obscurité. C'est pour cette raison qu'une fois le modèle validé, son impact sur la génération de charges sera étudié par le biais d'études paramétriques. Enfin, ce nouveau moyen de modéliser les effets du champ électrique est incorporé à *DAAN*, puis les résultats de simulation sont comparés aux données expérimentales.

Jusqu'à aujourd'hui, le choix de la nature des pièges et des paramètres associés est effectué arbitrairement. De plus, notre méthode de prédiction repose sur l'utilisation du facteur de dommage universel. Ce coefficient de proportionnalité est déterminé à partir d'un grand nombre de mesures expérimentales réalisées dans des conditions d'irradiation différentes sur des composants différents. Par conséquent, un tel coefficient correspond à un facteur moyen de dégradation, et masque les phénomènes de réorganisation qui se mettent en place au cours du temps. Dans le but de s'affranchir de ce coefficient empirique, et de choisir de manière plus réaliste les défauts responsables de l'augmentation du courant d'obscurité, un modèle de réorganisation des défauts est nécessaire. C'est pour répondre à cette contrainte qu'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo a été développé au cours de la thèse. La réorganisation des défauts répartis uniformément dans un volume est étudiée par le biais de cet algorithme au cours du chapitre V. Le principe de fonctionnement du programme associé à cet algorithme et sa validation sont présentés, et le taux de guérison des défauts au cours du temps est évalué grâce à ce nouvel outil.

Il se trouve malgré tout que le taux de guérison des défauts est surestimé par rapport aux informations disponibles dans la littérature. Afin d'améliorer le modèle, les cascades de dommage sont simulées grâce à l'application *ARAMIS*. Une chaîne de simulation est ainsi proposée dans le chapitre VI de ce manuscrit. Elle fait appel à l'application *GEANT4 ARAMIS*, à l'algorithme Kinetic Monte Carlo ainsi qu'à l'outil de prédiction du courant d'obscurité *DAAN*. Ce dernier considère le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions proposé dans le chapitre IV. Une approche similaire mais plus complexe proposée par *Raine et al.* [5] et *Jay et al.* [6], [7] est utilisée pour expliquer l'apparition de pixels avec un signal télégraphique aléatoire (abrégé RTS en anglais) après irradiation. Ce chapitre final a pour objectif de proposer une méthode plus simple mais dédiée à la prédiction du courant d'obscurité, mais également de présenter une alternative aux méthodes de calcul utilisant les facteurs de dommage empiriques.

Chapitre I : Les capteurs d'images

Les satellites embarquent aujourd'hui de nombreux dispositifs de mesure pour réaliser les objectifs de leurs missions, souvent appliquées aux domaines des télécommunications et scientifiques. Une partie de ces instruments font partie de la catégorie des capteurs d'image, également appelés imageurs. Ces dispositifs permettent d'enregistrer une scène placée dans leur ligne de visée. C'est grâce à ces instruments que l'Homme a pu pour la première fois observer la Terre vue de la haute atmosphère. Cependant, ces appareils ne sont pas parfaits et le signal enregistré ne correspond pas exactement à ce qui a été réellement observé. Cette fluctuation du signal est liée à ce que l'on appelle un bruit. Ces bruits proviennent de sources différentes et vont influencer l'information enregistrée. Ils sont intrinsèques au capteur d'image.

De plus, lorsque ces capteurs d'image sont exposés aux rayonnements énergétiques issus de l'environnement spatial, leurs fonctionnalités peuvent se dégrader. Ceci est dû aux différentes interactions qui peuvent avoir lieu entre le rayonnement énergétique incident et la matière qui composent le capteur. La nature de ces dégradations dépend notamment des matériaux utilisés pour fabriquer l'imageur, de l'architecture des composants ainsi que des techniques utilisées pour concevoir le composant.

Au cours de ces travaux de thèse, l'accent a été exclusivement porté sur la baisse de performance liée à l'augmentation d'un bruit parasite après qu'un imageur ait été irradié : le courant d'obscurité. Nous allons voir au cours de ce chapitre le principe de fonctionnement d'un imageur, ainsi que les différentes techniques de fabrication d'un tel dispositif. Enfin, une description des différents bruits que l'on peut rencontrer dans un imageur sera proposée. Au travers de chaque section, nous verrons quelles peuvent être les sources de courant d'obscurité intrinsèque dans les imageurs. Cette analyse permettra de mieux appréhender les mécanismes physiques à l'origine de l'augmentation du courant d'obscurité dans un capteur d'image après qu'il ait été exposé à un rayonnement énergétique.

I.1 Revue des capteurs d'image modernes

Une image est la transcription numérique d'une scène observée dans un plan bidimensionnel par un dispositif mélangeant des composants optiques et électroniques (ces dispositifs sont alors qualifiés « optroniques »). Les capteurs d'image utilisent le rayonnement électromagnétique incident provenant de la scène observée pour recréer celle-ci dans un format numérique exploitable par des outils développés par l'Homme. Quel que soit le rayonnement électromagnétique étudié, le processus de création de l'image reste le même. Tout d'abord, en fonction des propriétés du rayonnement électromagnétique incident, ce dernier va modifier les propriétés thermiques ou électriques d'un matériau sensible exposé au rayonnement. Cette variation des propriétés thermoélectriques est proportionnelle à la quantité de rayonnement reçu par le dispositif de collection du signal. L'information liée à la scène observée est ensuite stockée par un système électronique. Ce signal analogique est par la suite converti en signal numérique puis amplifié pour pouvoir être lu par n'importe quel dispositif comme un ordinateur, un téléphone portable ou encore un appareil photo.

Par exemple, les bolomètres sont des capteurs d'image qui utilisent les propriétés du rayonnement infrarouge. En chauffant la zone sensible du capteur bolométrique, le rayonnement infrarouge va induire une variation de la résistance électrique du matériau [1]. Cette modification de la résistance permet ensuite de construire une image de la scène observée. Chaque domaine du spectre électromagnétique possède ses propres caractéristiques et demandent des composants spécifiques pour pouvoir l'observer. Pour le domaine visible, les capteurs photoniques utilisent le plus souvent les propriétés semi-conductrices des matériaux. Un matériau en particulier, le silicium, est privilégié pour l'étude du domaine visible. Seuls les capteurs photoniques en silicium pour le

domaine visible ont été étudiés au cours de la thèse. Les imageurs font partie de la famille des capteurs pixélisés, c'est-à-dire que le capteur forme une matrice de composants discrets sensibles à l'exposition lumineuse, appelés « pixels » (de l'anglais picture element). Chaque pixel possède une zone sensible à la lumière que l'on appelle photosite.

La gamme de longueur d'onde à observer par le capteur définit notamment l'épaisseur des composants sensibles et les matériaux utilisés pour les fabriquer. Un schéma présentant le spectre électromagnétique et les matériaux préférentiels associés à chaque domaine du spectre est proposé en Figure I.1 [2].

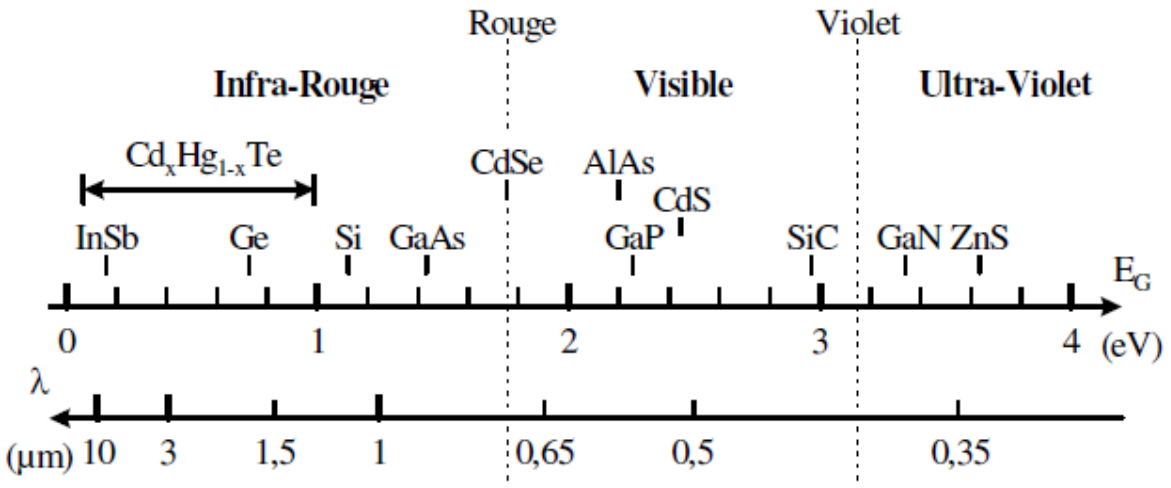


Figure I.1: Chaque matériau est adapté à la détection d'un domaine restreint du spectre électromagnétique. Le silicium est par exemple adapté pour la détection du rayonnement visible et proche infra-rouge. Crédits : Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, A.Chovet et P. Masson.

Un matériau en particulier, le silicium, s'est imposé comme référence pour la fabrication des imageurs observant le domaine visible. Le silicium est très utilisé car il est présent en forte abondance à l'état naturel (le silicium représente 24% de la matière présente dans la croûte terrestre), est facilement conducteur d'électricité [3], peut fonctionner selon une large gamme de température et est facile à traiter [4]. De plus, ses propriétés semi-conductrices correspondent très bien avec les critères requis pour étudier le domaine visible, ce qui a contribué fortement à l'expansion de son utilisation dans l'industrie.

Deux familles de capteurs d'image se sont appuyées sur les performances du silicium pour le domaine visible : les CCD (pour Charge Coupled Device en anglais) et les CMOS (pour Complementary Metal Oxyde Semiconductor en anglais). Les CCD et les CMOS ont émergé dans les années 1960, mais les CCD se sont rapidement imposés comme la technologie de choix pour les techniques d'imagerie, grâce à son faible bruit de lecture et à sa résolution d'image [5]. La domination des CCD a perduré jusque dans les années 1990. Après cette décennie, les imageurs CMOS ont rattrapé leur retard sur leurs concurrents pour devenir la technologie incontournable tant dans le secteur scientifique que commercial. En effet, de nombreux efforts de recherche ont été menés pour diminuer le bruit de lecture et augmenter les performances des CMOS. C'est néanmoins le besoin de construire des imageurs moins chers que les CCD mais avec des performances équivalentes qui ont poussé les laboratoires Bell Labs et Jet Propulsion Laboratory de la NASA à développer cette technologie [6]. Les capteurs CMOS se sont montrés moins sensibles aux effets des particules de haute énergie, et nécessitent une alimentation électrique moindre, tout en réduisant la taille des dispositifs. Ils permettent également d'intégrer plus de fonctionnalités dans un seul et même capteur à moindre coût. Le développement des CMOS a mené à une explosion des applications de cette technologie. Les capteurs CCD restent les leaders dans les domaines exigeant de hautes performances

photographiques (comme l'astronomie par exemple), mais les technologies CMOS dominent le marché, tant du grand public que des industriels. Le domaine de l'aérospatial n'a pas échappé à la vague du CMOS, ceci dans le but de minimiser les coûts des missions spatiales et d'embarquer des dispositifs polyvalents et produits à grande échelle [7]. En effet, la conception d'un imageur étant similaire à environ 90% aux puces électroniques utilisées en informatique, leur production de masse fait tendre les prix vers le bas. Ce type de produit est appelé COTS pour Commercial Off The Shelf en anglais. Les capteurs utilisés au cours de la thèse font partie de cette gamme de produits. L'évolution technologique des capteurs CMOS, composants exclusivement utilisés au cours de la thèse, est dépeinte dans la partie suivante.

I.2 Evolution des capteurs CMOS

Bien que les CMOS présentent le même principe de fonctionnement depuis leur création dans les années 1960, l'architecture et les fonctionnalités intégrées dans les CMOS n'ont cessé d'évoluer avec le temps pour optimiser leurs performances et ainsi détrôner les capteurs CCD sur le marché des capteurs d'image, avant de devenir les capteurs modernes décrits dans la partie précédente. Un bref historique consacré à l'évolution technologique des capteurs CMOS est présenté dans cette partie.

I.2.1 CMOS de type Passive Pixel Sensor (PPS)

Historiquement, les CMOS faisaient partie de la famille des détecteurs à pixel passif (Passive Pixel Sensor en anglais, abrégé PPS), avec une architecture proche des mémoires numériques. Un capteur d'image CMOS PPS est composé d'au moins [8]:

- Une matrice de pixels contenant chacun une photodiode et un transistor d'adressage agissant comme un interrupteur.

- Un registre d'adressage ou d'acquisition selon l'axe Y pour gérer le capteur ligne par ligne, par activation du transistor d'adressage intra pixel.

- Un registre d'adressage ou d'acquisition selon l'axe X pour gérer séquentiellement les pixels d'une seule ligne, l'un après l'autre.

- Un amplificateur de sortie.

Dans cette configuration, les charges sont photo-générées dans la photodiode puis transférées en dehors du pixel par le transistor d'adressage vers les différents registres associés au mode de lecture souhaité par l'utilisateur. Le signal est ensuite amplifié pour pouvoir être lu. Cette configuration présente l'avantage de posséder un taux de remplissage élevé, c'est-à-dire qu'une grande partie de la surface du pixel est consacrée à la collection des photo-charges. Cependant, cette méthode de fonctionnement souffre d'un inconvénient rédhibitoire pour les capteurs d'images : le niveau de bruit très élevé dans les pixels.

I.2.2 CMOS de type Active Pixel Sensor (APS)

Dans le but de réduire le niveau de bruit des CMOS PPS, et pour intégrer plus de fonctionnalités au cœur de chaque pixel, les capteurs CMOS à pixel actif (Active Pixel Sensor en anglais, abrégé APS) ont été conçus. Leur configuration correspond à celle décrite dans la partie I.3. Chaque pixel intègre au moins un transistor de réinitialisation, un transistor suiveur, un transistor d'adressage ainsi qu'un amplificateur de sortie. Même si le facteur de remplissage des CMOS APS est moindre que celui des CMOS PPS, à cause du plus grand nombre d'éléments électroniques, elle équipe la plupart des imageurs modernes grâce à ses meilleures performances. L'évolution technologique a également permis d'intégrer un nombre grandissant de transistors avec le temps et d'optimiser la configuration de chaque élément contenu dans les pixels, rendant leur

fonctionnement de plus en plus complexe. Il existe différents types de technologies, nommées par le nombre de transistors que comporte la chaîne électronique. Par exemple, un CMOS composé de trois transistors sera nommé 3T, 4T pour quatre transistors et ainsi de suite. Les structures de pixels CMOS contenant un nombre varié de transistors (entre 3 et 5) ainsi que leurs améliorations sont présentées en Figure I.5 et Figure I.6.

Les pixels modernes sont généralement recouverts de couches d'oxyde et sont séparés entre eux par des implants d'oxyde. Plusieurs techniques existent pour implanter ces oxydes d'isolation, comme la technique LOCOS (Localized Oxydation of Silicon) ou le procédé STI (Shallow Trench Isolation). Les procédés d'implantation des oxydes ne seront pas détaillés dans ce manuscrit, mais les procédés de fabrication des jonctions PN seront présentés en section I.5. Même si les techniques de dépôt d'oxyde permettent d'isoler les pixels entre eux, à l'image des pixels 4T, ces implants et couches d'oxyde sont des sources de dégradation du signal collecté en produisant des états d'interface, et le nombre d'états d'interface augmente avec le niveau d'irradiation. Les dégradations liées aux oxydes seront présentées succinctement dans le chapitre II. Dans le but de limiter cette dégradation, les CMOS ont connu quelques améliorations. La plus marquante est l'utilisation d'un implant semi-conducteur fortement dopé au-dessus de la jonction PN servant à créer la Zone de Charge d'Espace (ZCE, voir partie I.3.2.1), afin de dissocier le nœud de collection et le nœud de lecture. Cette configuration permet de limiter l'étendue de l'interface entre le nœud de collection et l'oxyde. Cette configuration de photodiode s'appelle une photodiode « pincée » (ou Pinned PhotoDiode en anglais, abrégé PPD), illustrée en Figure I.6.

De plus, l'utilisation de microlentilles pour concentrer le flux de photons incidents permet de compenser en partie la baisse du facteur de remplissage [1]. Pour être plus précis, ces microlentilles peuvent également être utilisées pour filtrer les photons en fonction des longueurs d'onde et ainsi créer une image en couleur. Le filtre le plus utilisé est le filtre de Bayer, illustré en Figure I.2. Cette configuration, apparue en 1976, associe chaque photosite à une microlentille filtrant une couleur précise : le bleu, le vert ou le rouge.

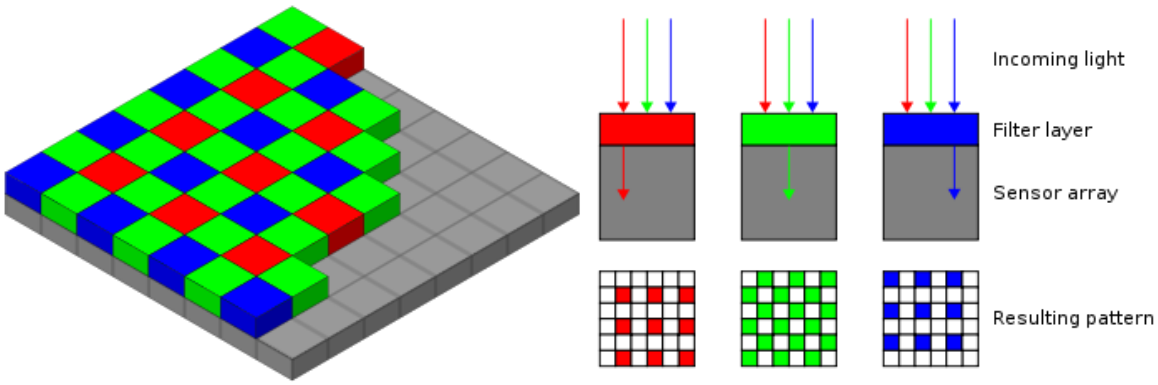


Figure I.2 : Représentation d'un filtre de Bayer (à gauche) et de la décomposition de la lumière incidente en fonction du pixel éclairé (à droite). Il y a deux fois plus de filtres verts que de filtre rouge ou bleu, car l'œil humain est plus sensible à la couleur verte. Ceci permet de réaliser une imitation de la sensibilité de nos yeux. Crédits : wikipédia.org

L'évolution des capteurs d'image n'aurait jamais pu avoir lieu sans la progression des techniques de fabrication des composants électroniques. Les principaux procédés de fabrication et de dopage sont présentés dans la section I.5. Une description détaillée du principe de fonctionnement d'un capteur d'image CMOS APS est proposée dans la section suivante.

I.3 Principe de fonctionnement des imageurs modernes

Les CCD et les CMOS, bien que différents par leur architecture, procèdent de manière identique pour créer une image. Dans ces dispositifs, une image est créée selon 4 étapes successives :

- La génération des photo-charges
- La collection des porteurs de charge
- Le transfert de ces charges
- La conversion des photo-charges

Ces opérations sont réalisées de différentes manières selon le type de capteur, mais le principe reste le même. Chaque étape listée ci-dessus sera détaillée dans les paragraphes suivants dans le cas d'un capteur de type CMOS, puisque les imageurs utilisés pendant la thèse font partie de cette catégorie.

I.3.1 La génération des photo-charges

L'objectif de cette opération est de maximiser la quantité d'information collectée en fonction de la région du spectre électromagnétique étudiée. Lorsqu'une matrice de pixels est exposée à une scène, chaque pixel qui la compose reçoit une quantité d'éclairement proportionnelle à la section de la scène observée. Dans les CMOS, les charges sont créées grâce à l'effet photoélectrique, et sont ainsi appelées photo-charges. L'effet photoélectrique consiste en l'excitation d'un électron situé dans la bande de valence vers la bande de conduction si l'énergie incidente du photon est supérieure à la largeur de la bande interdite du semi-conducteur. La largeur de la bande interdite est définie comme la différence d'énergie entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction et est appelé communément « gap », terme provenant de l'anglais. Dans le silicium, la largeur de la bande interdite vaut $1{,}12\ eV$ à température ambiante. Ainsi pour créer une photo-charge dans le silicium, ou plus exactement pour générer une paires électron-trou (cf chapitre II), le photon doit avoir une énergie au moins égale à $1{,}12\ eV$ (voir Figure I.3).

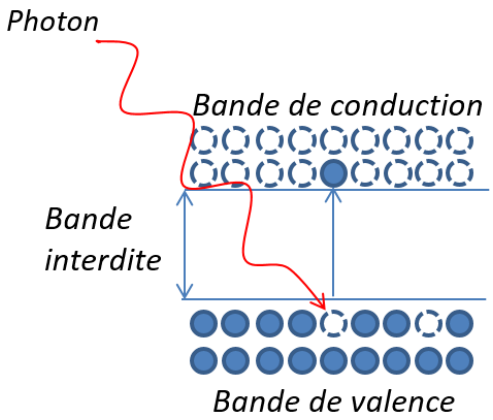


Figure I.3 : Illustration de l'effet photoélectrique. Un photon vient céder une partie de son énergie dans la matière. Si l'énergie est supérieure à la largeur de la bande interdite du semi-conducteur, un électron est émis depuis la bande de valence vers la bande de conduction. Par conséquent, un trou est laissé dans la bande de valence.

I.3.2 La collection des charges

Le but de cette étape est de recueillir le signal produit au cours de l'éclairement du capteur avec le moins de perte d'information possible. Les structures de collection privilégiées dans les CMOS sont les photodiodes basées sur des jonctions PN. En revanche les structures utilisées dans les CCD sont plutôt de type photoMOS, mais ne seront pas détaillées dans ce manuscrit.

I.3.2.1 La jonction PN : le cœur du pixel d'un imageur

Comme les imageurs, de nombreux dispositifs électroniques reposent sur l'utilisation de jonctions PN. La jonction PN est la juxtaposition d'un semi-conducteur dopé P et d'un semi-conducteur dopé N. La dénomination « P » ou « N » indique la nature du dopage du semi-conducteur. Le dopage est apporté par l'implantation d'atomes étrangers au réseau cristallin appelés « dopants ». Des atomes dopants de type P (Bore B, Gallium Ga, Indium In…) apportent un excès de places d'électrons vacantes dans la bande de valence du semi-conducteur, appelés trous. A l'inverse, des atomes dopants de type N (Phosphore P, Arsenic As, Antimoine Sb…) apportent un excès d'électrons dans la bande de conduction. Le dopage a pour effet d'augmenter la conductivité du

matériau ciblé. Il existe plusieurs techniques pour doper les semi-conducteurs telles que le dopage par diffusion, par implantation ionique [9], [10], par transmutation nucléaire [11] ainsi que par des techniques lasers [12], et seront détaillées dans ce manuscrit dans la section I.5.2.

La mise en contact d'un cristal dopé N et d'un autre cristal dopé P entraîne une variation brusque du dopage. Par phénomène de diffusion, les électrons et les trous vont naturellement diffuser d'une région à l'autre de la jonction : les électrons issus du cristal dopé N vont diffuser vers le cristal dopé P et inversement pour les trous qui tendent à diffuser du cristal dopé P vers le cristal dopé N (voir Figure I.*4*). Lorsqu'aucune tension n'est appliquée, les conditions d'équilibre sont atteintes : les électrons du cristal N proche de l'interface de la jonction qui ont diffusé vers le cristal P ont laissé derrière eux des ions positivement chargés dans la région N et ces électrons vont se recombiner avec les trous de la région P, formant ainsi des ions négativement chargés dans la région P. Le phénomène inverse s'applique également pour les trous. Les zones proches de l'interface de la jonction PN perdent leur neutralité électrique et la plupart de leurs porteurs libres, créant ainsi une zone dite « en déplétion », aussi appelée zone de charge d'espace (ZCE).

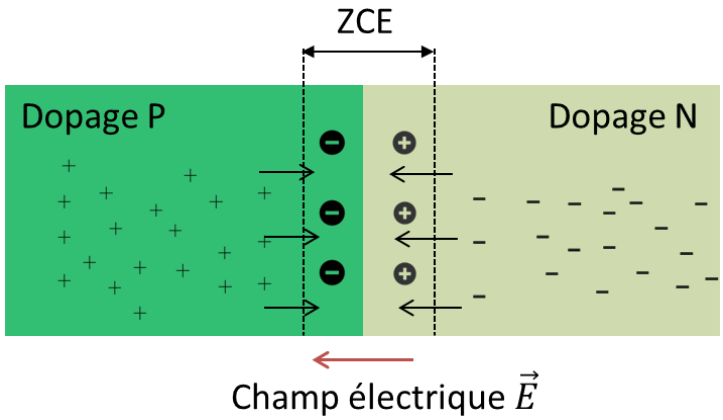


Figure I.4 : Schéma simplifié d'une jonction PN. Les charges majoritaires (trous du côté P, électrons du côté N) diffusent vers le côté de la jonction PN où leur nombre est minoritaire (les trous diffusent vers le côté N, les électrons vers le côté P). Les porteurs vont ainsi se recombiner à l'interface, laissant derrière eux une région dépourvue de porteurs libres : la zone de charge d'espace (ZCE) ou zone en déplétion.

Cette zone en déplétion crée un champ électrique qui s'oppose à la diffusion des électrons et des trous de part et d'autre de la jonction. La façon dont la tension sera appliquée aux bornes de la jonction PN déterminera les applications possibles de la jonction. Une polarisation directe (tension positive au terminal P) permet à un courant de s'établir. En revanche une polarisation inverse (tension négative au terminal P) bloque la circulation du courant, un très faible nombre de porteurs de charge arrivent à traverser la jonction. Dans le cas des imageurs, lors de l'acquisition d'une scène, le pixel est polarisé en inverse pour collecter les charges produites par les photons provenant de la scène.

L'utilisation d'une polarisation inverse engendre la création d'un fort champ électrique qui présente un impact non négligeable sur la dégradation des imageurs irradiés. Le rôle du champ électrique dans la dégradation des performances des imageurs sera étudié dans le chapitre III (voir paragraphe III.3.3).

En pratique dans les imageurs, la jonction PN est formée à partir d'un substrat d'un type donné, surmonté d'une couche plus fine de silicium fortement dopé du même type (le type est alors annoté avec un « + », par exemple N+). De cette manière, la ZCE s'étend en grande partie dans le substrat, afin de maximiser la taille de la zone qui va pouvoir collecter les photo-charges. En fonction du dopage de chaque partie de la jonction PN, il est possible de connaître le rapport de l'extension de la zone de charge d'espace dans les blocs N et P dans une représentation en une dimension [9]:

$$N_A L_A = N_D L_D \quad \text{(I.1)}$$

où N_A et N_D sont les niveaux de dopage (en $atomes.cm^{-3}$) du bloc dopé P et dopé N respectivement, L_A et L_D la longueur de l'extension de la ZCE dans le bloc dopé P et dopé N respectivement (en cm). Par exemple, si le bloc P est 100 fois plus dopé que le bloc N, la ZCE s'étendra 100 fois plus dans la zone N que dans la zone P.

I.3.2.2 Structures de collection d'une photodiode

Les pixels de type CMOS sont des photodiodes. Une photodiode repose sur l'utilisation des jonctions PN décrites dans le paragraphe précédent. Le substrat semi-conducteur (dopé P ou N) est surmonté d'une couche plus fine d'un semi-conducteur fortement dopé du type opposé (N ou P). Le tout est surmonté d'une couche d'oxyde de passivation. Pour collecter les charges, il est nécessaire que la polarisation appliquée sur la couche fortement dopée soit en inverse, c'est-à-dire une tension positive sur la couche N+ ou une tension négative sur la couche P+, tout dépend du choix de fabrication de la photodiode. En appliquant une telle polarisation, une zone de charge est créée pour séparer les photo-charges. Grâce aux propriétés de cette zone spécifique, les paires électron-trou générées au niveau de la zone de déplétion seront séparées par le champ électrique avant qu'elles ne puissent recombiner. En fonction de l'énergie du photon incident, ce dernier va créer les paires électron-trou à des profondeurs différentes dans la zone sensible du pixel, dans la ZCE même ou bien en périphérie. Par l'intermédiaire du champ électrique, les deux types de charges sont déplacés vers des régions différentes. C'est ensuite une des structures complexes présentées en Figure I.5 et Figure I.6 qui prend le relais pour collecter les charges. Généralement, les photodiodes collectent les électrons, mais il est possible de rencontrer des photodiodes collectant des trous.

La zone sensible du pixel est l'une des sources majeures du courant d'obscurité (cf paragraphe I.4.2) car c'est dans cette région du pixel que les porteurs de charge issus d'autres mécanismes que la photo-génération peuvent s'ajouter au signal utile.

Des oxydes de champ sont également présents près des bords latéraux en surface du pixel, afin d'isoler le pixel de ses voisins en limitant l'expansion de la zone de charge d'espace de chaque pixel. Des coupes schématiques de photodiodes de type 3T et 4T sont présentées en Figure I.5, tandis qu'une coupe d'une photodiode de type 5T est présentée en Figure I.6.

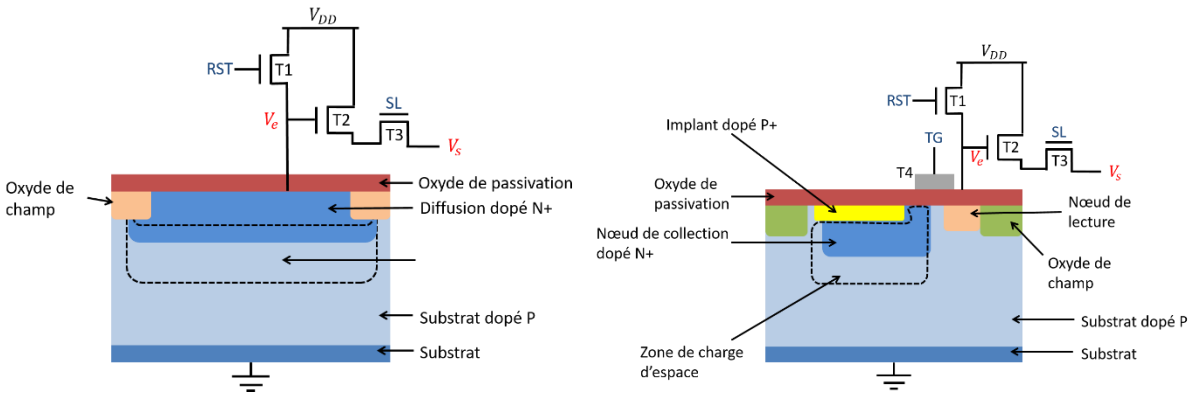


Figure I.5 : Représentation schématique d'une coupe d'un capteur d'image CMOS 3T à canal de surface (à gauche) et 4T à canal enterré (à droite). Les nœuds de collection et de lecture sont communs pour un CMOS 3T, contrairement au CMOS 4T où les nœuds de collection et de lecture sont séparés.

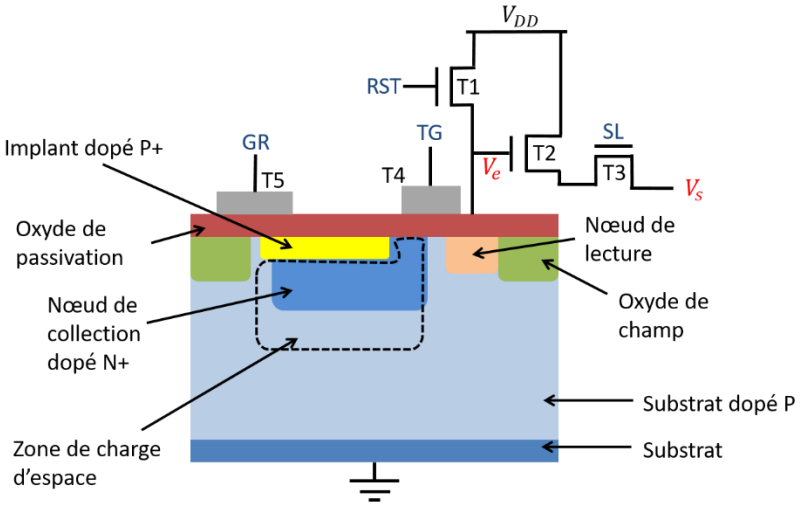


Figure I.6: Représentation schématique d'une coupe d'un CMOS 5T Pinned PhotoDiode (PPD), avec un canal enterré.

I.3.2.3 Efficacité de la collection de charges

Dans les capteurs CMOS, toute la surface du pixel exposée n'est pas utilisée pour créer des photo-charges, car une partie de l'électronique est directement intégrée dans le pixel, ce qui n'est pas le cas des CCD où chaque opération est réalisée à un emplacement différent dans le système optronique. Le rapport entre la surface totale du pixel et la surface utile à la génération de charges est appelé le taux de remplissage. De plus, il est possible d'estimer la capacité d'un capteur à créer des photo-charges en fonction de ses propriétés et par la suite à les collecter. Cette mesure se nomme le rendement quantique. Pour être plus précis, cette grandeur correspond au rapport entre le nombre d'électrons collectés et le nombre de photons incidents à une longueur d'onde donnée. Dans le cas idéal, le rendement quantique est égal 1, cela signifie que chaque photo-charge générée par un photon est collectée.

Dans un cas réel, l'architecture du pixel peut affecter le rendement quantique au travers de trois mécanismes : l'absorption, la réflexion et la transmission. Par exemple, les couches supérieures du volume déplétion peuvent réfléchir certains photons, affectant le nombre de paires électron-trou créées par rapport au nombre de photons incidents. De manière similaire, un photon peut être absorbé avant même qu'il est atteint la zone sensible du pixel par un autre élément actif du pixel. Le mécanisme de transmission est quant à lui dépendant de la longueur d'onde du photon incident. Celui-ci survient lorsque qu'une partie des photons incidents déposent de l'énergie sans contribuer à la génération de paires électron-trou.

Chaque matériau est capable d'absorber une longueur d'onde maximale, ce qui induit par conséquent une profondeur minimale pour collecter le signal produit par les photons incidents. En effet si le photon traverse le matériau, seul du bruit ou une fraction du signal incident sera enregistré. A l'inverse si le matériau est trop épais pour la longueur d'onde souhaitée, le signal n'atteindra jamais la zone sensible du composant, et donc il sera impossible de visualiser la scène observée. Une illustration de ce mécanisme est présentée en Figure I.7 [1].

Pour que l'effet photoélectrique se déclenche, il faut donc que le photon ait une énergie minimale au moins égale à la largeur de la bande interdite. Cette énergie minimale E correspond à une longueur d'onde maximale du photon λ, évaluée grâce à la relation de Planck-Einstein (Equation (I.1)) [13]:

$$E = \frac{h}{\lambda} \tag{I.1}$$

Cette relation n'est valable que pour des semi-conducteurs de type II-IV, III-V et IV [14]. Cette longueur d'onde maximale est reportée sur la Figure I.7 pour chaque matériau. L'énergie du photon étant reliée à une longueur d'onde, elle est également associée à une profondeur d'absorption. La loi de Beer-Lambert-Bouguer [15] permet d'évaluer le coefficient d'absorption d'un matériau et la profondeur d'absorption en fonction de la longueur d'un photon (voir Figure I.*8*).

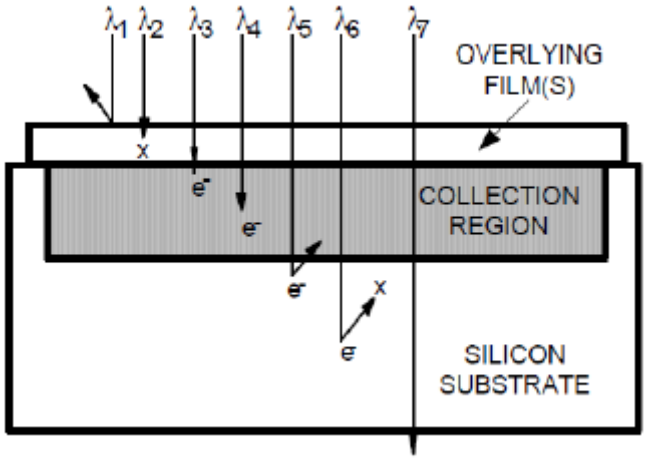


Figure I.7: Illustration de la profondeur de pénétration des photons en fonction de leur longueur d'onde. Les longueurs d'onde numérotées 1 et 2 correspondent typiquement au domaine UV. La longueur d'onde numérotée 7 correspond plutôt au domaine infra-rouge. Crédits : Isabelle Ribet-Mohammed, Labex FOCUS.

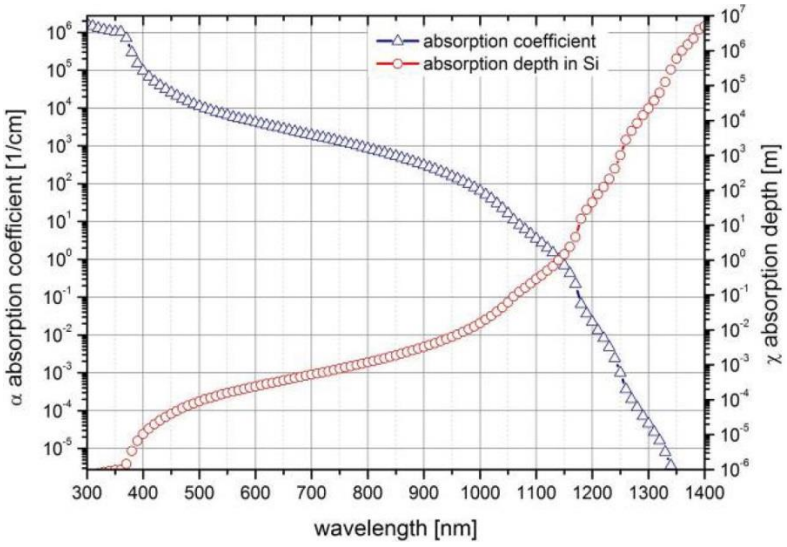


Figure I.8 : Coefficient d'absorption du silicium (courbe triangles bleus) et profondeur de pénétration d'un photon dans du silicium (courbe cercles rouges) en fonction de la longueur d'onde [16].

Dans le silicium, il est possible de distinguer deux cas importants de transmission :

- Si la longueur d'onde correspond au domaine des rayons UV (λ < 200 nm), la forte absorption dans le domaine UV des matériaux en général fait qu'une grande proportion des photons est absorbée par les éléments situés au-dessus de la zone de déplétion.

- Si la longueur d'onde correspond au domaine de l'infrarouge (λ > 800 nm), les photons n'ont pas assez d'énergie pour créer une paire électron-trou dans le silicium. Par conséquent, les photons vont pénétrer dans le pixel sans contribuer à la génération de charges.

I.3.3 Le transfert des charges

Une fois les charges collectées, ces dernières doivent être acheminées vers l'étage de conversion charge-tension. L'avantage des imageurs de type CMOS est de concentrer les opérations de conversion et de lecture du signal au sein même du pixel. Cela permet de minimiser le bruit lié au transfert de charges, contrairement aux capteurs de type CCD. En fonction de la technologie employée, les opérations de conversion et de lecture peuvent s'effectuer sur le même nœud (cas des CMOS 3T) ou sur des nœuds différents (cas des CMOS 4T et 5T). Il n'y a donc pas de transfert de charges pour un CMOS de type 3T. En revanche pour des CMOS de type 4T ou 5T, une grille de transfert (« Transfer Gate » en anglais) est nécessaire pour amener les charges du nœud de collection vers le nœud de lecture.

I.3.4 La conversion des charges

Dans les capteurs d'image, le dispositif de conversion des charges photo-générées en tension est directement intégré. Chaque type de CMOS présente une configuration des différents éléments nécessaires à la conversion qui leurs sont propres.

Une photodiode de type 4T ou 5T convertit les photo-charges en tension selon les 4 opérations successives suivantes (voir Figure I.5 et Figure I.6):

- Une tension de réinitialisation est appliquée au nœud de lecture dans le but de créer un volume de déplétion grâce au transistor T1

- La grille de transfert (T4) est polarisée avec une tension positive pour créer un passage entre les charges le volume de déplétion du nœud de collection vers la capacité du nœud de lecture. Le fait de charger la capacité réduit la tension aux bornes du nœud de lecture. C'est à cette étape que les charges (signal analogique) sont converties en tension (signal numérique).

- Une tension proportionnelle à la tension aux bornes du nœud de lecture (donc au nombre de charges collectées) est transmise au transistor suiveur T2.

- Le transistor d'adressage T3 sert à transmettre la tension du transistor T2 au bus colonne pour être lue seulement une fois que l'étape précédente est complète.

Les technologies actuelles ne permettent pas de lire tous les pixels en même temps. Des techniques alternatives sont donc utilisées pour lire les pixels. En général, chaque pixel transfère à son bus colonne une tension qui est proportionnelle au nombre de charges générées par les photons provenant de la scène observée. Le signal de chaque pixel d'une même colonne est ensuite converti grâce à un convertisseur colonne. Il existe à l'heure actuelle deux stratégies faisant appel à des techniques différentes pour récupérer l'information contenue dans chaque pixel [7] :

- La technique à obturateur glissant (Rolling Shutter en anglais) : la collection et la lecture des charges sont effectuées séquentiellement une ligne après l'autre, provoquant un décalage temporel entre la lecture de deux lignes consécutives. De cette manière, les charges contenues dans chaque nœud de collection restent dans le pixel pendant une durée identique pour n'importe quel pixel. Cela implique que l'acquisition est décalée dans le temps. Cette technique n'est donc pas adaptée pour l'observation de scènes en mouvement. L'exemple le plus courant pour montrer les limites de cette technique est l'image d'une pale d'un moteur d'avion ou d'hélicoptère en rotation.

- La technique à obturateur électronique global (Global Shutter en anglais) : contrairement à la technique précédente, l'acquisition de la scène est réalisée de manière simultanée dans

toute la matrice de pixels, puis le signal contenu dans chaque pixel est lu ligne par ligne. Cette technique peut être considérée comme la plus intuitive, puisque chaque pixel a capté les photons provenant d'une scène à une date identique. Cependant, ce procédé implique que les charges ne sont pas lues immédiatement et restent au niveau du nœud de collection. La lecture des pixels est donc décalée dans le temps. Si les dispositifs de collection et de lecture sont endommagés par les effets des radiations, l'information recueillie peut être erronée et ne pas correspondre à ce qui a été observé pendant le temps d'intégration. Cette technique est donc plus sensible aux effets des radiations que la précédente car les charges sont stockées plus longtemps en attendant d'être lue.

Dans tous les cas, que ce soit pour des capteurs CCD ou CMOS, pour n'importe quelle architecture de collection ou de lecture, l'information utile extraite de la scène observée est toujours la tension issue des photo-charges collectées. Une fois le signal récupéré dans chaque pixel, ce signal est amplifié puis numérisé pour réaliser une matrice de données lisibles par ordinateur ou tout autre support.

I.4 Origine des différentes perturbations liées aux capteurs d'image

Dans les sections précédentes, les différents mécanismes pour récolter les photo-charges, leur transfert et leur conversion en un signal numérique ont été présentés. Au cours de ces différents processus, l'information collectée initialement issue de la scène observée peut légèrement différée de celle reçue après la conversion et la lecture des charges. En effet lors de chaque opération, un nombre variable de charges peut s'ajouter aux photo-charges générées. Ces charges additionnelles sont décorrelées du mécanisme de génération de photo-charges [17]. Le bruit correspond à la fluctuation statistique du nombre de charges additionnelles. Il existe différentes sources de bruits, soit liées à la nature du signal étudié, soit aux différents composants du système étudié ou aux opérations effectuées sur les paquets de charges électriques. Cette partie est dédiée à la description des différentes sources de perturbations du signal liées aux bruits que l'on peut rencontrer lors du fonctionnement d'un imageur.

I.4.1 Les bruits temporels

Un bruit temporel est une perturbation du signal qui diffère dans le temps [18]. Cela signifie que pour un même pixel, la perturbation ne sera pas identique d'une image à une autre. Les bruits temporels sont créés soit à cause de la nature du rayonnement incident, soit à cause de certains éléments du pixel lui-même. Parmi les bruits les plus fréquents, il existe [7], [14], [17]–[21]:

- Le bruit de grenaille ou bruit de photons (ou shot noise en anglais) : ce bruit survient à cause de la nature corpusculaire de la lumière. Le nombre de photons rencontrant une surface n'est pas constant au cours du temps. Le flux de photons est semblable à un flux de particules arrivant sur la surface d'un objet (le pixel dans notre cas) avec un taux τ_{ph}. Au cours du temps d'intégration t_{int}, le nombre moyen de photons arrivant sur la surface du détecteur est égal à $N_{ph} = \tau_{ph} \times t_{int}$. Cependant la probabilité de détecter n photons durant le temps t_{int} suit une distribution statistique de Poisson, exprimée comme suit (Equation (I.2)) :

$$P(n = N_{ph}) = \exp(-N_{ph}) \frac{{N_{ph}}^n}{n!} \tag{I.2}$$

  Comme le flux de photons suit une loi de Poisson, l'écart-type de cette distribution est égal à $\sigma_{ph} = \sqrt{N_{ph}}$. L'écart-type nous renseigne ainsi sur le nombre de charges générées et collectées correspondant au bruit de photons.

- Le bruit de recharge (reset en anglais) ou bruit thermique : ce bruit correspond à la fluctuation de photo-charges aux bornes de la capacité C créée dans le pixel. Ce bruit survient lors de la phase de pré-charge du nœud de collection du pixel. Le nombre de charges associées à ce bruit peut être estimé suivant la relation : $\sigma_{reset} = k_B TC$ avec k_B la constante de Boltzmann et T la température régnant dans le pixel. Ce bruit s'intègre au signal lu durant la phase de lecture. Une méthode pour s'affranchir de ce bruit de recharge est de réaliser un double échantillonnage corrélé, mais est seulement possible avec des pixels à photodiode enterrée [19].

- Le bruit de transfert de charges : ce bruit est lié à la présence d'impuretés à l'interface semi-conducteur/oxyde. Deux processus se mettent en place : les impuretés sont des centres de génération de charges, libérant de manière aléatoire des charges qui peuvent s'additionner au paquet de photo-charges en cours de transfert. A l'inverse, ces impuretés peuvent être des pièges sur le parcours des photo-charges vers le nœud de lecture, et certaines d'entre elles peuvent être capturées par les pièges, diminuant le nombre de charges transférées.

- Le bruit de scintillement (ou flicker noise en anglais) : communément appelé bruit en « 1/f » ou basse fréquence, il correspond à une altération de la conductivité des composants. Dans le cas des imageurs CMOS, ce bruit est connu pour impacter les transistors des pixels, en particulier le transistor suiveur. De manière similaire au bruit de transfert de charges, les impuretés peuvent être responsables de la génération ou de la recombinaison parasites de paires électron-trou dans les transistors.

- Le bruit de numérisation (ou de quantification) intervient lors de la phase de numérisation du signal, lorsqu'un nombre entier d'électrons (grandeur quantitative) est converti en une valeur numérique (grandeur qualitative). Il dépend du nombre d'électrons à saturation N_{sat} et du nombre de bits de numérisation N_{bits}. Considérant un échelon de quantification Δq, l'erreur de quantification suit une loi uniforme sur l'intervalle $\left[{}^{-\Delta q}/_{2}\,;{}^{+\Delta q}/_{2}\right]$ avec une variance égale à ${}^{\Delta q^2}/_{12}$. Sachant que le nombre de niveaux de quantification est égal à $2^{N_{bits}} - 1$, on peut en déduire le nombre d'électrons correspondant à un échelon de quantification [17]:

$$\Delta q = \frac{N_{sat}}{2^{N_{bits}} - 1} \tag{I.3}$$

  Le bruit de numérisation est donc égal à :

$$\sigma_{num} = \frac{N_{sat}}{\sqrt{12}\,2^{N_{bits}} - 1} \tag{I.4}$$

- Le bruit d'obscurité : ce bruit est lié à la génération de charges par agitation thermique. Naturellement, le semi-conducteur va émettre des porteurs des charges. Il est considéré dans la littérature que le nombre de charges émises par unité de temps par agitation thermique double tous les 7 Kelvin environ. Les impuretés et les pièges introduits lors de la fabrication du pixel vont également contribués à générer des charges supplémentaires. Le bruit d'obscurité correspond au bruit associé au courant d'obscurité, le courant parasite propre à n'importe quel composant électronique à base de semi-conducteur. La création de ce courant repose sur les mêmes mécanismes que le bruit d'obscurité. Le bruit et le courant d'obscurité sont parfois confondus dans la littérature alors que chacun représente une grandeur physique différente : le courant d'obscurité est le courant mesuré lorsque le capteur d'image n'est soumis à aucune excitation lumineuse, alors que le bruit d'obscurité correspond à la variation du courant d'obscurité [1]. De manière similaire au bruit de

photons, la génération thermique de charges suit une loi de Poisson. L'écart-type de ce processus, autrement dit le nombre de charges correspondant au bruit, est égal à la racine carré du nombre de charges générées thermiquement :

$$\sigma_{obs} = \sqrt{N_{obs}} \quad \text{(I.5)}$$

I.4.2 Les bruits spatiaux

Un bruit spatial est une perturbation du signal collecté liée aux propriétés intrinsèques du pixel, ou à un élément extérieur venant altérer ces propriétés. Par exemple, même si tous les pixels d'une matrice possèdent la même architecture, ils ne seront pas tous strictement identiques. Les paramètres géométriques peuvent légèrement varier, ainsi que le nombre d'impuretés et de défauts cristallins introduits au cours du processus de fabrication (voir paragraphe I.5.1). Voici une liste des bruits spatiaux les plus connus :

- Le bruit spatial fixe (ou Fixed Pattern Noise) : ce bruit correspond aux écarts de fonctionnement des composants actifs d'un pixel à l'autre à un temps d'intégration nul. Par exemple, un transistor dédié à la même fonction dans deux pixels distincts présentera une tension de seuil différente de quelques millivolts. Cette différence de tension de seuil dans les transistors est la principale source de bruit spatial, mais une autre source de bruit spatial s'ajoute dans le cas des imageurs CMOS. C'est la non uniformité des amplificateurs de colonne, communément appelé bruit fixe de colonne. Comme pour le bruit de recharge, un double échantillonnage corrélé permet de s'affranchir de ce bruit [7], [19].

- Non uniformité de la réponse photonique (Photo Response Non Uniformity en anglais, abrégé PRNU) : ce bruit est lié à la non uniformité de la réponse des pixels à une exposition lumineuse uniforme. Ceci est causé par la disparité de rendement quantique d'un pixel à un autre, et inclut également les variations spatiales de la capacité de convertir les photo-charges en tension au niveau du nœud de lecture sur l'ensemble de la matrice de pixels.

- **Non uniformité du courant d'obscurité (Dark Current Non Uniformity en anglais, abrégé DCNU) : cette notion définit l'écart observé sur l'intensité du courant d'obscurité sur toute la matrice de pixels. Cette disparité est causée par des concentrations variables d'impuretés ou de défauts cristallins dans le volume, introduits au cours du processus de fabrication, qui génèrent une quantité différente de charges d'un pixel à un autre. En plus de cela, lorsque le capteur d'image est placé dans un environnement agressif tel que l'espace ou un accélérateur de particules, les interactions entre cet environnement et la matrice de pixels vont avoir tendance à augmenter l'intensité moyenne du courant d'obscurité dans chaque pixel, mais également d'augmenter les disparités du courant d'obscurité entre chaque pixel. La non uniformité du courant d'obscurité sera traitée dans les chapitres III à VI de ce manuscrit.**

L'ensemble de ces bruits s'ajoutent les uns aux autres de manière quadratique [22] pour former une contribution additionnelle qui vient s'ajouter au signal photogénéré dans chaque pixel à chaque nouvelle image. Cette thèse s'intéresse au dernier point mentionné dans cet inventaire : la non uniformité du courant d'obscurité et surtout de son augmentation lié à l'environnement radiatif spatial. Ces points seront déclinés dans les chapitres suivants.

Nous avons vu que l'apparition de signaux parasites et de leurs bruits associés est en partie due à des défauts de fabrication et à la présence d'atomes étrangers qui viennent perturber le fonctionnement nominal des composants. Afin de comprendre l'origine de ces bruits, les principaux procédés de fabrication sont décrits dans la partie suivante.

I.5 Les principaux procédés de fabrication

Le silicium utilisé dans les circuits microélectroniques de notre quotidien n'est pas présent tel quel à l'état naturel. Les matériaux bruts trouvés dans la nature pour fabriquer les circuits intégrés modernes se présentent sous la forme de polycristaux [23]. Par opposition aux monocristaux, qui constituent un arrangement quasiment parfait des atomes selon une seule direction, les polycristaux sont un assemblage de plusieurs monocristaux orientés selon des directions différentes. Les polycristaux sont à mi-chemin entre une phase amorphe (complètement désordonnée) et une phase cristalline (hautement ordonnée) de la matière. Une représentation schématique de ces trois états est présentée sur la figure ci-dessous (Figure I.9) :

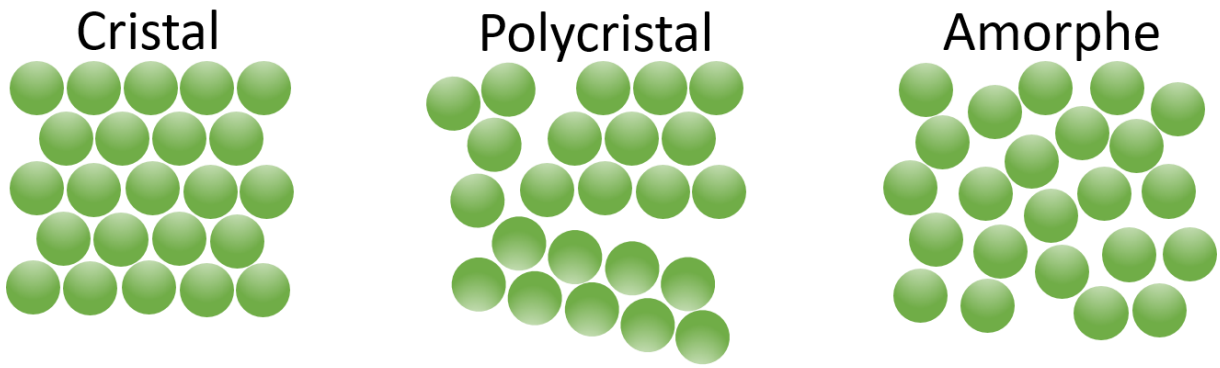


Figure I.9 : Représentation schématique de la disposition des atomes dans la matière cristalline. Dans l'état cristallin (à gauche), tous les atomes sont parfaitement ordonnés selon une seule et même direction. Dans l'état polycristallin (au centre), la matière est similaire à une mosaïque de petites zones cristallines. Chaque région cristalline est orientée selon une direction propre. En revanche dans l'état amorphe (à droite), les atomes sont complètement désordonnés et ne sont orientés selon aucune direction particulière.

Seulement, les caractéristiques électro-optiques d'un matériau sont liées à son niveau de cristallinité. C'est dans ce but qu'ont été développées des techniques de fabrication de monocristaux. Même si ces techniques ont beaucoup évolué depuis leur création, il n'est pas encore possible à l'heure actuelle d'obtenir un monocristal complétement pur, c'est-à-dire sans la présence d'atomes étrangers aux atomes du réseau cristallin. Nous verrons dans les paragraphes suivants les principaux procédés de fabrication de monocristaux de silicium, les principales techniques de dopage puis dans un dernier temps les impuretés introduites, volontairement ou non, dans le silicium.

I.5.1 Principales méthodes de fabrication d'un monocristal de silicium

Le silicium monocristallin est principalement créé à partir d'un germe cristallin, c'est-à-dire par croissance orientée [23]. Il existe plusieurs procédés de croissance qui dominent la fabrication du silicium monocristallin.

I.5.1.1 Procédé de Czochralski

Le procédé de Czochralski, communément appelé méthode « Cz », a été inventé par le scientifique polonais Jan Czochralski en 1915, mais le procédé tel qu'il est utilisé aujourd'hui provient de Teal et Little en 1950 [24]. Cette méthode représente 80% de la production mondiale de silicium monocristallin [25]. Il est courant de nommé le matériau monocristallin créé en fonction du procédé de fabrication utilisé. Par exemple du silicium produit à partir du procédé de Czochralski est appelé « silicium Cz » ou « Si-Cz ». Une illustration du dispositif de fabrication utilisant la méthode de Czochralski est présentée en Figure I.10.

Un monocristal de silicium Cz est conçu selon 5 étapes [26]:

- Dans un premier temps le silicium polycristallin (à l'état « brut ») est fondu dans un four d'étirage à environ 1425 - 1450°C. Cette température n'est pas anodine puisqu'elle est située

juste au-dessus du point de fusion du silicium. Cette opération est réalisée dans une atmosphère inerte (contenant de l'argon ou de l'azote par exemple) pour minimiser l'oxydation de l'échantillon, dans une chambre inerte (le four est composé de silice).

- Un germe monocristallin est nécessaire pour produire une grande quantité de matière monocristalline en fondant de la matière polycristalline. Dans ce but un germe monocristallin (avec une orientation cristalline connue), situé au bout d'une tige, est plongé dans le silicium fondu. Des atomes dopants (ou impuretés dopantes) tels que le bore ou le phosphore sont ajoutés au mélange de manière continue pour doper le silicium au cours de sa cristallisation autour du germe. C'est grâce à cette opération que l'on produit un substrat de type N ou P.

- Le germe monocristallin est ensuite tiré lentement vers le haut (de l'ordre de 0,4 à 3 millimètres par minute).

- Dans le même temps, le creuset et la tige où est fixé le germe décrivent chacun un mouvement de rotation lent en sens contraire.

- Le produit final est un barreau ou lingot cylindrique de silicium monocristallin, ayant la même orientation cristalline que le germe initial. On dit ainsi que le lingot est conçu par croissance orientée. Le lingot est ensuite découpé en fine lame pour former plusieurs échantillons de substrat, l'élément de base sur lequel sont conçus tous les circuits électroniques modernes.

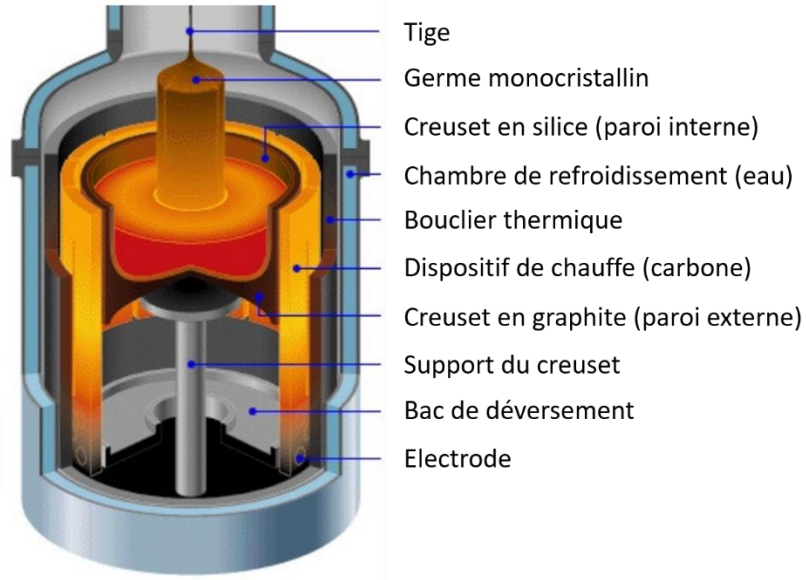


Figure I.10 : Coupe d'un dispositif de fabrication de silicium monocristallin utilisant la méthode de Czochralski. Crédits : Stefano Meroli, CERN

Un contrôle précis en temps réel du gradient en température, de la vitesse de rotation du creuset et de la tige, ainsi que de la vitesse d'étirement du lingot permet de maximiser la longueur et la qualité (pureté, faible taux de dislocations) du lingot du silicium monocristallin produit. Un lingot de silicium issu de ce procédé peut peser entre 60 et 100 kg, pour environ 2 mètres de longueur et plus de 300 mm de diamètre [25]. L'amélioration récente des techniques industrielles permet de produire des lingots dépassant les 450 mm de diamètre. L'intérêt de produire des lingots de silicium monocristallin de plus en plus gros est d'augmenter l'efficacité de production. En effet, un plus grand nombre de circuits électroniques peuvent être réalisés sur le même substrat tout en minimisant les pertes de matière première. Les impuretés qui peuvent être introduites au cours du processus de fabrication seront explicitées dans le paragraphe I.5.4.

Une dernière étape de fabrication facultative consiste à « purifier » le lingot des impuretés. Cette technique s'appelle la méthode de la zone fondue. Elle consiste à répéter une opération de chauffage intense, qui permet de faire migrer les impuretés à chaque extrémité du lingot, en fonction de leur densité par rapport au silicium. Néanmoins, cette opération à un coût : elle nécessite la consommation d'une grande quantité de silicium fondu pour obtenir un silicium quasiment pur. Cela réduit considérablement la quantité de matière disponible à l'état final. Ce processus de purification n'est destiné qu'aux applications requérant des hautes performances comme pour l'électronique de pointe ou les cellules photovoltaïques.

I.5.1.2 Procédé de la zone fondue flottante

Il existe une méthode alternative au procédé de Czochralski, permettant d'obtenir un monocristal de silicium avec taux d'impuretés plus faible [27], [28], inventée par le scientifique Theuerer en 1962, appelée la méthode de la zone fondue flottante (float zone method en anglais, abrégé Fz) [24]. Les monocristaux de silicium produits avec cette méthode sont appelés « Si-Fz ». Ce procédé repose sur un principe similaire à la méthode de zone fondue présentée à la fin du paragraphe précédent. Il se déroule sous vide ou sous atmosphère inerte. Le principe de la méthode est simple, mais sa réalisation est complexe [23] (voir Figure I.11) :

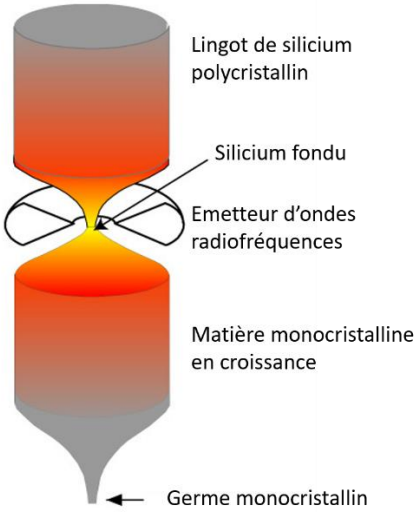


Figure I.11 : Représentation schématique de la méthode de la zone fondue flottante. L'émetteur d'ondes radiofréquences, de forme annulaire, entoure le silicium pour le faire fondre par induction. Crédits : PVEducation.org

- Du silicium polycristallin et un germe monocristallin sont placés face à face selon un axe vertical sans être en contact.

- Un dispositif de forme annulaire émettant des ondes radio va chauffer simultanément par induction la matière polycristalline et monocristalline. Les deux éléments vont ainsi commencer à fondre partiellement.

- Le germe monocristallin est mis en contact avec la matière fondue provenant du polycristal, formant un « col » de matière. Au cours du processus de fonte, les deux éléments sont mis en mouvement circulaire en sens opposé l'un par rapport à l'autre. Il est important que le flot de matière fondue qui se déverse lentement sur le germe soit stabilisé, afin d'éviter que les contraintes mécaniques (tensions de surface de la matière fondue) ne provoquent une dislocation du col de matière fondue. Une fois les contraintes stabilisées, il est possible d'accélérer la cadence de fonte du matériau brut pour atteindre une croissance à l'équilibre.

- La matière fondue provenant du silicium polycristallin se déverse lentement sur le germe monocristallin et cristallise selon la même orientation que le germe monocristallin.

- A l'état final, tout comme pour la méthode de Czochralski, un lingot de silicium monocristallin est obtenu.

Le grand point fort de cette méthode est de produire un matériau monocristallin avec un faible taux d'impuretés (de l'ordre de 100 à 1000 fois inférieur à la méthode de Czochralski) [29]. En effet la plupart des impuretés ayant une densité plus faible que celle du silicium, celles-ci vont rester dans la zone fondue et ne vont pas se mélanger avec les atomes de silicium qui vont se déposer sur le germe et cristalliser. En plus de cela, contrairement au procédé de Czochralski, le mélange fondu n'est pas en contact avec une autre surface, comme un creuset par exemple. Ceci permet de limiter la contamination du mélange fondu. Cependant, la taille des lingots de silicium produits est inférieure à celle des lingots de Si-Cz, à cause de la difficulté à maintenir un régime stable de flot de matière fondue. Aussi, des atomes d'azote sont volontairement ajoutés afin de renforcer les propriétés mécaniques du silicium monocristallin. Ce renforcement est surtout utile lors de la phase de fabrication de substrat à partir de silicium Fz. Le dopage du silicium Fz est principalement réalisé au cours du processus de croissance, au moyen de gaz contenant les atomes dopants (bore ou phosphore) tels que la phosphine (PH_3) ou le diborane (B_2H_6). D'autres techniques de dopage peuvent être utilisées et seront décrites dans la section suivante.

La difficulté, le coût et la durée du procédé Fz rendent cette technique exclusivement dédiée à la production de composants électroniques de haute performance, comme les détecteurs ou les cellules solaires, et donc moins utilisée pour des applications commerciales [30].

I.5.1.3 Les autres techniques de croissance cristalline

Le procédé de Czochralski et la méthode de zone fondue flottante sont des techniques de croissance dites en phase solide. Cependant il existe d'autres techniques faisant intervenir les autres états de la matière. Ces techniques, que l'on qualifie d'épitaxiales, sont utilisées pour faire croître des monocristaux de nombreuses espèces, et le silicium en fait partie. Ce paragraphe est dédié à la description des techniques d'épitaxie.

Epitaxie en phase vapeur

La croissance d'un monocristal par épitaxie en phase vapeur consiste à déposer des couches minces de matière par transport gazeux [31]. Cette technique est plutôt ancienne, puisque des techniques de ce genre étaient utilisées pour raffiner les métaux dans les années 1800 ainsi que pour produire les filaments des lampes à incandescence au début des années 1900. Elle consiste à décomposer les éléments d'un gaz grâce à une source d'énergie telle que la chaleur, les rayons UV ou encore un plasma. Les atomes qui se dissocient du gaz vont entrer en contact avec l'échantillon et vont se condenser à sa surface [31]. La difficulté de cette technique consiste à faire en sorte que le nombre d'atomes incidents venant se coller à la surface de l'échantillon par unité de temps ne soit pas supérieur à la vitesse de diffusion des réactifs sur l'échantillon [32]. En d'autres termes, il faut que les atomes déposés aient le temps de s'incorporer au cristal pendant que d'autres atomes arrivent près de la surface. Il faut aussi que le germe soit le plus pur possible sinon, la croissance pourrait mal se dérouler. De par son ancienneté, cette technique est très bien maîtrisée, mais souffre de la lenteur de croissance du cristal (de l'ordre de $0{,}1$ à $1\ \mu m$ par heure) comparé aux techniques décrites précédemment. Elle permet néanmoins d'obtenir des taux d'impuretés inférieurs à ses concurrentes.

Epitaxie en phase solide

Ce procédé consiste à déposer un film de matière amorphe sur un germe monocristallin. De l'énergie thermique est ensuite apportée au système pour que le film amorphe se cristallise selon l'orientation du germe sous-jacent [33]. Cette technique ne nécessite pas de monter l'échantillon à très haute température et ne nécessite pas une source d'énergie importante. Cependant, cette technique introduit un grand nombre d'impuretés hydrogène, provenant de la phase de déposition du film amorphe.

Epitaxie par jet moléculaire

Cette méthode de croissance épitaxiale nécessite un vide extrême pour limiter la contamination (10^{-8} à 10^{-12} Torr) [32]. Les conditions extrêmes de vide et le taux de croissance très lent (une monocouche atomique par heure, soit quelques nanomètres par heure) conduisent à obtenir un monocristal d'une pureté non atteignable par toutes les autres techniques décrites précédemment. L'épitaxie par jet moléculaire consiste à sublimer la matière (passage de l'état solide à l'état gazeux) pour que les atomes arrachés à la source de matière soient projetés directement vers la surface de l'échantillon [23]. Les atomes incidents vont ensuite s'incorporer au réseau cristallin. Plusieurs sources de matière sont utilisées pour contrôler avec une grande précision la croissance du cristal en tout point de l'échantillon. Une technique de visualisation dédiée permet à un ordinateur de monitorer en temps réel la croissance du cristal, pour réguler l'afflux d'atomes provenant de chaque source.

I.5.2 Principales techniques de dopage du silicium

Les industriels ont développé au cours du temps différentes techniques de dopage, chacune présentant ses avantages et ses inconvénients. Les différentes techniques sont utilisées en fonction de l'espèce dopante choisie et du matériau cible à doper, du moment où le dopage intervient dans la chaîne de fabrication, des ressources disponibles, du choix de la technologie et du cahier des charges de l'industriel. Les principales techniques de dopage sont présentées dans les paragraphes suivants.

I.5.2.1 Diffusion thermique

Le dopage par diffusion thermique est la technique de dopage la plus ancienne [34]. Elle consiste à mettre en contact le substrat monocristallin avec une espèce dopante en phase solide, liquide ou gazeuse en fonction du moment choisi pour doper le semi-conducteur [10]. Par exemple, le dopage par diffusion thermique en phase solide se déroule post-croissance du matériau cristallin, produisant un profil de dopage décroissant avec la profondeur de diffusion ; alors que le dopage en phase gazeuse se déroule pendant la croissance du matériau et permet d'obtenir un dopage uniforme. Le dopage par diffusion thermique se déroule généralement à haute température (entre 850°C et 1100°C), afin de déclencher le processus de diffusion. Cette technique est généralement utilisée pour effectuer des dopages profonds [11].

I.5.2.2 Implantation ionique

Le dopage par implantation ionique consiste à se servir d'ions accélérés par un champ électrique comme projectiles pour les faire rentrer en collision avec la surface du matériau cible. En fonction de l'énergie cinétique des ions, ils vont pénétrer plus ou moins profondément dans le matériau cible [35]. Il est possible de modifier le profil de dopage en jouant sur la dose et l'énergie des ions. L'avantage de cette méthode est sa contrôlabilité et grande reproductibilité. La technique d'implantation ionique est généralement utilisée pour réaliser du dopage de surface [11], comme des implants N+ ou P+ par exemple. En revanche, les collisions violentes entre les atomes dopants ionisés et le matériau cible entraînent la création de défauts cristallins dus aux déplacements des atomes de l'échantillon à doper [34]. Ces collisions créent ce que l'on appelle des paires lacune-interstitiel. Ce concept sera explicité dans le chapitre suivant. Ces défauts cristallins peuvent évoluer dans le temps,

et si leur nombre est trop grand, altérer les propriétés électriques du matériau cible. Les défauts cristallins introduits lors de la fabrication d'un composant électronique sont en partie responsable de signaux parasites, les bruits, que nous avons évoqués au cours dans la section I.4.

De même au cours du bombardement, certains atomes dopants peuvent ne pas réussir à s'insérer dans une position substitutionnelle (à la place d'un site cristallin d'un atome de silicium), et vont à la place s'insérer dans un site interstitiel. Dans cette position, les atomes de l'espèce dopante sélectionnée ne remplissent pas leur rôle de dopant et seront électriquement inactifs. Pour minimiser le plus possible l'impact de ces dommages, plusieurs recuits thermiques sont nécessaires afin que le matériau recouvre sa structure cristalline normale, et que les atomes dopants trouvent un site cristallin où s'insérer.

I.5.2.3 Transmutation nucléaire

La méthode de dopage par transmutation nucléaire est une technique spécialisée pour l'électronique de haute performance. La particularité de cette méthode est de ne pas utiliser d'espèces dopantes étrangères, mais d'utiliser les propriétés de désintégration du noyau de l'isotope de silicium Si^{30} [36]. En effet, en bombardant le silicium avec des neutrons, ces isotopes du silicium (environ 3% du silicium) vont capturer les neutrons et se transformer en Si^{31} [23]. Ce noyau n'étant pas stable, il va se désintégrer par radioactivité β- selon la réaction nucléaire suivante : $Si^{31} \rightarrow P^{31} + \beta -$. Le neutron capturé se transforme en proton. Par ce biais, la nature des isotopes de silicium va changer pour devenir des atomes dopants : c'est le mécanisme de transmutation. De cette manière, des atomes dopants de phosphore sont introduits avec une grande précision et une forte homogénéité dans l'échantillon exposé aux neutrons.

I.5.2.4 Technique laser

Le dopage par technique laser est une technique récente en voie de développement [12]. Elle consiste à envoyer de manière cyclique une impulsion laser (ayant une longueur d'onde de fonctionnement dans le domaine UV) pendant un temps très court (une dizaine de nanosecondes) pour créer un cycle de fusion / solidification sur une très fine épaisseur de silicium (de l'ordre d'une dizaine de nanomètres) [37]. Ainsi l'espèce dopante amenée en surface du silicium par phase gazeuse, avant ou pendant le cycle d'impulsion laser, sera incorporée cycle après cycle dans la zone fondue par le laser. L'impulsion laser permet également de réaliser un recuit de la matière. La diffusion des dopants se déroule selon deux phases distinctes :

- La phase de fusion : les atomes dopants peuvent diffuser rapidement dans le silicium fondu. Leur diffusion est limitée à la zone où le silicium a fondu. L'extension de cette zone fondue est régulée par les impulsions laser.

- La phase de solidification : comparé à la phase de fusion, le mécanisme de diffusion des dopants est négligeable dans la phase solide sur l'échelle de temps d'un cycle. Durant cette phase, le silicium va se cristalliser par épitaxie selon l'orientation du silicium sous-jacent qui lui est resté solide.

Cette technique présente de nombreux avantages, comme la possibilité de créer des profils abrupts de dopage dans de faibles volumes (nécessaire pour créer des transistors de plus en plus petit), ou bien d'insérer des concentrations de dopants plus élevées que celles atteintes par les techniques dites classiques, comme la diffusion thermique ou l'implantation ionique. A terme cette technique est amenée à remplacer les méthodes classiques de dopage.

I.5.2.5 Dopage par « pilule »

Le dopage par pilule ou pill doping en anglais, est une méthode simple qui consiste à insérer directement une quantité de matière dopante contenue dans une pastille ou une pilule dans le

silicium fondu [23]. En laissant la pilule dopante fondre et diffuser au sein du silicium liquide, la concentration de dopants va avoir tendance à s'homogénéiser dans la zone fondue, et obtenir un profil de dopage uniforme dans le silicium monocristallin qui en résultera [27]. Il faut cependant que le contrôle de la diffusion de l'espèce dopante soit parfaitement maîtrisé en fonction de la température, au risque d'obtenir de fortes inhomogénéités de dopants dans le silicium. Cette technique est notamment utilisée au cours de la méthode de la zone fondue flottante (voir paragraphe I.5.1.2) [28].

Les industriels et les scientifiques ont développé de nombreuses autres méthodes de dopage permettant de répondre à leurs besoins spécifiques. Ces méthodes ne seront pas présentées dans ce manuscrit mais peuvent être cependant nommées. On peut notamment citer la méthode de dopage par plasma (plasma doping) [38], qui au même titre que la technique de dopage laser, semble prometteuse ; ainsi que le dopage dit « élémentaire » ou core doping en anglais [23].

Nous avons constaté au travers de la description des techniques de fabrication et de dopage que le silicium pouvait être contaminé par des impuretés cristallines. Nous verrons également que les étapes complexes de traitement permettant d'obtenir un composant CMOS est aussi une source d'impuretés. Ces impuretés peuvent avoir des conséquences sur les performances électriques des imageurs. Leur rôle dans la dégradation des composants sera détaillé dans le chapitre II de ce manuscrit. Un inventaire de ces impuretés est proposé au paragraphe I.5.4 de ce chapitre.

I.5.3 Description de la fabrication d'un composant électronique de type CMOS

Une fois le substrat créé, constituant le matériau de base d'un composant électronique moderne, il sera poli pour rendre la surface la plus homogène possible, puis découpé en fines lames pour entamer le processus de fabrication du composant souhaité. La création d'un composant électronique requiert un grand nombre d'étapes intermédiaires avant d'aboutir au produit final. Une description simple de la fabrication d'un transistor CMOS est proposée dans ce paragraphe. Prenant le cas d'un substrat de type P, les étapes de fabrication sont les suivantes [39]–[43]:

- Déposition d'une couche d'oxydation et de photorésine : la déposition de ces couches vont servir à focaliser une zone précise du substrat qui contiendra l'implant dopé N+. La photorésine est un film mince de polymère dont les propriétés changent avec une exposition lumineuse.

- Application d'un masque et exposition aux UV : un masque, que l'on pourrait comparer à un pochoir, est placé au-dessus de la zone qui va contenir l'implant dopé N+. L'ensemble est ensuite exposé aux rayons UV. Le film photosensible comporte maintenant deux régions distinctes. La première est celle qui n'a pas subi de rayonnement UV, située sous le masque et le reste qui a été exposé aux UV.

- Traitements chimiques des différentes surfaces : au moyen de différents mélanges d'acides, la couche non exposée aux UV est retirée, ainsi que la couche d'oxyde située en dessous. Enfin, le film photosensible est complètement retiré. Cela a permis de créer une ouverture dans l'oxyde sans contaminer le substrat. Ce type de procédé est appelé gravure chimique (etching en anglais). Une illustration de ces différents procédés est présentée ci-dessous en Figure I.12 (la matière qui a été enlevée est présentée en trait pointillé) :

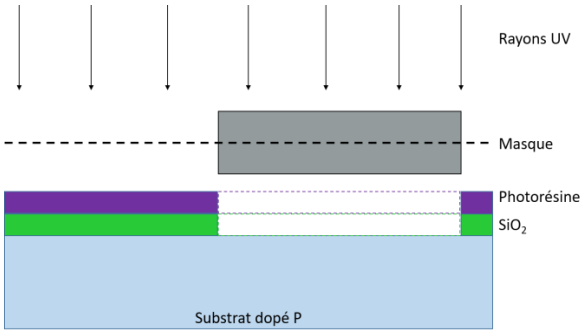


Figure I.12 : Représentation schématique des premières étapes de la fabrication d'un transistor CMOS. Une fois l'exposition aux UV terminée, le masque est retiré. Au moyen de divers procédés chimiques, une ouverture est créée pour préparer la diffusion de l'implant dopé N.

- L'implant de type N est ensuite créé, souvent par diffusion thermique ou implantation ionique.

- Déposition d'une fine couche d'oxyde et de polysilicium par épitaxie en phase vapeur : ces couches vont servir de base à la création des grilles (gates en anglais) qui vont contrôler le transistor lors de sa mise en fonctionnement. Des procédés chimiques similaires aux étapes précédentes sont utilisés pour créer les grilles à des zones spécifiques de l'échantillon. L'avancement de la fabrication du transistor CMOS est illustré sur la Figure I.13 (la matière enlevée au cours des processus chimiques est représentée en trait pointillé) :

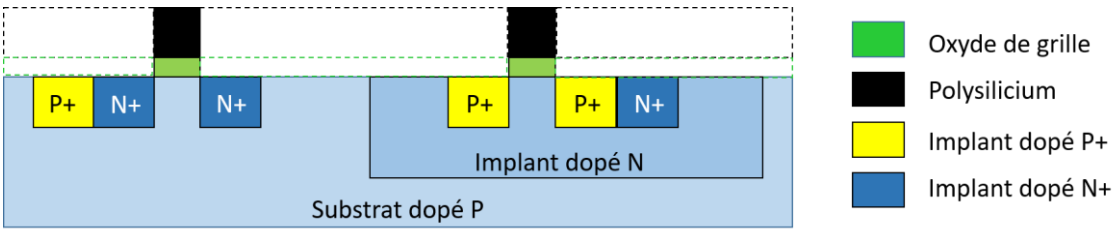


Figure I.13 : Les couches d'oxyde de grille et de polysilicium sont utilisées pour créer les futures grilles, éléments contrôlant le transistor. Les parties inutiles sont ensuite retirées. Des masques sont utilisés pour cibler les zones qui vont recevoir des implants N+ et P+.

- Déposition d'une nouvelle couche d'oxyde protectrice : une nouvelle couche d'oxyde est déposée sur toute la surface de l'échantillon pour protéger les différentes régions qui ne doivent pas être exposées aux prochaines étapes d'implantation de dopants.

- Déposition d'implants de type N+ et P+ par diffusion ou implantation ionique. Des trous ont été réalisés au préalable dans l'oxyde pour permettre ces implantations localisées.

- Déposition d'une couche d'oxyde protectrice et métallisation : une dernière couche d'oxyde est déposée pour protéger les zones qui n'ont pas à être en contact électrique. Une couche de métal (principalement de l'aluminium) vient recouvrir tout l'échantillon. Les zones qui n'ont pas été protégées par l'oxyde sont mises en contact avec le métal. Les dispositions des différents implants et couches sont reportées en Figure I.14 :

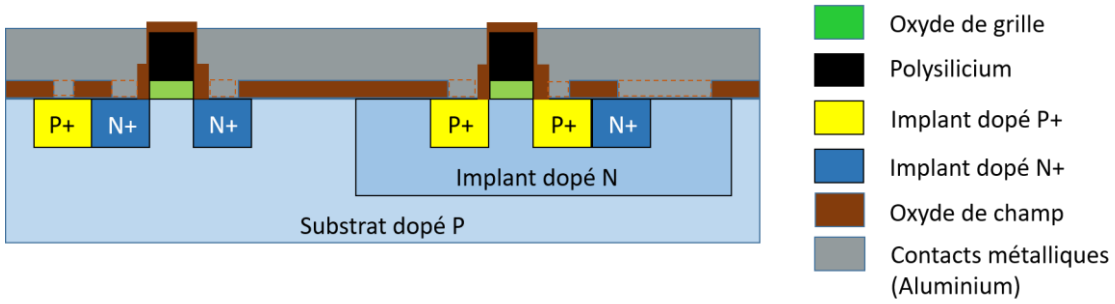


Figure I.14 : Représentation schématique d'un transistor proche de son état final. Une couche importante d'oxyde de champ est déposée pour isoler électriquement les différents éléments du transistor. Au moyen de masques et de réactions chimiques, certaines parties de l'oxyde de champ sont exposées pour être ensuite métallisées. Les contacts électriques sont ainsi créés.

- Formation des terminaux et contacts électriques : l'excès de métal est retiré pour éviter les court-circuits et isoler les différents éléments du transistor. Les différents terminaux sont ainsi créés puis assigner à leur fonction. Le composant est prêt à l'emploi.

La fabrication d'un composant de type CMOS repose sur la répétition de nombreux procédés physico-chimiques qui permettent de protéger ou graver certaines zones spécifiques, implanter des atomes de manière localisée pour créer différentes jonctions PN et créer des contacts électriques en chaque élément du composant. En fonction du composant et des technologies souhaités, les différentes méthodes et techniques présentées en section I.5.1 et I.5.2 sont utilisées. Les pixels d'un imageur sont également créés avec des procédés similaires puisque leur conception se rapproche à 90 % de celle d'une puce informatique.

Nous avons vu au cours du paragraphe I.5.1 que quel que soit la technique de fabrication utilisée, une certaine concentration d'impuretés est introduite dans le silicium monocristallin. Le paragraphe suivant propose un inventaire des différentes espèces d'impuretés que l'on peut rencontrer dans le silicium cristallin, et quels peuvent être leurs effets sur les composants électroniques.

I.5.4 Les impuretés cristallines

Au cours du processus de fabrication, des espèces d'atomes non désirés peuvent s'introduire dans le mélange de silicium fondu. Ces atomes étrangers et non désirés sont qualifiés d'impuretés ou contaminants. Par exemple, dans le cas du procédé de Czochralski, des atomes d'oxygène peuvent être libérés de la paroi du creuset qui se dissout avec la chaleur et vont ainsi se cristalliser avec le silicium [24]. De nombreuses espèces d'impuretés autres que l'oxygène peuvent être introduites par accident lors de la fabrication du silicium [44]–[46]. En fonction de leurs propriétés de diffusion, de solubilité et électriques, ces espèces vont pouvoir diffuser dans des zones différentes du composant. Une espèce présentant une diffusion lente peut rester la plupart du temps en surface, alors qu'une espèce avec un fort coefficient de diffusion peut migrer jusque dans la zone sensible d'un pixel par exemple [45], [47]. De même, une impureté peut être électriquement active ou non en fonction de sa position dans le réseau cristallin. Souvent une impureté (autre qu'un atome dopant) dans une position substitutionnelle sera électriquement inactive, c'est-à-dire qu'elle ne va pas générer de porteurs de charges supplémentaires aux photocharges collectées.

Un inventaire des impuretés rencontrées dans le silicium, avec une description quantitative de leur capacité à diffuser et à générer des porteurs de charges à température ambiante, ainsi que leur provenance et leurs possibles localisations dans un composant sont condensées dans le Tableau I.1 [45]–[47]. L'évaluation quantitative de la génération de charges est établie à partir des niveaux d'énergie introduit par le défaut dans la bande interdite du semi-conducteur et par sa section efficace de capture de porteurs majoritaires [44]–[47]. Le critère de génération de charges

est étudié car les chapitres suivants sont consacrés à l'étude de la dégradation des performances d'un imageur liée à la génération de charges électriques intempestives. Les données décrites dans le Tableau I.1 sont fournies à titre indicatif. Ces données peuvent varier suivant les techniques de fabrication utilisées, les outils et machines utilisés, les conditions dans lesquels ils sont utilisés et le composant étudié.

De nombreuses autres espèces d'impuretés peuvent contaminer la surface ou le volume d'un composant électronique, principalement de la famille des métaux, lourds ou légers, en fonction des équipements et techniques utilisés. Les impuretés d'oxygène et de carbone font office d'exception à cette liste d'impuretés. Même si ces dernières sont électriquement inactives au moment où le composant sort de la ligne de production, son exposition à un rayonnement énergétique peut amener à l'introduction de défauts cristallins qui vont interagir avec ces impuretés et les rendre fortement électriquement actives.

En revanche les impuretés métalliques ont un effet immédiat sur le fonctionnement du composant. Par exemple si ces dernières forment un trop grand nombre de précipités à l'interface semi-conducteur/oxyde, elles peuvent former un « pont » entre la partie isolante et semi-conductrice du composant. Cela a pour effet de diminuer la valeur de la tension de claquage, détériorant le composant au passage et rompant les propriétés isolantes de l'oxyde. Les impuretés métalliques sont également connues pour induire une augmentation du courant de fuite des composants [45], [48], [49]. Elles peuvent également devenir des centres de génération de charges électriques parasites ou à l'inverse des centres de recombinaison capturant ou annihilant des porteurs de charges.

Espèce	***Source***	***Localisation***	***Forme(s)***	***Concentration volumique*** $(atomes.cm^{-3})$	***Génération de charges***
Fer (Fe)	Contacts métalliques, polissage ou usinage du substrat	Interfaces (surfaces) et volume	Précipités avec Si, interstitiel, association avec impuretés et dopants	10^{12} - 10^{14}	Faible à modérée
Nickel (Ni)	Contacts métalliques, polissage ou usinage du substrat	Interfaces (surfaces) et volume	Précipités avec Si et impuretés, interstitiel et substitutionnelle	$<10^{14}$	Faible
Cuivre (Cu)	Nettoyage, polissage, usinage du substrat, métallisation	Interfaces (surfaces) et volume	Substitutionnel, association avec impuretés et dopants	$<10^{14}$	Faible
Molybdène (Mo)	Valves contrôlant l'arrivée de gaz dopants	Interfaces (surfaces) et volume	Interstitiel	10^{12}-10^{13}	Modérée
Platine (Pt)	Contact avec la source d'atomes dopants, contamination accidentelle par nettoyage d'équipements	Volume	Substitutionnel, complexe avec de l'hydrogène, paire interstitiel-substitutionnel	10^{12} -10^{13}	Faible

Or (Au)	Usure ou mauvais nettoyage des équipements, contact métalliques	Volume	Substitutionnel, paire interstitiel-substitutionnel, complexes avec impureté métalliques	10^{12}	Elevée
Oxygène (O)	Dissolution du creuset, atmosphère, contamination du polycristal source	Volume	Interstitiel ou substitutionnel	10^{15} - 10^{18}	Faible ou inactif
Carbone (C)	Evaporation de certains éléments composés de graphite, contamination du polycristal source	Volume	Interstitiel ou substitutionnel	10^{15} - 10^{16}	Faible ou inactif

Tableau I.1 : Inventaire des propriétés des principales impuretés rencontrées au cours de la fabrication d'un composant de type CMOS.

Aussi, la formation de précipités métalliques peut exercer une pression mécanique sur l'interface semi-conducteur/oxyde et la déformer, venant également amoindrir les performances du composant. Les impuretés métalliques sont parfois ajoutées volontairement au cours du processus de fabrication du composant, dans le but de modifier certaines propriétés électriques du composant, mais les problèmes engendrés par l'introduction de ces impuretés mènent souvent à discussion dans la littérature.

L'atome d'hydrogène, qui peut être introduit lors de la fabrication des technologies CMOS, montre à l'inverse des propriétés de passivation des défauts cristallins, c'est-à-dire de les rendre inactifs [50]–[52].

Même si la production de masse des composants électroniques a mené à une bonne maîtrise des différents procédés de fabrication et de dopage et à leur reproductibilité, tous les composants créés sur la même chaîne de production ne seront pas identiques. Aussi, chaque technique de fabrication ou de dopage, faisant appel à des procédés pouvant endommager ou altérer la matière (découpage, bombardement d'ions, recuit à très haute température, traitement à l'acide…), peut amener à l'introduction d'impuretés et de défauts cristallins en quantité différente pour chaque composant. Enfin, la miniaturisation des composants amènent au développement de nouvelles méthodes de dopage et de fabrication, apportant avec elles de nouvelles contraintes.

Ainsi chaque pixel d'un imageur, qui pourtant ont la même fonction, ne vont pas répondre de manière identique à une excitation lumineuse ou électrique. Cette disparité est en partie responsable de la création de signaux parasites et des bruits associés que nous avons décrits au cours de la section I.4.

I.6 Conclusions du chapitre

Au cours de ce chapitre les imageurs modernes ont été présentés. Grâce aux évolutions technologiques et aux nombreuses fonctionnalités qu'elles apportent, les imageurs modernes ont trouvé une place dans de nombreux domaines divers et variés, tant pour des applications commerciales que scientifiques. Le principe de fonctionnement des imageurs CMOS a été dépeint selon 4 étapes importantes de la création d'une image, allant de la génération des photocharges, à leur collection, leur transfert puis leur conversion en un signal numérique. Quelques précisions ont également été apportées sur les différences entre les CMOS et leurs prédécesseurs, les capteurs CCD.

Nous avons vu que plusieurs mécanismes physiques peuvent entraver le bon fonctionnement du capteur d'image. Des atomes étrangers, qualifiés d'impuretés ou de contaminants, sont souvent impliqués dans l'apparition de signaux parasites. Afin de comprendre l'apparition de ces phénomènes parasites, les principales techniques de fabrication d'un composant électronique moderne ont été étudiées. De cette manière, nous avons pu voir pas à pas, quelles techniques sont utilisées pour créer un composant. Par exemple, des techniques comme la méthode de Czochralski, plutôt destinée à des applications commerciales, permettent de produire de grands volumes de substrat de silicium, mais avec une concentration d'impuretés parfois non-négligeables. A l'inverse, des techniques plus complexes comme l'épitaxie par jet moléculaire, permettent de créer des monocouches de silicium avec un taux d'impuretés extrêmement faible. Ce type de technique est plutôt orienté pour des applications scientifiques. Chaque technique possède ses avantages et ses inconvénients. Les différentes techniques de dopage permettant de créer des jonctions PN, élément à la base de nombreux dispositifs électroniques modernes, ont été présentées. Certaines d'entre elles sont dédiées à l'introduction des atomes dopants soit en surface, soit en profondeur, ou uniformément dans le volume. Un aperçu du long processus de fabrication d'un composant électronique comparable à un transistor est ensuite proposé. Le but de cette description est de montrer par quels moyens le matériau de base peut être transformé pour devenir un composant électronique complexe.

De la création du substrat jusqu'à sa transformation en composant opérationnel, en passant par son dopage, chaque étape est potentiellement une source d'impuretés. L'accumulation de tous ces procédés engendrent l'introduction de différentes espèces d'impuretés dans des zones différentes du composant avec une densité différente. Chaque impureté possédant ses propres caractéristiques physiques, elles vont altérer de manière variable le fonctionnement nominal du composant. Un inventaire des impuretés les plus fréquemment rencontrées dans la littérature est proposé, accompagnée d'une évaluation quantitative sur leur provenance, leur localisation probable dans le composant et de leur capacité à produire des charges électriques additionnelles parasites.

Dans un dernier temps, les principales sources de signaux parasites pouvant affecter le signal enregistré par un pixel et leurs fluctuations associées, appelés bruits, ont été étudiées. Ces bruits peuvent d'une part varier dans le temps, ils sont qualifiés de bruits temporels. D'autre part, si le bruit varie d'un pixel à l'autre, il est alors qualifié de bruit spatial. Les impuretés ont évidemment impliqués dans l'apparition des bruits décrits, mais elles ne constituent pas l'unique source de bruits.

Suivant les applications auxquels sont destinés les capteurs d'image, certains d'entre eux peuvent être exposés à un environnement agressif. C'est le cas des imageurs embarqués dans les satellites, qui sont régulièrement exposés à un fort rayonnement énergétique. Les interactions entre ce rayonnement énergétique et les capteurs d'image vont détériorer les capteurs d'image en dégradant leurs performances. Cette perte de performance est notamment liée à l'augmentation de certains bruits, et particulièrement le courant d'obscurité dans le cas des imageurs. L'environnement spatial radiatif ainsi que les différentes interactions entre la matière et le rayonnement, et leurs conséquences sur les imageurs sont étudiés au cours du chapitre II.

Bibliographie du chapitre

[1] I. Ribet-Mohamed, « Les détecteurs », présenté à Stage Labex FOCUS, Observatoire Haute-Provence, juin 2018.

[2] A. Chovet et P. Masson, « Cours de Physique des Semi-conducteurs ». Ecole Polytechnique Universitare de Marseille, 2005 2004, Consulté le: avr. 23, 2018. [En ligne]. Disponible sur: http://clasesadomicilio.wifeo.com/documents/Cours-de-physique-des-SC---Poly---BAC-3.pdf.

[3] « Silicium - Société Chimique de France ». http://www.societechimiquedefrance.fr/Silicium.html (consulté le avr. 30, 2020).

[4] L. Gautron, *Physique: tout-en-un pour la licence*. Paris: Dunod, 2010.

[5] M. Bigas, E. Cabruja, J. Forest, et J. Salvi, « Review of CMOS image sensors », *Microelectron. J.*, vol. 37, n° 5, p. 433-451, mai 2006, doi: 10.1016/j.mejo.2005.07.002.

[6] E. R. Fossum, « CMOS image sensors: Electronic camera-on-a-chip », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 44, n° 10, p. 1689–1698, 1997.

[7] E. Martin, « Etude physique de la dégradation et modèles pour l'assurance durcissement des capteurs d'image en environnement spatial », PhD Thesis, Toulouse, ISAE, 2012.

[8] A. J. P. Theuwissen, « CMOS image sensors: State-of-the-art », *Solid-State Electron.*, vol. 52, n° 9, p. 1401-1406, sept. 2008, doi: 10.1016/j.sse.2008.04.012.

[9] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: Wiley, 1981.

[10] « Wafer fabrication - Doping techniques.pdf ». https://www.halbleiter.org/pdf/pdf_en/Wafer%20fabrication/Wafer%20fabrication%20-%20Doping%20techniques.pdf (consulté le févr. 25, 2019).

[11] F. Lévy, *Physique et technologie des semiconducteurs*. PPUR presses polytechniques, 1995.

[12] T. Sarnet, M. Hernandez, et D. Débarre, « Dopage laser en microélectronique », *J. Phys. IV Proc.*, vol. 138, n° 1, p. 203-212, déc. 2006, doi: 10.1051/jp4:2006138023.

[13] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Laloë, *Quantum mechanics*. New York: Wiley, 1977.

[14] M. C. Ursule, « Compréhension des mécanismes physiques à l'origine des dégradations électriques extrêmes des pixels dans les capteurs d'images irradiés », Toulouse, ISAE, 2017.

[15] P. Bouguer, *Essai d'optique sur la gradation de la lumière*. éditeur non identifié, 1729.

[16] N. Palina, T. Mueller, S. Mohanti, et A. G. Aberle, « Laser assisted boron doping of silicon wafer solar cells using nanosecond and picosecond laser pulses », in *2011 37th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, juin 2011, p. 002193-002197, doi: 10.1109/PVSC.2011.6186392.

[17] « Principes de bases des capteurs d'images - Quantification du bruit ». http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_M05_C06/co/Contenu_19.html (consulté le juin 17, 2019).

[18] H. Zimouche, « Capteur d'images CMOS à réponse insensible aux variations de température », p. 161.

[19] C. Virmontois, « Analyse des effets des déplacements atomiques induits par l'environnement radiatif spatial sur la conception des imageurs CMOS », Toulouse, ISAE, 2012.

[20] A. Boukhayma, *Ultra Low Noise CMOS Image Sensors*. Springer International Publishing, 2018.

[21] H. Tian, « Noise Analysys in CMOS Image Sensors », 2000. http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.479.4689&rep=rep1&type=pdf (consulté le mai 11, 2020).

[22] C. Cervera, I. Ribet-Mohamed, R. Taalat, J.-P. Perez, P. Christol, et J.-B. Rodriguez, « Dark Current and Noise Measurements of an InAs/GaSb Superlattice Photodiode Operating in the Midwave Infrared Domain », *J. Electron. Mater.*, vol. 41, oct. 2012, doi: 10.1007/s11664-012-2035-4.

[23] T. D. Steiner, *Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications*. Artech House, 2004.

[24] M. Stefano, « Czochralski process vs Float Zone method? 2 growth techniques to grow pure mono-crystalline silicon wafer », *Meroli Stefano Webpage*. https://meroli.web.cern.ch/lecture_silicon_floatzone_czochralski.html (consulté le mai 03, 2020).

[25] « La fabrication du silicium – EcoInfo ». https://ecoinfo.cnrs.fr/2010/10/20/3-fabrication/ (consulté le mai 04, 2020).

[26] O. Anttila, « Chapter 2 - Czochralski Growth of Silicon Crystals », in *Handbook of Silicon Based MEMS Materials and Technologies (Second Edition)*, M. Tilli, T. Motooka, V.-M. Airaksinen, S. Franssila, M. Paulasto-Kröckel, et V. Lindroos, Éd. Boston: William Andrew Publishing, 2015, p. 18-55.
[27] T. F. Ciszek et T. H. Wang, « Silicon Float-Zone Crystal Growth as a Tool for the Study of Defects and Impurities », p. 16.
[28] T. F. Ciszek, « Solid-Source Doping of Float-Zoned Silicon with B, N, O, and C: Preprint », p. 7.
[29] A. Luis Santos Ferreira-Resende, « An ab initio Study of Deep-Level Defects in Silicon », PhD Thesis, University of Exeter, 1999.
[30] « Float-zone Silicon ». https://www.pveducation.org/pvcdrom/manufacturing-si-cells/float-zone-silicon.
[31] M. L. Hammond, « Silicon Epitaxy by Chemical Vapor Deposition », in *Handbook of Thin Film Deposition Processes and Techniques*, Elsevier, 2001, p. 45-110.
[32] P. Capper, S. Irvine, et T. Joyce, « Epitaxial Crystal Growth: Methods and Materials », in *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, S. Kasap et P. Capper, Éd. Cham: Springer International Publishing, 2017, p. 1-1.
[33] B. C. Johnson, J. C. McCallum, et M. J. Aziz, « Solid-Phase Epitaxy », in *Handbook of Crystal Growth*, Elsevier, 2015, p. 317-363.
[34] Université Montpellier, « Cours M2 EEA : "Technique de fabrication" », Consulté le: mai 05, 2020. [En ligne]. Disponible sur: http://www.eea.univ-montp2.fr/IMG/pdf/FME346_techno_f_dopage_ex.pdf.
[35] « Semiconductors | Silicon Device Manufacturing - Device Fabrication : Doping (Junction Formation) | Occupational Safety and Health Administration ». https://www.osha.gov/SLTC/semiconductors/devicefab_doping.html (consulté le mai 05, 2020).
[36] « Neutron Transmutation Doping of Silicon | MIT Nuclear Reactor Laboratory ». https://nrl.mit.edu/facilities/ntds (consulté le mai 06, 2020).
[37] J. Boulmer, D. Débarre, A. Grouillet, et D. Lenoble, « Dopage laser pour la microélectronique du futur », *J. Phys. IV*, vol. 11, n° PR7, p. Pr7-103-Pr7-106, oct. 2001, doi: 10.1051/jp4:2001733.
[38] C. Moon, J. Jung, D. Kwon, J. Yoo, D. Lee, et K. Kim, « Application of Plasma-Doping (PLAD) Technique to Reduce Dark Current of CMOS Image Sensors », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, n° 2, p. 114-116, févr. 2007, doi: 10.1109/LED.2006.889241.
[39] Ö. Çobanoğlu, « CMOS fabrication », présenté à Semiconductor Physics Course Final Presentation, Turin, 2006, Consulté le: mai 03, 2020. [En ligne]. Disponible sur: http://personalpages.to.infn.it/~cobanogl/cmosFabrication/CMOSfabrication.pdf.
[40] J. Maru, « CMOS fabrication », 08:13:01 UTC, Consulté le: mai 03, 2020. [En ligne]. Disponible sur: https://fr.slideshare.net/jigyashamaru/cmos-fabrication.
[41] Y. Bonnassieux, « Fabrication des Transistors CMOS », p. 92, 2005.
[42] « CMOS Fabrication : Process Steps And Twin tub Process », *WatElectronics.com*, sept. 24, 2019. https://www.watelectronics.com/understanding-cmos-fabrication-technology/ (consulté le mai 03, 2020).
[43] « CMOS Fabrication using N-well and P-well Technology », *ElProCus - Electronic Projects for Engineering Students*, mars 29, 2019. https://www.elprocus.com/the-fabrication-process-of-cmos-transistor/ (consulté le mai 03, 2020).
[44] J. R. Davis *et al.*, « Impurities in silicon solar cells », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 27, n° 4, p. 677-687, avr. 1980, doi: 10.1109/T-ED.1980.19922.
[45] K. Graff, « Properties of the Main Impurities », in *Metal Impurities in Silicon-Device Fabrication*, K. Graff, Éd. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000, p. 76-130.
[46] K. Graff, « Properties of Rare Impurities », in *Metal Impurities in Silicon-Device Fabrication*, K. Graff, Éd. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000, p. 131-162.
[47] F. Domengie, « Etude des défauts électriquement actifs dans les matériaux des capteurs d'image CMOS », févr. 2011, Consulté le: déc. 05, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01249517.

[48] F. Domengie, J. L. Regolini, et D. Bauza, « Study of Metal Contamination in CMOS Image Sensors by Dark-Current and Deep-Level Transient Spectroscopies », *J. Electron. Mater.*, vol. 39, n° 6, p. 625-629, juin 2010, doi: 10.1007/s11664-010-1212-6.
[49] F. Domengie, J. L. Regolini, D. Bauza, et P. Morin, « Impact on device performance and monitoring of a low dose of tungsten contamination by Dark Current Spectroscopy », in *2010 IEEE International Reliability Physics Symposium*, mai 2010, p. 259-264, doi: 10.1109/IRPS.2010.5488821.
[50] M. Capizzi et A. Mittiga, « Hydrogen in Si: Diffusion and shallow impurity deactivation », *Phys. BC*, vol. 146, n° 1, p. 19-29, sept. 1987, doi: 10.1016/0378-4363(87)90048-9.
[51] « Hydrogen in semiconductors », p. 10.
[52] « (PDF) Effect of hydrogen on Frenkel-pair annihilation in silicon: A quantum-chemical study », *ResearchGate*. https://www.researchgate.net/publication/253902875_Effect_of_hydrogen_on_Frenkel-pair_annihilation_in_silicon_A_quantum-chemical_study (consulté le févr. 28, 2019).

Chapitre II : Description des différentes sources de rayonnement radiatif de l'environnement spatial et des dégradations subies par les imageurs dans cet environnement

Au cours de leurs missions, que ce soit pour la télécommunication, pour l'observation de la Terre ou d'autres applications scientifiques, les satellites sont régulièrement exposés au rayonnement de l'environnement spatial. Les capteurs d'image embarqués à bord sont particulièrement sensibles à cette exposition prolongée aux radiations. L'environnement radiatif spatial résulte de l'addition de différentes composantes, notamment des rayons cosmiques et des phénomènes liés à l'activité solaire. Les particules énergétiques qui composent ce rayonnement sont de natures différentes (électrons, protons, ions), et sont représentées dans des quantités variables suivant leurs provenances. L'énergie cinétique de ces particules et leur flux varient également avec la source du rayonnement.

Lorsque ces particules vont rencontrer les composants électroniques, celles-ci vont induire des altérations des propriétés électriques de ces composants au cours de leurs interactions avec la matière. Ces interactions suivent divers processus physiques et leurs résultats vont se manifester sous différentes formes. On compte deux familles de dégradations. Le premier type d'effets est les effets transitoires (évènements singuliers). La deuxième famille concerne les effets cumulés, ce qui signifie que des dégradations vont s'accumuler lors du passage des particules et que les dommages causés persistent au cours du temps et peuvent parfois être irréversibles. Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit sont focalisés sur un type précis d'effets cumulés : les déplacements atomiques. En effet, les effets cumulés sont répartis en deux catégories : les dommages liés aux processus ionisants et les dommages liés aux interactions non-ionisantes. Cette thèse se place sur l'étude des dommages provoqués par les déplacements atomiques, processus non-ionisants.

Ce second chapitre vise dans un premier temps à expliciter les différentes sources de rayonnement énergétique que peuvent rencontrer les satellites au cours de leurs missions. Ensuite les différents types d'interactions qui peuvent se mettre en place lorsque les particules énergétiques viennent transférer leur énergie cinétique à la matière environnante seront présentés, ainsi que les moyens de quantifier ces transferts d'énergie suivant leur caractère ionisant ou non-ionisant. Une description de la dégradation à l'échelle macroscopique de ces interactions rayonnement-matière sera ensuite proposée. Dans un dernier temps, l'accent sera porté sur la description de la dégradation de la matière à l'échelle microscopique, plus précisément sur les défauts cristallins qui peuvent être créés lors de la création de déplacements atomiques.

II.1 L'environnement radiatif spatial

L'environnement spatial de la Terre est un environnement composé de trois sources de rayonnement distinctes : l'activité solaire (vents et éruptions solaires), les rayons cosmiques et les ceintures de radiations [1]. Chacune de ses sources comportent des particules énergétiques de nature différente, présentes en quantité différente, avec des énergies et des flux différents.

II.1.1 L'activité solaire

Le Soleil est une étoile dynamique de par son activité magnétique intense. Elle est composée à 71 % d'hydrogène, 27 % d'hélium et la fraction restante représente des éléments plus lourds [2]. L'activité solaire se répète selon des cycles d'environ 22 ans, avec une fréquence de demi-cycle de 11 ans. Les pôles magnétiques du Soleil s'inversent et retrouvent leur direction initiale au bout d'un

cycle complet [3]. Chaque demi-cycle peut être partagé selon une activité maximale de 7 ans et une période d'activité à son minimum de 4 ans [4]. Le Soleil éjecte continuellement des particules énergétiques selon deux mécanismes distincts : le vent solaire et les éruptions solaires.

Le vent solaire est une source continue de particules qui provient de l'éjection de plasma par agitation thermique depuis la couronne solaire (haute atmosphère du Soleil) [5]. L'intensité du vent solaire dépend de l'activité du Soleil. Dans un premier temps des électrons de faibles énergies sont émis. Cette émission provoque un déséquilibre de charge qui va entraîner des protons et des ions positifs dans le sillage des électrons. L'ensemble de ces particules ont une énergie cinétique plutôt faible. L'énergie des protons et des ions est en général inférieure à $1\ keV$, et celle des électrons inférieure à $100\ eV$ [5]. Même si la densité du plasma qui traverse l'espace interplanétaire décroît fortement avec la distance parcourue, le flux de particules incident est estimé à $10^{12}\ particules.cm^{-2}.s^{-1}$ [6]. Cependant, même si le vent solaire constitue un flot de particules continu, leurs faibles énergies cinétiques ne permettent pas de traverser la plus grande partie des blindages des satellites.

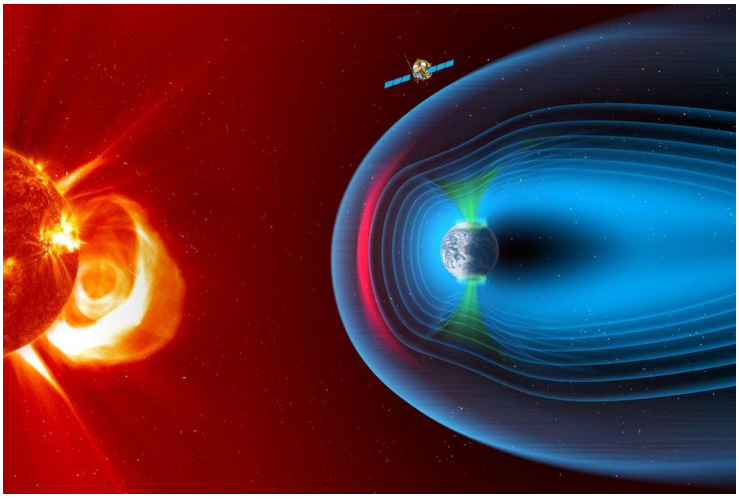


Figure II.1 : La Terre face au Soleil. Des particules énergétiques sont constamment émises par le Soleil.

Crédits : usinenouvelle.com

En revanche, les éruptions solaires sont plus rares mais propulsent des particules avec une plus grande énergie cinétique. Les éruptions solaires, que l'on pourrait comparer à de grandes bulles de plasma, sont provoquées par une réorganisation des boucles de champ magnétique à l'intérieur du Soleil qui engendre une éjection violente de particules. Ces éruptions résultent d'une accumulation d'énergie magnétique dans des zones de champs magnétiques intenses. Les éjections de masse coronale (Coronal Mass Ejection en anglais, abrégé CME), qui s'apparentent à des jets de plasma, sont aussi des sources de particules énergétiques. Ces particules sont généralement des protons, des électrons ou des ions lourds, mais sont également accompagnées de photons de haute énergie [5]. Cette activité magnétique est si intense qu'elle est observable à la surface du Soleil. Les éruptions solaires sont en effet responsables de l'apparition des tâches solaires. Ces éjections violentes sont plus facilement observables au cours de la période d'activité maximale du cycle solaire. Dans des cas extrêmes, les protons éjectés peuvent atteindre une énergie de $20\ GeV$, et une énergie d'une dizaine de MeV pour les électrons [7]. La quantité de matière éjectée lors de ces évènements est considérable puisqu'au niveau de la Terre, la fluence de ce jet de particules est d'environ $10^{10}\ particules/cm^2$ [8]. La grande énergie cinétique de ces particules les rend difficilement arrêtable par les blindages des satellites. Ces phénomènes sont aussi dangereux pour l'Homme que pour les satellites orbitant autour de la Terre car l'énergie importante des particules libérées peut aussi bien traverser les blindages des

satellites, provoquant des dysfonctionnements pouvant être irréversibles, que nuire à la santé des astronautes.

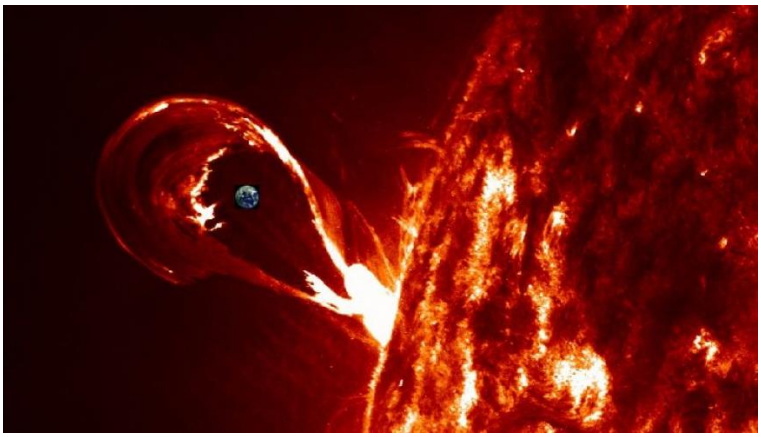


Figure II.2 : Image prise par la sonde SDO d'une éruption solaire. La Terre est représentée en arrière-plan à l'échelle de la bulle de plasma qui est éjectée du Soleil.
Crédits : Ahar Amari - Centre de physique théorique - CNRS - Ecole Polytechnique

II.1.2 Le rayonnement cosmique

Le rayonnement cosmique trouve sa source à l'extérieur de notre système solaire. Les particules issues de ce rayonnement proviennent d'objets célestes lointains, principalement dans les supernovae (explosions d'étoile en fin de vie), ou encore des galaxies lointaines. Les particules chargées émises sont surtout des protons (87 %), des ions d'hélium (12 %) et une fraction d'ions plus lourds (comme le fer ou le nickel) [1]. L'énergie de ces particules peut varier de quelques MeV jusqu'au TeV pour les plus énergétiques. Le flux de particules associé est faible devant celui du vent solaire ou des éruptions solaires et est isotrope. Leur grande énergie cinétique fait que cette source de rayonnement est très dangereuse pour les équipements embarqués puisqu'il n'est pas possible d'arrêter les particules cosmiques les plus énergétiques.



Figure II.3: Illustration d'artiste d'un rayon cosmique provenant d'une galaxie lointaine atteignant l'atmosphère de la Terre.
Crédits : Pierre Auger Observatory Team

II.1.3 Les ceintures de radiation

Egalement appelées « ceintures de Van Allen », les ceintures de radiation sont des régions de forme toroïdale situées perpendiculairement à l'axe de champ magnétique terrestre, c'est-à-dire le long de l'équateur magnétique terrestre (illustration en Figure II.4). Ces régions particulières de la magnétosphère terrestre ont été découvertes au début de l'exploration spatiale (1958) par le biais des mesures de radiations effectuées par le compteur Geiger embarqué dans la sonde Explorer 1.

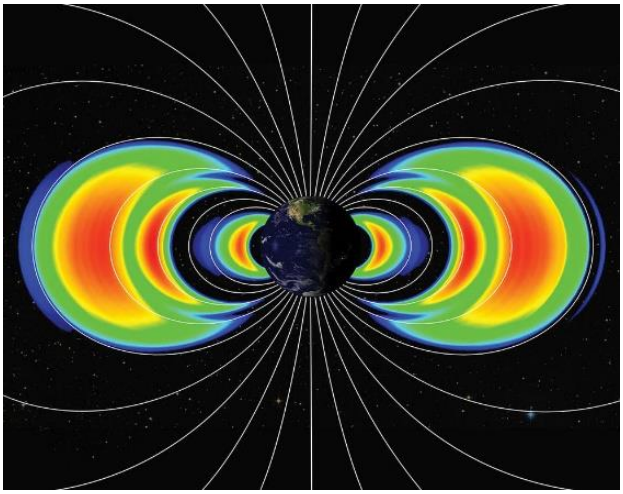


Figure II.4 : Illustration des ceintures de radiation, poches où les particules énergétiques sont piégées par les lignes de champ magnétique. A une altitude donnée, les densités et flux de particules ne sont pas identiques en tout point des ceintures.
Crédits: NASA, Goddard Space Flight Center & John Hopkins University, Applied Physics Laboraroty.

Ces régions sont créées par le biais des interactions entre le vent solaire et les lignes de champ magnétique terrestre. Ces zones vont piéger des particules énergétiques de nature différente avec des énergies différentes. Ces lignes de champ magnétique font office de bouclier contre l'exposition permanente de la Terre aux particules solaires. Des mesures récentes ont montré qu'il existait trois sous-structures au sein des ceintures de radiation :

- Une ceinture dite « protons » à cause de sa forte teneur en protons énergétiques. L'énergie de ces protons est comprise entre quelques keV et plusieurs centaines de MeV. Elle s'étend de 700 à 10000 km d'altitude, soit environ 2 rayons terrestres. Cette ceinture est principalement alimentée en particules par le biais des interactions entre les rayons cosmiques et l'atmosphère terrestre, ainsi que par les particules du vent solaire.
- Une ceinture « électrons » plus complexe, divisée en deux ceintures distinctes. Une région interne, s'étendant d'environ 1,4 à quasiment 3 rayons terrestres. Les électrons peuvent atteindre des énergies allant jusqu'à 5 MeV. La région externe, beaucoup plus étendue, s'étend d'environ 3 rayons terrestres jusqu'à 10 rayons terrestres [9]. Les électrons situés dans cette région possèdent une énergie pouvant atteindre 7 MeV.

Ces ceintures de radiation sont des structures dynamiques et vivantes. Leurs formes et leurs teneurs en particules énergétiques évoluent au gré de l'activité solaire et des rayons cosmiques. De même, à cause de l'inclinaison naturelle de l'axe magnétique terrestre, certaines régions localisées des ceintures de radiation ne présentent pas une concentration de particules uniforme en tout point. C'est le cas de l'anomalie de l'Atlantique Sud, région de très forte densité de particules énergétiques. Les orbites des satellites évitent la plupart du temps cette région pour limiter au maximum l'exposition aux radiations.

L'activité humaine peut également être une source de particules énergétiques pour les ceintures. Ces particules énergétiques, qu'elles proviennent de sources naturelles ou artificielles, sont responsables de la perte partielle ou totale de satellites [10]. Un exemple frappant sont les nombreuses campagnes d'essais nucléaires des Etats-Unis et de l'URSS au début des années 1960, qui ont émis des particules énergétiques en grande quantité et toujours détectables une décennie plus tard. Durant les mois qui suivirent ces essais, de nombreux satellites ont été perdus à cause de la détérioration de l'électronique embarquée [11]. De même en 1989, une gigantesque éruption solaire a causé la perte de satellites, et même la destruction de dispositifs d'alimentation électrique terrestres aux Etats-Unis, au Canada et en Suède [12], [13].

Au cours de leur vie, les satellites vont rencontrer différentes régions des ceintures de radiation. En fonction de l'orbite spécifique désignée pour leur mission (orbite géostationnaire pour un satellite de télécommunication, orbite basse pour un satellite d'observation terrestre par exemple), les satellites ne seront pas exposés aux mêmes doses de radiation. Minimiser cette exposition aux divers rayonnements énergétiques est un vrai défi lors de la réalisation d'une mission. Le but primordial est d'atteindre les objectifs de la mission tout en réduisant au maximum la dégradation de la charge utile du satellite. Les conséquences de l'exposition des satellites à l'environnement spatial (perte de puissance des panneaux solaires, hausse du bruit dans les composants optroniques, coupure des télécommunications ou encore perte du signal GPS) sont le résultat de nombreuses interactions entre la matière qui compose les différents éléments du satellite et les particules énergétiques.

II.2 Interactions rayonnement spatial – matière

Lorsqu'une particule énergétique rencontre de la matière solide, la particule pénètre dans le matériau et interagit avec les atomes et les électrons du milieu selon différents processus. Dans l'environnement spatial, les principaux acteurs des interactions rayonnement-matière sont les photons et les particules chargées, comme par exemple les électrons ou les protons. On peut décrire les interactions entre le rayonnement et la matière selon trois points de vue différents : par quel processus la particule a interagi avec la matière le long de son parcours, les conséquences de cette interaction sur la particule incidente et les conséquences sur le milieu traversé [14]. La compréhension des différents mécanismes d'interaction en fonction de la nature de la particule et de son énergie permet d'interpréter l'origine de la dégradation des composants électroniques par le rayonnement énergétique. On distingue notamment deux manières d'interagir avec la matière : avec le cortège électronique des atomes du milieu (processus ionisant) et directement avec les noyaux des atomes du matériau cible (processus non-ionisant). Une description des différentes interactions possibles entre les principaux acteurs du rayonnement énergétique et la matière est proposée pour comprendre les dégradations que ces interactions peuvent engendrer.

II.2.1 Les interactions avec le cortège électronique

Le cortège électronique correspond à la population d'électrons qui est liée à l'atome. Ces électrons gravitent autour de l'atome et sont organisés en couche selon différentes orbitales. Chaque orbitale correspond à un niveau d'énergie donné (discret) et peut accueillir un nombre maximal d'électrons. Il existe deux mécanismes d'interaction de base avec le cortège électronique. On compte dans un premier temps l'excitation, qui se produit dans le cas où un électron va migrer vers une couche électronique différente. Ensuite on a l'ionisation, qui correspond à l'éjection d'un électron du cortège électronique. Les particules énergétiques vont interagir avec le cortège électronique de manière plus complexe par le biais de ces mécanismes.

Les photons

Les photons possèdent trois mécanismes d'interaction avec le cortège électronique : l'effet photoélectrique, présenté au cours du chapitre I (voir paragraphe I.3.1), ainsi que par diffusion Compton ou encore par diffusion de Rayleigh.

Pour rappel, l'effet photoélectrique se produit lorsqu'un photon cède son énergie à un électron. Si l'énergie cédée est supérieure à la largeur de la bande interdite, l'électron sera émis. De plus, plus l'énergie du photon est importante, plus l'électron émis viendra d'une couche profonde (électron proche du noyau). Si l'électron est émis depuis une couche profonde, l'atome aura besoin de se réorganiser pour compenser la perte d'un électron. Le vide laissé par l'électron primaire émis sera comblé par un électron provenant d'une couche supérieure. Cette transition d'une couche

électronique à une autre (autrement dit d'un niveau d'énergie à un autre) engendre l'émission d'un photon X. Cette émission d'un photon permet à l'atome qui était dans un état excité de revenir à un état stable. L'énergie du photon X dépendra de la transition réalisée par l'électron pour quitter son niveau d'énergie et atteindre une couche électronique plus ou moins profonde. Ce même photon X pourra ensuite céder son énergie à un autre électron du même atome, qui pourra à son tour quitter le cortège électronique. Cet électron secondaire est appelé électron Auger (Figure II.5.a). L'émission d'un électron Auger est un cas particulier de l'effet photoélectrique. Cependant dans le silicium, pour une gamme d'énergie de photons allant du visible et du proche infrarouge jusqu'aux rayons X voir gamma, c'est l'effet photoélectrique simple qui prédomine.

Les photons peuvent également interagir avec le cortège électronique par diffusion ou effet Compton. Cela se produit lorsqu'un photon est dévié de sa trajectoire initiale par un électron, le plus souvent situé sur une couche externe (Figure II.5.b). Au cours de ce processus élastique, le photon transfère de l'énergie à l'électron qui est éjecté du cortège électronique. Le photon a perdu de l'énergie mais continue son parcours dans le matériau suivant une autre direction. Dans le silicium, l'effet Compton peut se déclencher pour des photons de quelques keV, mais devient plus important pour des photons compris entre $100\ keV$ et $1\ MeV$.

La diffusion de Rayleigh-Thomson est aussi un processus élastique (Figure II.5.c). Le photon incident, à l'approche d'un atome, va faire osciller le cortège électronique de l'atome. Cette oscillation globale va se dissiper par le biais de l'émission d'un photon de même énergie que le photon incident, à la différence qu'il sera émis dans une direction différente que celle d'arrivée. On parle de diffusion de Rayleigh dans le cas d'électrons liés à un atome, et diffusion de Thomson dans le cas d'électrons libres. Les photons qui produisent cet effet sont les mêmes que pour l'effet photoélectrique, mais avec une contribution moindre.

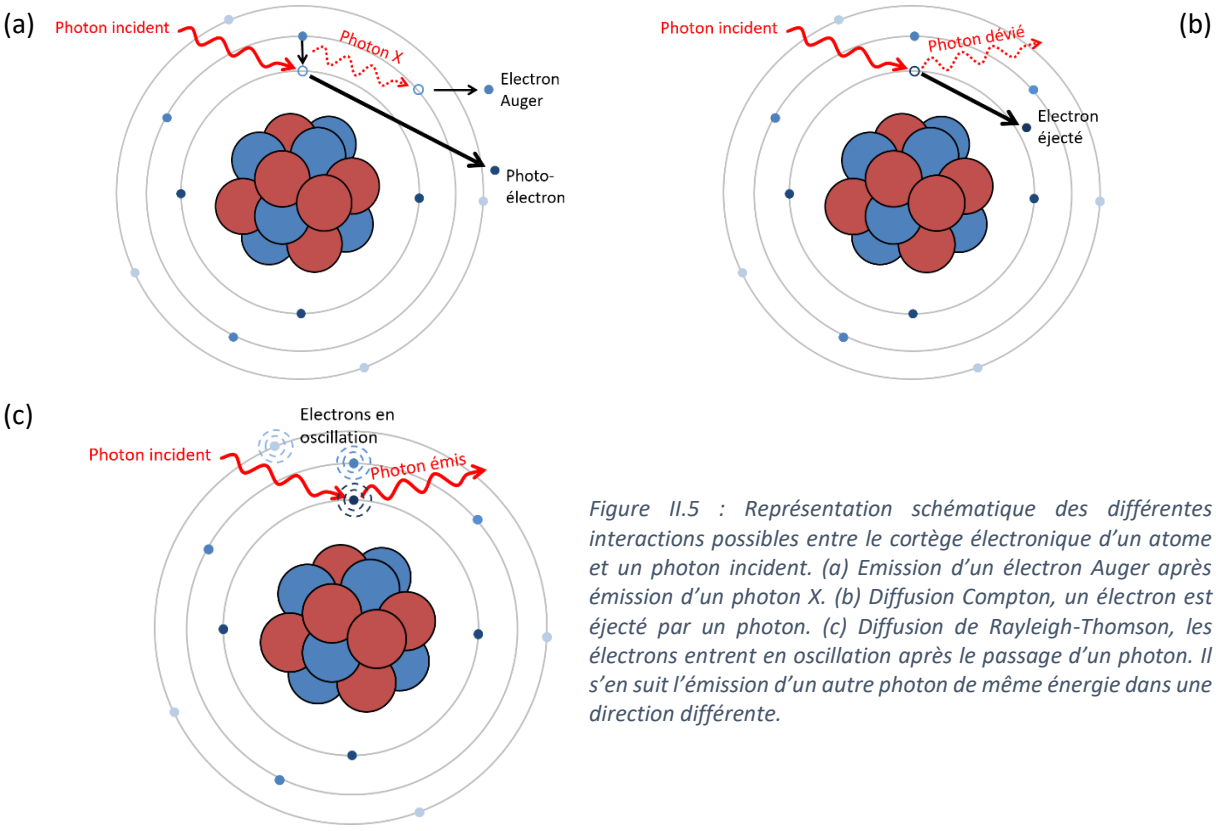


Figure II.5 : Représentation schématique des différentes interactions possibles entre le cortège électronique d'un atome et un photon incident. (a) Emission d'un électron Auger après émission d'un photon X. (b) Diffusion Compton, un électron est éjecté par un photon. (c) Diffusion de Rayleigh-Thomson, les électrons entrent en oscillation après le passage d'un photon. Il s'en suit l'émission d'un autre photon de même énergie dans une direction différente.

Les particules chargées

Les particules chargées interagissent avec le cortège électronique par interaction coulombienne électronique. Cela se produit lorsque la charge électrique de la particule incidente interagit à distance (sans collision) avec la charge électrique du cortège électronique, par attraction ou répulsion coulombienne suivant la nature de la particule. D'un côté, cette interaction va ralentir et dévier la particule incidente. De l'autre côté, un électron qui a subi cette interaction coulombienne peut effectuer une transition vers une autre couche du cortège électronique, voire même quitter le cortège (Figure II.6). Dans le dernier cas, l'atome est ionisé et il en résulte la création d'une paire électron-trou. Cette interaction peut être considérée comme élastique pour les gammes d'énergies rencontrées dans l'environnement spatial.

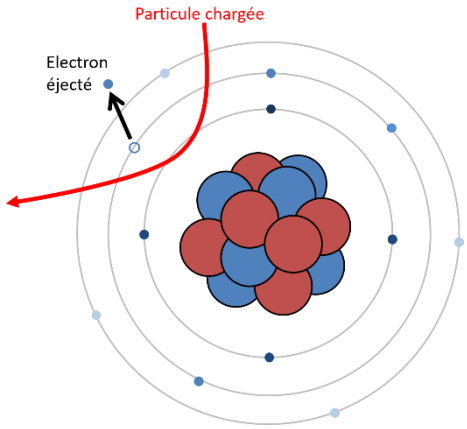


Figure II.6 : Interaction coulombienne entre un électron et une particule chargée. En fonction de la charge de la particule et de sa direction, l'électron sera attiré ou repoussé par la particule chargée. De cette manière, un électron peut être éjecté du cortège électronique.

II.2.2 Les interactions avec les noyaux atomiques

Une majeure partie des interactions entre les particules et la matière se déroule selon des processus ionisants. Néanmoins, les conséquences des processus non-ionisants sont loin d'être négligeables. Un processus non-ionisant met en jeu un transfert d'énergie d'une particule vers le noyau atomique, d'un ou de plusieurs atomes suivant l'énergie mise en jeu. Les photons sont capables d'interagir avec les noyaux atomiques par le biais de deux réactions : la photodésintégration et la création de paires. Les particules chargées elles, peuvent interagir avec le cœur d'un atome au moyen de trois mécanismes : l'interaction coulombienne nucléaire, l'interaction nucléaire élastique et l'interaction nucléaire inélastique. Les interactions avec le noyau peuvent provoquer la spallation du noyau (son explosion en plusieurs fragments moins lourds), l'éjection du noyau de son site cristallin (déplacement vers un autre site du réseau atomique cristallin) ou encore l'émission de photons.

Les photons

Contrairement aux processus ionisants, où le photon pouvait créer une interaction avec une énergie de quelques keV, le photon a besoin d'une énergie de l'ordre de plusieurs MeV pour déclencher un processus non-ionisant. La photodésintégration (ou absorption photonucléaire) se manifeste par la disparition d'un photon à proximité d'un noyau. Si l'énergie cinétique est suffisante, le noyau peut se dissocier en au moins deux éléments plus légers, l'un sera un noyau moins lourd et le reste des particules légères (Figure II.7.a). Il faut que le photon ait une énergie de quelques dizaines de MeV pour déclencher une telle réaction, ce qui est assez rare dans le domaine spatial. Sinon, l'atome entre dans un état excité et va émettre un photon gamma pour revenir à un état fondamental.

A l'inverse, le mécanisme de création de paires nécessite une quantité d'énergie moindre (au moins $1{,}022\ MeV$). Dans ce cas, le photon va être capturé et son énergie sera convertie pour la

matérialisation d'un électron et d'un positon avec une énergie cinétique égale. Le positon, de par sa nature (antimatière de l'électron) va rapidement se désintégrer lors de sa rencontre avec un électron proche. Son annihilation va engendrer la création de deux photons de $511\ keV$ chacun se propageant en sens opposé [15]. L'électron émis quant à lui va exciter ou ioniser la matière sur son parcours (Figure II.7.b).

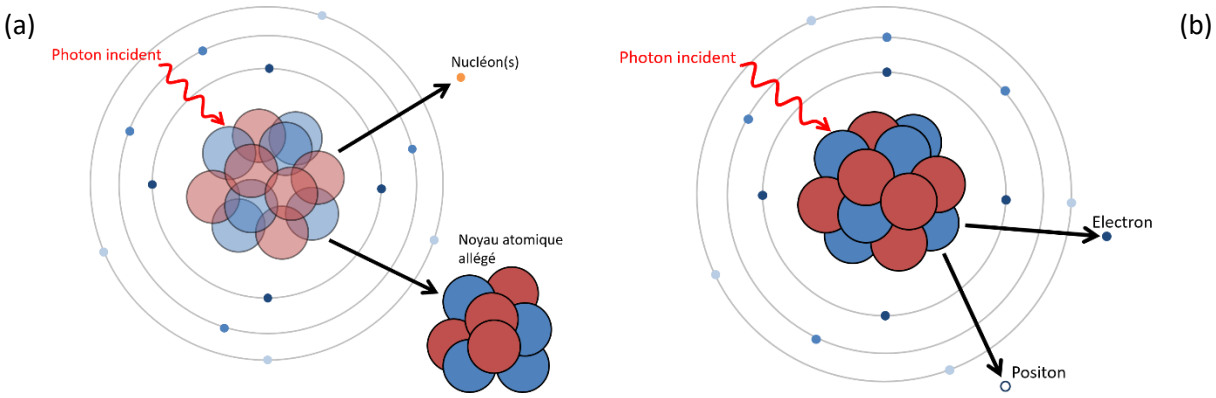


Figure II.7 : Représentation schématique des interactions possibles entre un photon et le noyau d'un atome. (a) Photodésintégration, le photon est absorbé et le noyau est scindé en plusieurs éléments plus légers. (b) Création de paires, le photon est capturé et sert à produire un électron et un positon de même énergie.

La prédominance de certaines interactions entre les photons et la matière en fonction de l'énergie du photon incident et du numéro atomique du matériau est reportée sur la Figure II.8.

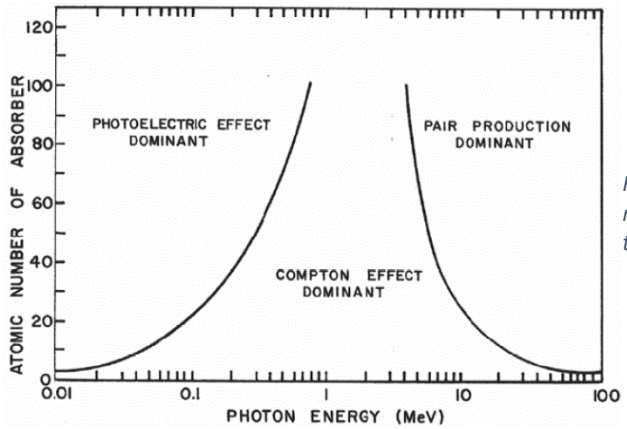


Figure II.8 : En fonction de l'énergie du photon incident, et du numéro atomique de la matière qui absorbe le photon, un type d'interaction photon-matière est privilégié.

Les particules chargées

Les particules chargées (protons, électrons, ions) peuvent interagir avec le noyau atomique du matériau cible selon trois réactions différentes. Celle qui possède la plus grande probabilité est l'interaction coulombienne nucléaire qui, à l'image de l'interaction coulombienne électronique, repose sur le mécanisme d'attraction ou de répulsion coulombienne entre les charges positives du noyau et les charges des particules incidentes (Figure II.10.a). Ce processus élastique peut éjecter un atome de son site cristallin si l'énergie mise en jeu dans la réaction dépasse un certain seuil (Figure II.9).

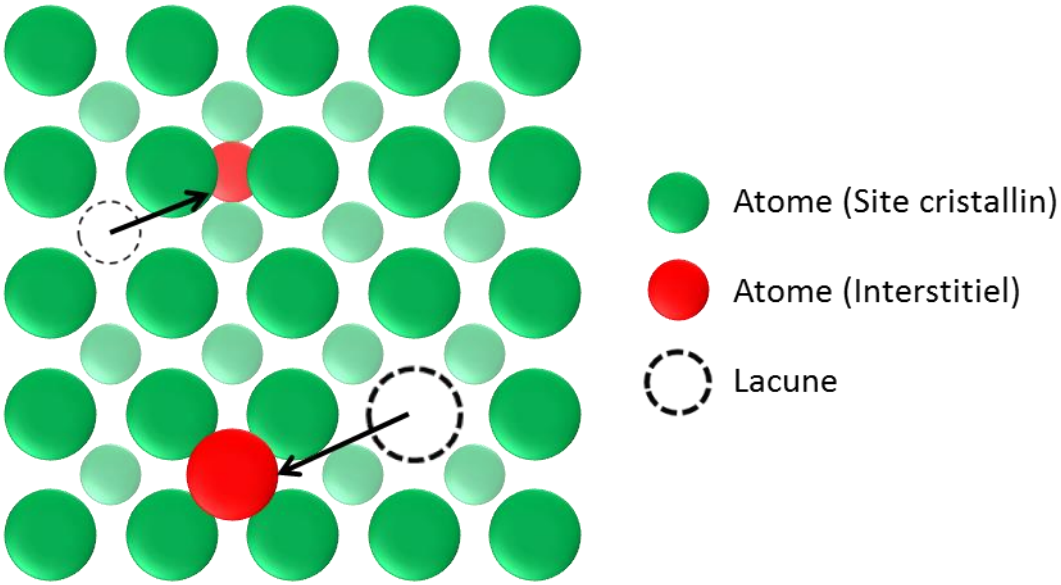


Figure II.9 : Représentation schématique d'un déplacement atomique dans un arrangement ordonné d'atomes. Si l'énergie est suffisante, l'atome peut être déplacé de son site cristallin (sphère verte), et se retrouve dans une position interstitielle (sphère rouge). L'atome déplacé laisse derrière lui un vide appelé lacune (cercle pointillé).

La deuxième réaction possible est l'interaction nucléaire élastique. Cette interaction se produit lorsque la particule chargée vient directement entrer en collision avec le noyau atomique. La particule chargée peut être absorbée si elle cède l'intégralité de son énergie, ou continue son parcours dans la matière selon une nouvelle direction si la particule n'a cédé qu'une partie de son énergie et qu'il lui reste suffisamment d'énergie cinétique (Figure II.10.b). Cette réaction est plus rare car la particule incidente doit franchir la barrière de potentiel de l'atome sans être déviée par l'interaction coulombienne.

Enfin, le dernier mécanisme d'interaction entre une particule chargée et un noyau atomique est l'interaction nucléaire inélastique. Cette réaction est similaire à la précédente, sauf qu'ici lorsque la particule a traversé la barrière de potentiel de l'atome, elle finit sa course au cœur du noyau. Ce choc violent mène à la spallation du noyau, qui va être scindé en plusieurs éléments plus légers (Figure II.10.c). L'atome se retrouve dans un état qui n'est pas stable, et va émettre des particules comme des neutrons, des rayons gamma ou des noyaux légers afin de revenir à son état fondamental. Le noyau fils est d'une nature différente de celle du noyau père : soit le noyau fils est un isotope du noyau père, ou bien tout simplement un autre élément. Les particules émises au cours de cette réaction possèdent suffisamment d'énergie pour interagir avec la matière environnante. Cette dernière réaction est moins probable dans le sens où la particule incidente doit posséder une énergie de plusieurs MeV, ce qui est le cas notamment pour un proton ou un électron. Une énergie inférieure est suffisante dans le cas particulier du neutron, car de par sa neutralité électrique il ne va pas subir les forces coulombiennes du noyau atomique.

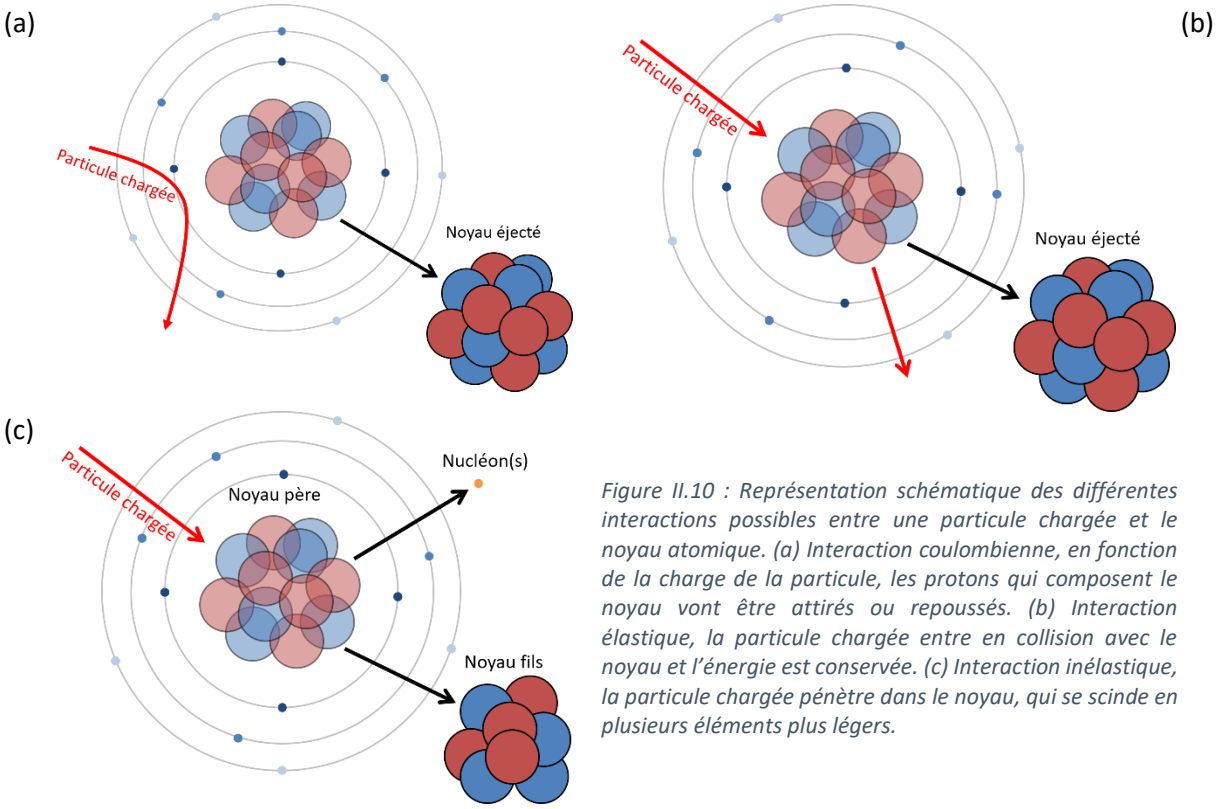


Figure II.10 : Représentation schématique des différentes interactions possibles entre une particule chargée et le noyau atomique. (a) Interaction coulombienne, en fonction de la charge de la particule, les protons qui composent le noyau vont être attirés ou repoussés. (b) Interaction élastique, la particule chargée entre en collision avec le noyau et l'énergie est conservée. (c) Interaction inélastique, la particule chargée pénètre dans le noyau, qui se scinde en plusieurs éléments plus légers.

Dans tous les cas pour éjecter un atome de son site cristallin, il est communément admis que l'énergie transmise au noyau père doit être supérieure à une valeur précise nommée énergie seuil de déplacement. Dans le silicium, on considère que l'énergie seuil de déplacement est de $21\ eV$. Il se peut qu'au cours de certaines réactions nucléaires, l'énergie mise en jeu est telle que le noyau éjecté peut à son tour transférer son énergie à un noyau voisin, et ce dernier pourra également être déplacé de son site cristallin. C'est ce que l'on appelle une cascade de dommage. L'ensemble de ces déplacements atomiques vont perturber l'intégrité de la structure cristalline du semi-conducteur irradié. Les conséquences de ces déplacements atomiques seront explicitées dans la section II.5 de ce chapitre.

II.2.3 Rayonnement continu de freinage (Bremsstrahlung)

Ce rayonnement particulier fait partie des rayonnements secondaires, c'est-à-dire que ce mécanisme se déclenche à la suite d'une interaction entre une particule énergétique et le cortège électronique ou le noyau atomique. Le rayonnement de Bremsstrahlung (Figure II.11) survient lorsqu'une particule chargée est déviée et ralentie au sein de la matière [16]. Cette force est causée par les interactions coulombiennes nucléaires et électroniques et induit l'émission de photons énergétiques tels que des rayons X ou gamma. Ce flux de photons constitue un spectre quasi-continu en énergie. Ces photons peuvent ensuite interagir avec les électrons du milieu et ioniser la matière. L'intensité du rayonnement est proportionnelle au nombre de charges présentes dans le noyau et dans le cortège électronique et est inversement proportionnelle à la masse de la particule [17]. Plus l'énergie de la particule augmente, plus la direction d'émission des photons tend vers la direction de propagation de la particule incidente [14]. Cependant, l'énergie dissipée par ce rayonnement est négligeable par rapport aux interactions directes avec le cortège électronique et le noyau des atomes dans la gamme d'énergie du spatial.

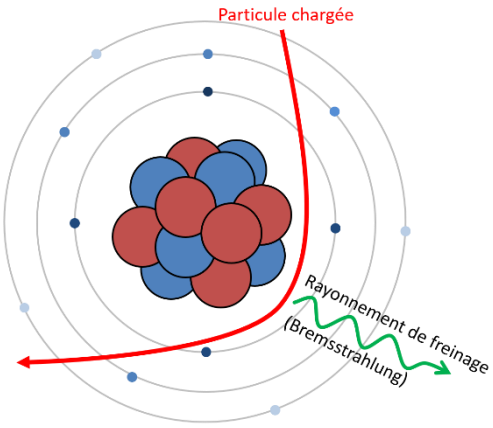


Figure II.11 : Illustration du rayonnement de freinage (Bremsstrahlung). Lorsque la particule chargée arrive à proximité du noyau, elle est freinée par les différentes interactions coulombiennes électroniques et nucléaires. Ce freinage se manifeste par l'émission de photons X ou gamma.

Au travers des différentes interactions possibles avec la matière, les particules issues de l'environnement spatial vont transférer leur énergie au matériau cible. Les interactions entre le rayonnement spatial et le cortège électronique vont principalement engendrées l'ionisation du matériau. Dans le cas des interactions entre le cœur des atomes et le rayonnement énergétique, les déplacements atomiques sont les principaux effets. Dans la gamme d'énergie rencontrée dans le domaine spatial, les photons vont essentiellement céder leur énergie par effet photoélectrique, tandis que les particules chargées vont interagir en grande partie avec le cortège électronique, et dans une moindre mesure créer des déplacements atomiques. Dans le cadre de ces travaux de thèse, le cas des particules chargées telles que les protons est le principal centre d'intérêt. Dans la suite de ce chapitre, nous allons voir plus en détails la quantification des transferts d'énergie des particules chargées vers la matière, et les notions de pouvoir d'arrêt et de dose seront définies.

II.3 Description de la perte d'énergie suivant les différents mécanismes liés aux interactions rayonnement-matière

Au sein de la matière, les particules chargées peuvent soit interagir avec le nuage électronique d'un atome, soit avec le noyau de l'atome lui-même. Chaque interaction avec la matière conduit à un dépôt d'énergie que l'on appelle la dose. Dans le cas des interactions avec le cortège électronique, ce transfert d'énergie est appelé la dose ionisante cumulée (ou Total Ionizing Dose en anglais, abrégé TID). Pour les interactions avec le noyau des atomes, ce dépôt d'énergie est qualifié de dose de dommage de déplacement (ou Displacement Damage Dose en anglais, abrégé DDD). Chacune de ces doses est liée à la perte d'énergie par les mécanismes qui leur sont associés. La dissipation d'énergie par la dose ionisante est appelée LET (pour Linear Transfer Energy en anglais). La dose de dommage de déplacement est liée à la perte d'énergie de la particule lorsqu'elle transfère son énergie pour déplacer des atomes, appelée NIEL (pour Non-Ionizing Energy Loss). Ces grandeurs physiques sont définies pour un matériau donné, la nature de la particule incidente et son énergie.

Aussi, chaque interaction possède une certaine probabilité de se réaliser. Cette probabilité est représentée par la section efficace d'interaction. Les différents types de dose, leur dépôt d'énergie associé ainsi que la section efficace d'interaction sont définis dans cette section.

II.3.1 Section efficace d'interaction

En physique des particules, et plus exactement dans le domaine de l'étude des interactions entre le rayonnement et la matière, il est indispensable d'introduire la notion de section efficace d'interaction. La section efficace est la probabilité qu'une interaction spécifique ait lieu entre une

particule incidente et une particule cible. Physiquement, la section efficace correspond à une surface, exprimée en centimètre carré ou en barn (1 barn est équivalent à $10^{-24} cm^2$). Pour un matériau donné, la section efficace est différente selon la nature de la particule cible et de l'interaction considérée. En considérant un proton, pour les interactions coulombiennes, la section efficace différentielle peut être représentée dans une certaine gamme d'énergie avec une assez bonne précision grâce à la formule dite de Rutherford [18]:

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{Ruth} = \left(\frac{qQ}{16\pi\epsilon_0 E_{cin.}}\right)^2 \frac{1}{sin^4(\theta/2)} \quad \text{(II.1)}$$

Où q est la charge de la particule (C), $E_{cin.}$ l'énergie cinétique (J) de celle-ci, Q la charge du centre diffuseur (particule considérée infiniment plus lourde que la particule incidente et statique) (C), ϵ_0 est la permittivité du vide et θ l'angle de diffusion de la particule incidente. La section efficace différentielle de Rutherford permet donc de décrire la distribution angulaire des particules incidentes diffusées dans un angle solide $d\Omega$ par le centre diffuseur. Cette expression permet de connaître la trajectoire des particules incidentes en fonction d'un centre diffuseur de nature différente. Il est important de souligner qu'à basse énergie, il faut prendre en compte l'écrantage électrostatique produit par le cortège électronique, chose que ne fait pas ce modèle. Pour remédier à cela, le modèle ZBL (*Ziegler*, *Biersack*, *Littmark*) [19] sera privilégié au cours de ces travaux de thèse.

En ce qui concerne les électrons, autre particule chargée fréquemment rencontrée dans l'environnement spatial, la description de Mott ajoute une correction relativiste à la formule de Rutherford qui permet d'obtenir une bonne approximation dans la gamme d'énergie rencontrée dans le spatial [20]:

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{Mott} = \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{Ruth} \left(1 - \beta^2 sin^2\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{(II.2)}$$

Où β est le rapport entre la vitesse de l'électron et celle de la lumière, et θ l'angle de diffusion. Dans le cas des interactions nucléaires élastiques et inélastiques, il n'existe pas de formulation simple équivalente. Les sections efficaces d'interaction sont calculées à l'aide de modèles spécifiques.

II.3.2 Notion de pouvoir d'arrêt ionisant et non-ionisant

Lorsqu'une particule incidente traverse un matériau, celle-ci peut céder une partie de son énergie suivant les différents mécanismes décrits dans la section II.2 de ce chapitre. Le taux de perte d'énergie moyen par unité de longueur est caractéristique d'une particule. Cette grandeur se nomme le pouvoir d'arrêt, et est souvent exprimée en MeV/cm. Puisque chaque type d'interaction dépose de l'énergie de manière différente, chacune d'entre elle possède sa propre définition du pouvoir d'arrêt. Le pouvoir d'arrêt électronique correspond à la perte d'énergie par processus ionisant, le pouvoir d'arrêt nucléaire à la dissipation d'énergie par interaction avec les noyaux, et le pouvoir d'arrêt radiatif est assimilé au dépôt d'énergie par les rayonnements secondaires comme le Bremsstrahlung. Le bilan de la perte d'énergie par unité de longueur s'exprime selon la formule suivante [5] :

$$\left.\frac{dE}{dx}\right|_{total} = \left.\frac{dE}{dx}\right|_{élec.} + \left.\frac{dE}{dx}\right|_{nucl.} + \left.\frac{dE}{dx}\right|_{rad.} \quad \text{(II.3)}$$

Nous ne détaillerons dans ce manuscrit que la définition du pouvoir d'arrêt ionisant et non-ionisant et les doses associées, car le pouvoir d'arrêt radiatif est négligeable à basse énergie, mais sa contribution peut être ajoutée au pouvoir d'arrêt ionisant à haute énergie pour une estimation plus précise de la perte d'énergie.

Pouvoir d'arrêt ionisant

Le pouvoir d'arrêt ionisant est fortement lié au LET. Le LET est défini à une énergie incidente donnée E et peut donc s'écrire sous la forme d'une énergie transférée dE par unité de longueur dx comme montrée précédemment. De manière générale, le LET s'exprime suivant la formulation suivante [5]:

$$LET(E) = \frac{dE}{dx}\Big|_{élec.} = \eta Z \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} \frac{d\sigma}{dQ} Q dQ \tag{II.4}$$

Avec η la densité atomique du matériau cible ($atomes/cm^3$), Z le numéro atomique du matériau cible, $\frac{d\sigma}{dQ}$ est la section efficace différentielle pour les interactions entre les électrons secondaires générés par la particule le long de sa trace (dans le cas où le Bremsstralung est négligé) et Q correspond à l'énergie déposée par la particule incidente le long de son parcours. On peut également trouver dans la littérature une définition du LET par unité de masse. Pour ce faire il suffit de diviser le LET par la densité volumique du matériau cible. On obtient de cette manière un LET « massique », exprimé en $MeV.cm^2/g$.

Pouvoir d'arrêt non-ionisant

A l'image du LET, le NIEL correspond au transfert d'énergie de la particule vers le matériau cible pour les déplacements atomiques. Le NIEL s'exprime de manière analogue au LET avec la formulation suivante :

$$NIEL(E) = \frac{dE}{dx}\Big|_{nucl.} = \eta \int_{T_d}^{T_{rmax}} \frac{d\sigma}{d(T_r)} G(T_r) d(T_r) \tag{II.5}$$

Avec T_d l'énergie seuil de déplacement, T_r l'énergie transférée à la matière par processus non-ionisant, $\frac{d\sigma}{dQ}$ est la section efficace différentielle pour les interactions entre les noyaux atomiques et la particule incidente (cm^2) et $G(T_r)$ la fonction de partition de Lindhard. Cette fonction est utilisée pour identifier la fraction de l'énergie transférée à la matière en déplacements atomiques [21]. En effet, lorsque la particule chargée incidente traverse le matériau cible, une part de cette énergie est utilisée pour ioniser la matière, le reste pour déplacer les atomes. En général, une grande partie de l'énergie de la particule est consacrée aux processus ionisants. Dans le cas des protons, environ un millième de l'énergie incidente est utilisé pour éjecter des atomes de leur site cristallin [22]. L'énergie seuil de déplacement T_d correspond à l'énergie minimale requise pour déplacer un atome au sein du réseau cristallin. Elle est généralement fixée à $21\ eV$ dans le silicium. Si l'énergie transmise au noyau est inférieure à ce seuil, l'atome restera sur son site cristallin et on considère que l'énergie sera dissipée par vibrations du réseau (phonons). Le NIEL « massique », c'est-à-dire le NIEL exprimé en unité de masse, est calculé selon :

$$NIEL_m(E) = \eta \frac{Z}{\rho} \int_{T_d}^{T_{rmax}} \frac{d\sigma}{d(T_r)} G(T_r) d(T_r) \quad \text{(II.6)}$$

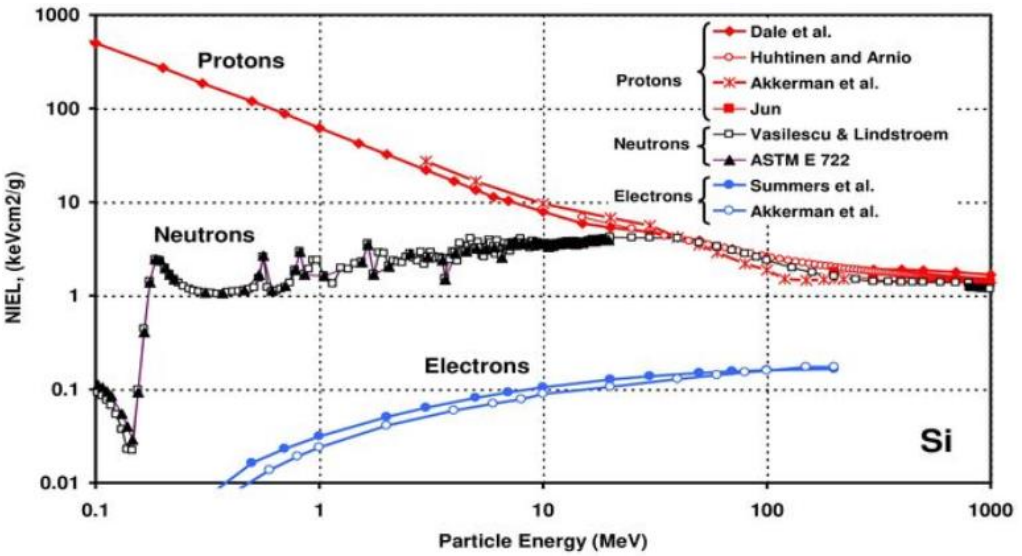


Figure II.12 : Evolution du NIEL en fonction de l'énergie de la particule incidente dans le silicium. On remarque que le NIEL d'un électron présente un comportement inverse à celui d'un proton. Le NIEL est ici présenté pour plusieurs énergies seuil de déplacement [23].

II.3.3 Doses ionisante et non-ionisante

Pour quantifier l'exposition aux radiations d'un matériau, on utilise couramment la notion de dose. La dose représente l'énergie absorbée par unité de masse du matériau exposé. La dose peut être déterminée à partir du pouvoir d'arrêt défini dans le paragraphe précédent. Puisque la dose est une fonction du pouvoir d'arrêt, on compte un type de dose pour chaque pouvoir d'arrêt. Les calculs des doses ionisante et non-ionisante sont présentés dans ce paragraphe.

Dose ionisante

La dose ionisante cumulée (Total Ionizing Dose en anglais, abrégé TID) est la dose associée au LET. Elle correspond à la quantité d'énergie absorbée par unité de masse du matériau au cours des processus ionisants. La dose ionisante cumulée étant égale à l'énergie moyenne déposée dE par un nombre de particules incidentes $N_{part.}$ dans un échantillon de masse m, la dose ionisante peut se formuler [24] :

$$TID = N_{part.} \frac{dE}{m} \quad \text{(II.7)}$$

Sachant que le nombre de particules incidentes est égal au produit de la fluence ϕ (valeur du flux de particules intégré durant le temps d'exposition, ayant pour unité le nombre de particules par cm^2) et de la section exposée au rayonnement du matériau S, et que la masse de l'échantillon exposé est fonction de cette même section, on peut faire apparaître l'expression du LET :

$$TID = \phi S \frac{dE}{S\rho dx} = \phi \left(\frac{1}{\rho}\frac{dE}{dx}\right) = \phi \times LET_m \quad \text{(II.8)}$$

A noter que l'équation (II.8) est valable sous l'hypothèse d'une trajectoire quasi-rectiligne de la particule incidente et que son LET varie peu avec la distance parcourue. L'unité de la dose ionisante est le MeV/g, mais le Gray (Gy) (unité SI, correspondant à 1 joule par kilogramme de matière) ou le rad ($1\,Gy = 100\,rad$) sont plus couramment utilisés. Considérant que le LET massique a pour unité $MeV.cm^2/g$, la dose d'ionisation en Gray s'exprime :

$$TID = 1{,}6 \times 10^{10} \times \phi \times LET_m \quad \text{(II.9)}$$

Dose non-ionisante

La dose non-ionisante, également appelée dose de dommage de déplacement (Displacement Damage Dose en anglais, abrégé DDD), est calculée de manière analogue à la dose d'ionisation. Elle correspond à l'énergie absorbée déposée dans le matériau par unité de masse au cours des interactions physiques menant aux déplacements des atomes. La dose de déplacement étant fonction du pouvoir d'arrêt associé aux déplacements atomiques, elle s'exprime selon la formule [25] :

$$DDD = \phi * NIEL_m \quad \text{(II.10)}$$

Tout comme la dose ionisante, la dose de déplacement est proportionnelle au pouvoir d'arrêt associé (le NIEL dans le cas présent), et possède pour unité le MeV/g. De même, cette expression de la dose de déplacement suppose que le NIEL de la particule varie peu avec la distance parcourue dans le matériau cible, ce qui est sujet à discussion dans la littérature [26].

Au cours de leur vie, les composants embarqués dans les satellites vont absorber une dose variable de radiations qui vont mener à la dégradation de leurs fonctionnalités. Les doses d'ionisation et de déplacement sont connues pour manifester des effets différents sur le fonctionnement des composants. Ces effets peuvent être ponctuels, causés par le passage d'une seule particule : c'est ce que l'on appelle les effets singuliers. Il existe également les dégradations causées par l'accumulation des dommages absorbés au cours du temps, à cause de l'addition des interactions de plusieurs particules. Cette catégorie est appelée effets cumulés. Une description brève des effets singuliers liés au rayonnement spatial est proposée au début de la section suivante, avant de continuer sur une description plus exhaustive des effets cumulés.

II.4 Description à l'échelle macroscopique des dégradations des capteurs d'image liées aux interactions rayonnement-matière

Les particules chargées de l'environnement spatial vont interagir avec la matière des composants électroniques par le biais des différents mécanismes présentés dans les paragraphes précédents. Ces interactions vont modifier ou altérer les propriétés des matériaux irradiés de manière ponctuelle ou cumulée dans le temps. Ces dégradations vont se manifester par des phénomènes mesurables à l'échelle macroscopique. Il existe deux catégories de dégradations des composants. Les dommages infligés aux composants de manière ponctuelle font partie de la catégorie des effets singuliers. Contrairement aux effets singuliers, les effets cumulés vont entraîner une détérioration

progressive des performances des capteurs d'image. Ce type d'effet résulte de l'addition de plusieurs dégradations dans la matière qui ne se sont pas résorbées et qui perdurent sous des aspects différents. Chaque type d'effets cumulés est décrit dans les paragraphes suivant.

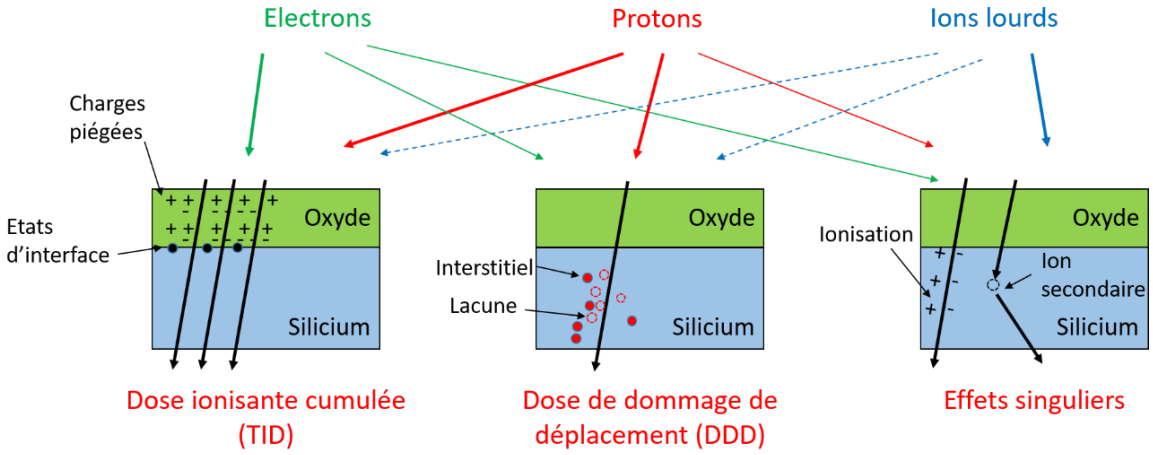


Figure II.13 : Illustration de principe récapitulant le résultat des interactions entre des particules chargées et la matière observées dans les pixels d'un imageur CMOS, schématisés selon une couche de silicium et une couche d'oxyde. Chaque particule chargée possède son code couleur. L'épaisseur de la flèche détermine l'importance de la contribution de cette particule pour chaque effet [23].

Effets singuliers

La catégorie des effets singuliers (Single Event Effects en anglais, abrégé SEE) est un ensemble d'effets observés dans les composants lorsque qu'une seule particule chargée (ion ou proton) vient endommager le composant électronique à un instant donné [27]. La source de ces effets singuliers est une forte déposition de paires électron-trou le long du parcours de la particule chargée dans la matière [28]. Pour rappel l'intensité de cette ionisation est caractérisée par le LET (cf paragraphe II.3.2). L'ionisation ponctuelle produite par la particule va perturber le fonctionnement nominal des éléments de base des composants, comme les jonctions PN, les transistors, ainsi que les bits mémoire [29]. En fonction de l'intensité de l'ionisation et de la perturbation qu'elle engendre, on distingue deux types d'effets singuliers : les effets dits transitoires (soft errors en anglais) et les effets permanents (hard errors en anglais). L'ensemble de ces évènements singuliers peut engendrer des effets réversibles et non-destructifs, ou à l'inverse des effets partiellement ou entièrement destructifs. Ces évènements singuliers se manifestent par la corruption de données, l'arrêt temporaire d'un circuit, des activations parasites de certaines parties du composant, voire même jusqu'à la destruction du composant [30], [31]. Cependant, comme ces évènements singuliers ne font pas partie de l'objet d'étude des travaux de thèse décrits dans ce manuscrit, nous ne rentrerons pas plus en détails sur ce type de dégradation.

Effets de la dose ionisante cumulée

Les principaux effets de la dose ionisante cumulée se manifestent essentiellement dans les isolants, plus particulièrement les oxydes de silicium, situés à l'interface avec le silicium [32]. Lorsqu'une particule énergétique traverse l'oxyde, elle dépose une grande partie de son énergie sous forme de dose ionisante. Des paires électron-trou sont générées le long de la trajectoire de la particule [33]. Une majeure partie de ces paires vont très vite se recombiner et disparaître. Cependant, la grande différence de mobilité des électrons et des trous (les électrons sont environ trois fois plus mobiles que les trous dans un semi-conducteur) fait que les électrons peuvent diffuser loin des trous. De plus, la présence d'un champ électrique tend à séparer les paires électron-trou. C'est pourquoi une fraction des trous ne va pas recombiner avec les électrons [34], [35]. Ces trous non-recombinés vont ensuite

migrer par sauts successifs vers l'interface isolant-silicium grâce à des niveaux de pièges peu profonds (niveau d'énergie proche de la bande de valence) par excitation thermique [36], [37]. Les trous vont finalement se retrouver piégés de façon plus durable selon des niveaux d'énergie proche du milieu du gap (niveaux dit « profonds ») [38]. La densité de pièges profonds est importante près de l'interface à cause de la différence de structure cristalline entre les deux milieux. Par cette succession de mécanismes, une densité de charge est créée à l'interface. Dans le cas d'un transistor, cette accumulation de charges peut altérer ses propriétés de fonctionnement, comme par exemple sa tension de seuil, en modifiant le potentiel électrostatique régnant en son sein. Ces paquets de charges peuvent également modifier la forme de la zone de charge d'espace d'une photodiode et ainsi affecter ses propriétés de collection de charges [39]–[42]. Un signal de type télégraphique aléatoire (RTS) a récemment été observé suite à l'exposition de pixels aux rayons X, connus pour déposer de la dose ionisante [43]. Ce signal RTS est causé à la fois par les états d'interface et par les charges piégées à cette interface.

Un second phénomène lié à la dose ionisante est la création d'états d'interface entre le silicium et l'oxyde de silicium. Ces états d'interface se présentent sous la forme de pièges qui sont en capacité de générer des charges dans le silicium pouvant ensuite être collectées en plus du signal photo-généré [44], [45]. Ces états d'interface sont créés au cours de réactions chimiques avec les impuretés d'hydrogène introduits au cours du processus de fabrication. Pour les détecteurs, ces charges additionnelles, obtenues par diffusion depuis les oxydes lointains ou directement introduits dans la zone de charge d'espace par un oxyde à proximité, contribuent à l'augmentation du courant d'obscurité. Ce signal parasite sera décrit plus en détails dans le chapitre suivant car son étude constitue l'objet de ce manuscrit. Des solutions existent pour atténuer les effets de la dose ionisante, notamment en jouant sur les dimensions du composant, en utilisant des photodiodes enterrées ou des implants pour empêcher les charges parasites d'interférer avec les photo-charges [46], [47].

Effets des déplacements atomiques

Les interactions entre les noyaux atomiques et les particules énergétiques engendrent en grande partie des déplacements atomiques. Au cours de son trajet au sein de la matière, et si l'énergie est suffisante, une seule particule énergétique peut éjecter plusieurs atomes de leur site cristallin. C'est ce que l'on appelle une cascade de dommage. Bien que de nombreux déplacements atomiques puissent être engendrés, une partie d'entre eux vont retrouver un site cristallin et la matière va localement retrouver une structure normale. Cependant, une fraction de ces déplacements ne va pas entrer dans un processus de recristallisation, que l'on appelle plus couramment guérison. Le processus de création de ces cascades ainsi que leur guérison seront détaillés dans la section suivante. Les déplacements atomiques qui n'ont pas guéri vont s'associer entre eux pour former des défauts cristallins stables et souvent électriquement actifs.

En effet, ce réarrangement de la matière va modifier les propriétés électriques du silicium, en introduisant des niveaux intermédiaires d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. Ces niveaux d'énergie sont source de différents mécanismes physiques qui vont altérer les performances du composant touché par ce type de dégradation. La plupart de ces mécanismes sont reliés à la statistique de Shockley-Read-Hall [48] et dépendent également du régime de fonctionnement du composant. On compte cinq mécanismes physiques liés aux défauts cristallins [49], qui provoquent chacun des effets différents dans les composants touchés (Figure II.14) :

- **La génération thermique de paires électron-trou :** elle consiste en l'émission d'un électron situé dans la bande de valence vers le niveau d'énergie introduit dans la bande interdite par le défaut, suivi immédiatement par l'émission de cet électron vers la bande de conduction. En

parallèle, l'électron a laissé derrière lui un trou dans la bande de valence du semi-conducteur. Ce processus est dominant dans le cas où le piège présente un niveau d'énergie profond. Lorsque le pixel d'un imageur est polarisé en inverse pour capturer une scène, la concentration de porteurs de charge devient faible puisqu'une zone de déplétion est créée. Dans ce mode de fonctionnement, les défauts cristallins situés dans cette région deviennent presque exclusivement des centres de génération. Cela provient du fait que la polarisation en inverse force le matériau à être en déplétion. En réponse, le matériau va tenter de retrouver une concentration de porteurs de charge proche de celle à l'équilibre par le biais de la génération de charges par les défauts cristallins. De plus, la génération de charges est amplifiée de manière significative en présence d'un fort champ électrique, ce qui est le cas dans la zone de déplétion des pixels. Enfin, même si un défaut cristallin génère des charges en dehors de la zone de déplétion, ces charges ont tout de même une chance de rejoindre la zone de charge d'espace par diffusion et de pouvoir être collectées. Les charges apportées par ce mécanisme constituent la principale source de l'augmentation du courant d'obscurité et du bruit associé [50]. En augmentant le niveau moyen du courant d'obscurité dans un pixel, les défauts augmentent le signal minimal mesurable par le pixel. Par conséquent, la dynamique utile du pixel est réduite. On note également l'apparition d'évènements extrêmes au sein de la matrice de pixels, à savoir les pixels chauds et les pixels à signal télégraphique aléatoire (Random Telegraph Signal en anglais, abrégé RTS) [51], [52]. Un pixel chaud est un pixel présentant une très forte augmentation du courant d'obscurité. Un tel pixel ne réagit pas de manière linéaire avec l'exposition à la lumière ou ne réagit plus du tout [53]. Il se manifeste par un point blanc visible sur l'image, causé par le grand nombre de charges émises par les défauts qui saturent son puits de potentiel. Un pixel RTS est un pixel que l'on pourrait qualifier de « clignotant ». Le signal enregistré par ce pixel varie fortement au cours du temps. Cette variation brusque du signal mesuré est attribuée à la présence de pièges présentant des états instables dans le temps, faisant varier leur taux de génération. Le courant d'obscurité et les mécanismes induisant son augmentation via les défauts cristallins sont au cœur des travaux de thèse présentés dans ce manuscrit. Les chapitres suivants seront dédiés à l'étude de l'augmentation du courant d'obscurité.

- **Le piégeage des porteurs de charge :** le piégeage d'un porteur de charge se traduit par la capture temporaire de ce dernier par le niveau d'énergie du piège, suivie de sa réémission vers sa bande d'origine (un électron dans le cas de la bande de conduction, un trou pour la bande de valence). Pour que ce mécanisme se mette en place, le niveau de piège doit se situer près de la bande de valence ou de conduction pour que l'agitation thermique seule suffise à un défaut de capturer et d'émettre une charge, c'est-à-dire pour des niveaux d'énergie dits peu profonds. Ce mécanisme a pour principal effet de réduire la conductivité du matériau, puisque les charges sont piégées sur leur parcours (moins de charges sont collectées et leur mobilité est réduite) [54].

- **La recombinaison des paires électron-trou :** la recombinaison est le phénomène inverse de la génération de charges. Au cours de ce processus, un porteur de charge (un électron ou un trou) est capturé par un niveau d'énergie, suivi de la capture d'une charge de signe opposée à la première. Leur rencontre mène à l'annihilation des deux charges. La durée de vie des porteurs minoritaires est dictée par ce mécanisme [55]–[57].

- **La compensation des dopants :** la compensation des dopants est un mécanisme qui se met en place à fort flux de particules chargées (typiquement une fluence de l'ordre de $10^{12}\ p^+/cm^2$

pour les protons). Un tel flux est capable d'introduire un grand nombre de défauts. Les défauts introduits peuvent compenser les charges majoritaires apportées par les atomes dopants en capturant les charges émises par les dopants [58]. La capture de charges tend à diminuer le nombre de porteurs majoritaires, atténuant ainsi le rôle des atomes dopants.

- **L'effet tunnel (assisté par un piège) :** ce mécanisme ne se produit que dans les zones où la barrière de potentiel nécessaire pour franchir la bande interdite du semi-conducteur s'affaiblit. Cette situation se produit généralement dans les zones de fort champ électrique, ce qui est le cas au cœur de la zone de déplétion d'un pixel. La présence de défauts permet d'augmenter la fréquence du phénomène. Celui-ci permet d'assister des porteurs de charge à traverser la bande interdite du semi-conducteur par effet tunnel, c'est-à-dire en traversant la barrière de potentiel. Par ce procédé, le nombre de charges collectées est augmenté [58].

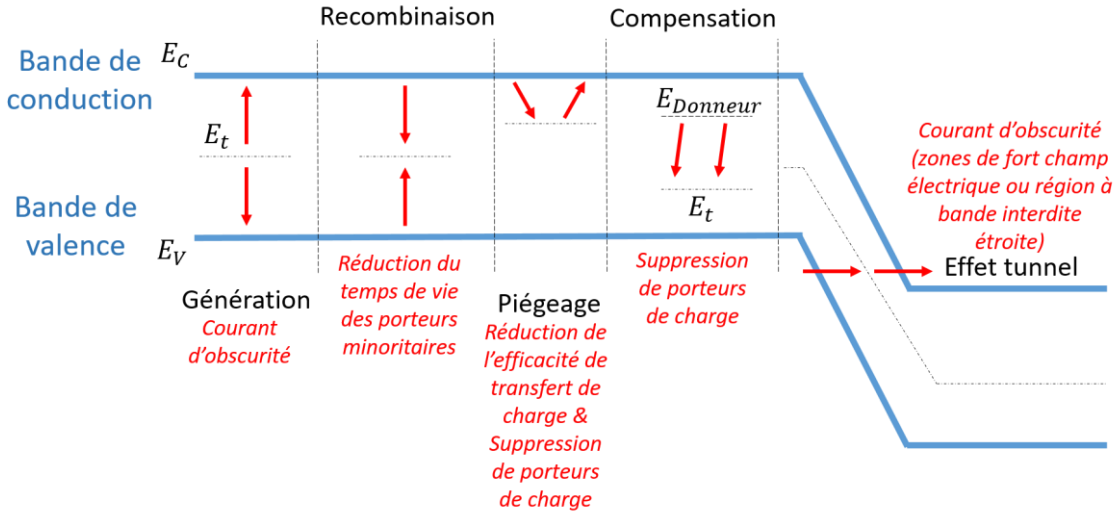


Figure II.14 : Représentation schématique des mécanismes engendrés par la présence de niveaux d'énergie intermédiaires dans la bande interdite du semi-conducteur introduits par les défauts cristallins. Le niveau de piège E_t est représenté en pointillé. Les flèches rouges illustrent la direction des porteurs de charges au cours de chaque processus [23].

II.5 Description à l'échelle microscopique de la dégradation de la matière : les défauts cristallins

Comme nous l'avons vu dans les paragraphes précédents, l'effet principal des défauts cristallins est l'augmentation du niveau moyen d'un signal parasite causant la baisse de la dynamique utile d'un imageur : le courant d'obscurité. Cette section de ce second chapitre est consacrée à la description à l'échelle microscopique, c'est-à-dire à l'échelle des atomes, de la dégradation de la matière cristalline. Jusqu'ici dans ce manuscrit, seuls les différents types d'interaction entre le rayonnement et la matière menant à l'éjection des atomes ont été présentés. Nous verrons dans cette section quels sont les mécanismes de base qui permettent aux interactions coulombiennes nucléaires, élastiques et inélastiques de déplacer les atomes de leur site cristallin. La notion de réorganisation de la matière sera ensuite abordée en étudiant l'évolution structurelle des défauts et leurs propriétés de migration dans la matière. Ce réarrangement structurel de la matière a pour conséquence d'introduire des niveaux d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. Il existe des outils mathématiques, en grande partie basés sur la théorie Shockley-Read-Hall, qui permettent de décrire la capacité des défauts à générer des charges électriques. Cette théorie sera donc développer dans ce chapitre. Ensuite une description des principales techniques d'identification des défauts et de leurs propriétés électriques est proposée, accompagnée de leurs avantages et contreparties. Enfin, un inventaire des

différents défauts cristallins que l'on peut rencontrer dans le silicium à la suite d'une irradiation est établi.

II.5.1 Mécanismes physiques à l'origine des défauts cristallins

Le processus d'introduction d'un défaut cristallin se déroule en plusieurs étapes distinctes : d'abord la particule énergétique va traverser la matière et déplacer des atomes selon une phase dite balistique, puis l'énergie thermique accumulée le long de la trajectoire de la particule et des atomes déplacés va se dissiper pour former des zones de désordre cristallin appelées régions amorphes. Enfin, la matière désordonnée va tenter de retrouver une structure plus stable au cours d'un processus de réarrangement [59]. Cette réorganisation permet à des atomes de retrouver un site cristallin où se loger, mais il arrive également que des défauts de petites tailles s'associent pour atteindre une certaine stabilité. Ces défauts deviennent souvent électriquement actifs et sont responsables de l'augmentation du courant d'obscurité observée dans les pixels après irradiation.

La phase balistique de la création de défauts cristallins

Lors d'une interaction entre une particule incidente (protons, neutrons, électrons, ions) et le noyau d'un atome, l'atome peut être ôté du site cristallin sur lequel il réside. La condition pour que ce phénomène se produise est que l'énergie transmise au noyau soit supérieure ou égale à l'énergie seuil de déplacement T_d, fixé à 21 eV dans le silicium. Cet atome éjecté lors de son interaction avec la particule incidente est appelé couramment PKA pour Primary Knock-on Atom en anglais [55].

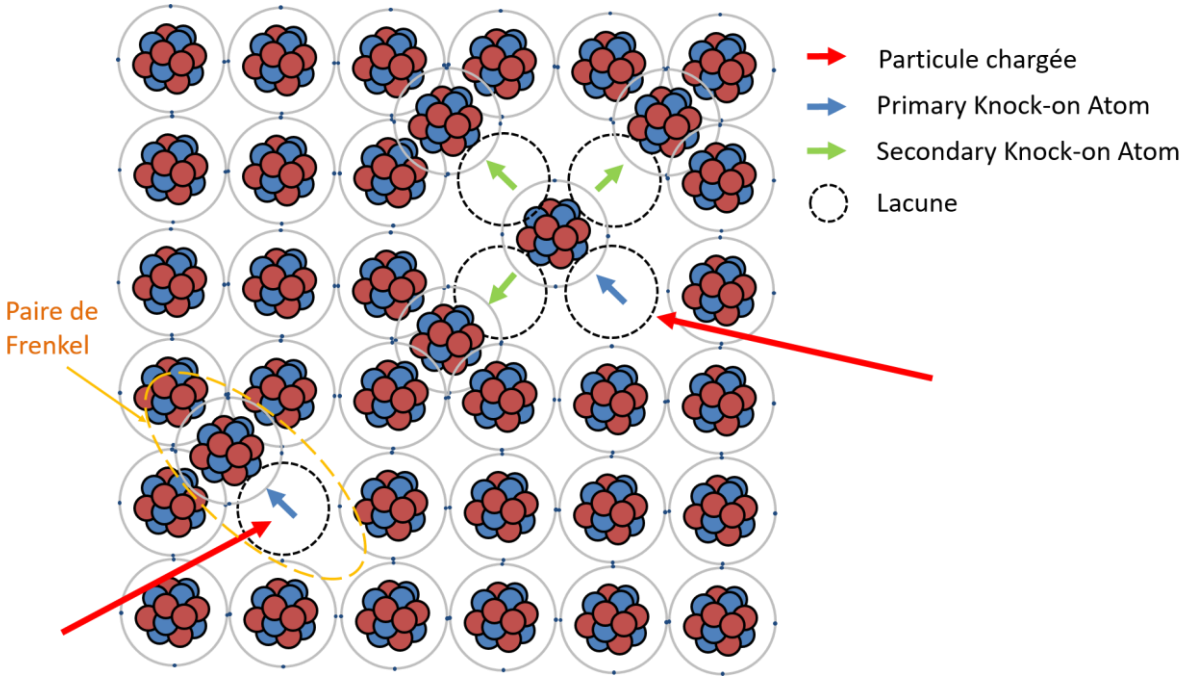


Figure II.15 : Représentation schématique du processus de création d'une paire de Frenkel et d'une cascade de dommage (en haut à droite). La particule chargée (flèche rouge) peut déplacer un atome sur son parcours (PKA, flèche bleue) qui laissera derrière lui un site vacant (lacune). Si l'énergie du noyau de recul est suffisante, il peut à son tour déplacer d'autres atomes (SKA, flèche verte). La distance entre les lacunes et les interstitiels dépendront de l'énergie transmise aux noyaux de recul.

Ce PKA est ensuite animé d'une énergie cinétique que l'on nomme énergie de recul. Si cette dernière est aussi supérieure à l'énergie seuil de déplacement, cet atome a la possibilité de déplacer à son tour un autre atome situé sur son parcours. Ce produit de la collision entre les deux atomes est appelé SKA pour Secondary Knock-on Atom en anglais (Figure II.15). Plus l'énergie du PKA est élevée, plus le

nombre de SKA produits est grand. En fonction de l'énergie du PKA et de celle qu'il a transmise à un SKA, plusieurs mécanismes différents peuvent se mettre en place. Par exemple, si l'énergie transmise au PKA est comprise entre T_d et $2T_d$, l'atome éjecté primairement va migrer de son site sans déplacer d'autres atomes sur son parcours jusqu'à la perte complète de son énergie cinétique. L'atome déplacé va donc se retrouver dans une position alternative à un site cristallin, que l'on appelle interstitielle. Cet atome interstitiel est donc placé entre plusieurs atomes du réseau sans occuper une place normalement définie par les règles de la cristallographie. Cet interstitiel laisse ainsi derrière lui un site vacant dans le réseau, que l'on appelle une lacune. Ce couple lacune-interstitiel est également connu sous le nom de paire de Frenkel.

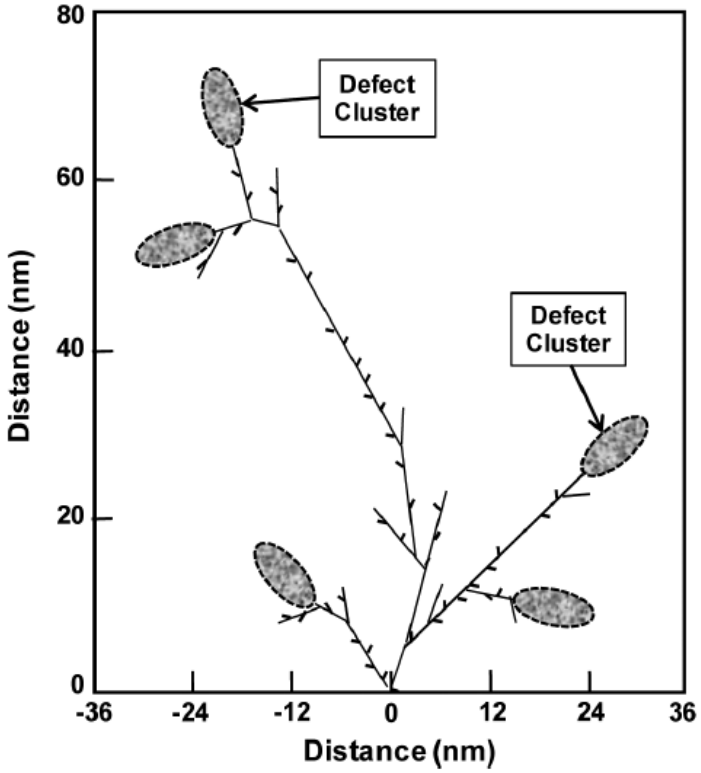


Figure II.16 : Illustration d'une cascade de dommage projetée dans un plan en deux dimensions. Une cascade de dommage peut être comparée à la structure des branches d'un arbre : le tronc représente la trajectoire du PKA, puis les SKA engendrent des ramifications de cet arbre. Une ramification peut se terminer par une zone de forte densité de défauts, appelée généralement cluster. Les noyaux de recul peuvent également créer des défauts isolés sur leur parcours [25].

Ensuite, si l'énergie mise en jeu entre deux atomes est comprise entre $2T_d$ et $3T_d$, le noyau de recul peut déplacer un atome, mais il occupera la place de l'atome qu'il vient d'éjecter. Enfin, si l'énergie mise en jeu dans les collisions est bien supérieure à $3T_d$, une succession de collisions secondaires qui à leur tour peuvent engendrer d'autres collisions va se mettre en place. Ce type d'évènement est qualifié de cascade de dommage primaire ou cascade de déplacements (Figure II.16). La taille de la cascade et le nombre de paires de Frenkel créées dépendent de l'énergie du PKA. On considère que des protons de l'ordre du MeV ou des électrons de quelques MeV ne vont créer principalement que des défauts isolés sur leurs parcours. En revanche, pour des particules plus énergétiques, au-dessus d'une valeur d'environ $10\ MeV$ dans le cas des protons, des cascades de dommage peuvent commencer à être observées [60] (Figure II.17). Cette distinction arbitraire donne une idée générale des processus mis en jeux mais ne constitue pas une règle absolue.

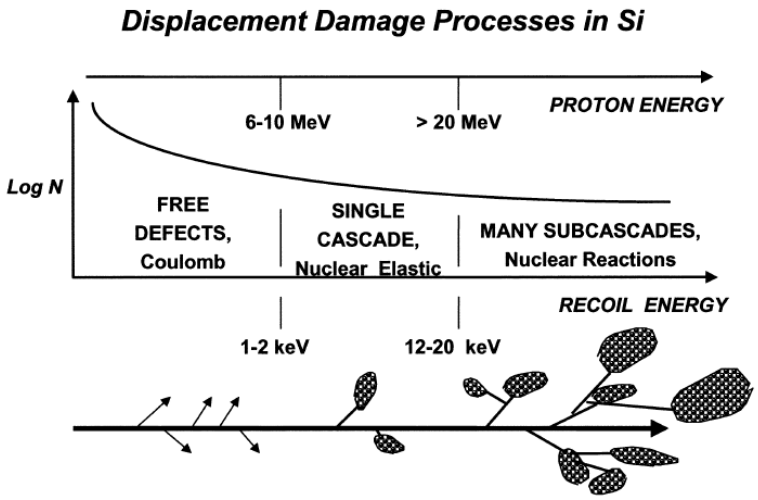


Figure II.17 : En fonction de l'énergie du proton, on ne s'attend pas à observer la même répartition des défauts. L'énergie transmise au noyau de recul va déterminer cette répartition, soit en défauts isolés, en cascade simple ou succession de sous-cascades [60].

Le pic thermique : création de poches amorphes

A la suite de l'introduction de la cascade de déplacements primaire, dans un laps de temps de l'ordre de la femtoseconde ($10^{-15}s$), une augmentation locale de la température induite par le passage de la particule est observée. Cette accumulation d'énergie thermique le long de la trace de la particule est ensuite dissipée en faisant vibrer les atomes situés à proximité [61]. Cette phase est appelée pic thermique (ou thermal spike en anglais). Au cours de cette phase, la quantité d'énergie thermique déposée localement dans un faible volume peut être gigantesque. Kai Nordlund a converti l'énergie thermique accumulée dans des métaux tel que le cuivre en unité de température en utilisant les lois de la thermodynamique et des simulations de dynamique moléculaire, et a obtenu une température thermodynamique d'environ $10^4 K$ durant quelques picosecondes [62]. Cette valeur étant calculée dans le cadre de processus se déroulant hors équilibre, elle ne correspond donc pas exactement à la température que l'on mesurerait dans le système. Cette température serait moins élevée dans un matériau tel que le silicium du fait de sa plus faible densité atomique (le silicium est 4 fois moins dense que le cuivre à titre de comparaison), mais souligne tout de même l'intensité des processus énergétiques qui se déroulent à la suite d'une irradiation. La température de fusion du silicium pouvant localement être atteinte (un peu moins de $1\,690\,K$), des poches amorphes sont créées au sein de la cascade de dommage (Figure II.18).

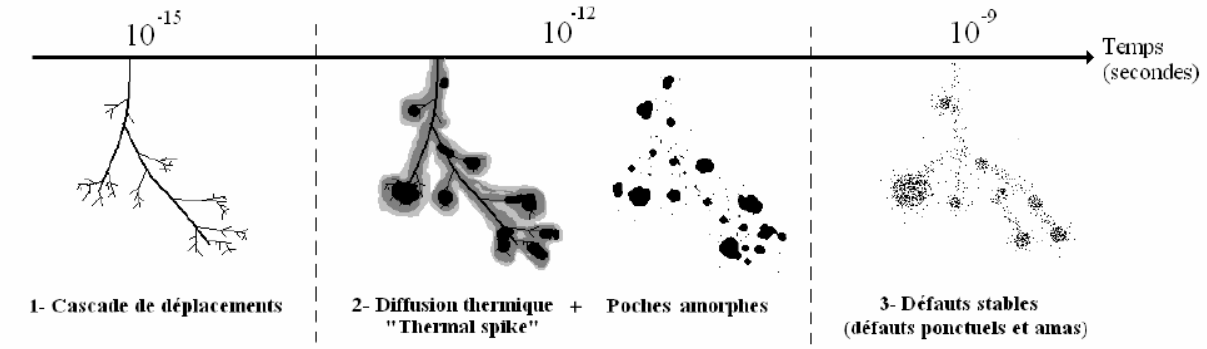


Figure II.18 : Chronologie des évènements conduisant à l'introduction de défauts stables électriquement actifs [5], accompagnée d'une illustration associée à chaque étape clé.

Le défaut cristallin électriquement actif

Très rapidement, environ 50 % de ces poches amorphes vont se recristalliser au bout de quelques picosecondes [63]. Ce pourcentage dépend cependant de l'énergie du PKA. Un PKA possédant une énergie cinétique inférieure de quelques keV (indépendamment de la nature de la particule qui a engendré ce PKA) va plutôt produire des défauts isolés le long de son parcours. En revanche au-delà de cette valeur, des amas peuvent commencer à se former dans la matière et peuvent atteindre des tailles de l'ordre d'une dizaine de nanomètres voire une centaine dans les cas les plus extrêmes. Par extension de ce phénomène, la distance moyenne entre les paires lacune-interstitiel augmente avec l'énergie du PKA. Les lacunes auront plutôt tendance à se situer en amont de la cascade de déplacements (localisées près des sites impactés) alors que les interstitiels finiront leurs courses aux extrémités de la cascade. La recombinaison va essentiellement dépendre de sa densité de paires de Frenkel.

Ce réarrangement permet de minimiser l'énergie potentielle du réseau d'atomes complètement désorganisé dans les régions amorphes. Les interstitiels et les lacunes qui n'ont pas effectué une recombinaison vont naturellement migrer dans la matière par diffusion thermique. Ces entités ne sont pas stables, c'est-à-dire qu'elles vont parcourir la matière jusqu'à rencontrer une autre entité qui va minimiser son énergie potentielle. Par exemple, une lacune peut rencontrer un interstitiel pour réaliser une recombinaison : l'interstitiel retrouvera un site cristallin vacant et l'énergie potentielle sera minimisée. D'une autre manière, une lacune peut rencontrer une autre lacune et interagir avec elle. Ces deux lacunes peuvent former une liaison pour ne former qu'une seule entité : la bilacune. La bilacune est ce que l'on appelle un défaut complexe et résulte de l'association de deux défauts ponctuels [64]. Ce défaut est connu pour introduire des niveaux d'énergie intermédiaires dans la bande interdite du semi-conducteur contribuant fortement à l'augmentation du courant d'obscurité (Figure II.19). Les interstitiels peuvent également interagir de la même façon. Des entités qui n'étaient pas présentes dans la matière avant irradiation commencent à se former quelques instants après irradiation et évoluent avec le temps pour adopter d'autres configurations ou s'associer avec d'autres défauts. Cette agrégation de défauts est appelée amas de défauts (ou clusters en anglais) [65]. L'ensemble de ces processus est décrit dans le paragraphe II.5.3. Un inventaire des défauts couramment rencontrés dans le silicium sera présenté dans le paragraphe II.5.5 de ce chapitre. Une description mathématique de l'activité électrique d'un défaut cristallin est proposée dans le paragraphe suivant, notamment au travers de la théorie Shockley-Read-Hall.

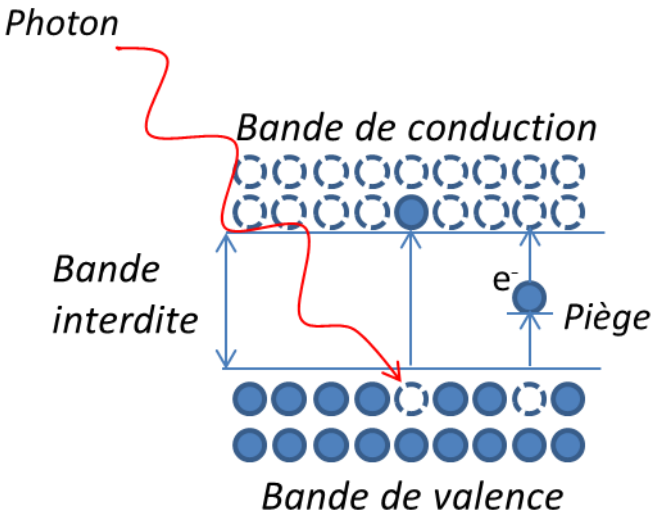


Figure II.19 : L'introduction de niveaux d'énergie intermédiaires augmente la probabilité qu'un porteur de charge traverse la bande interdite du semi-conducteur sans l'aide des photons. La théorie de Shockley-Read-Hall permet d'estimer la quantité de porteurs de charges émis par ces pièges.

II.5.2 Propriétés électriques des défauts cristallins : la théorie Shockley-Read-Hall

Lorsque des défauts sont introduits, qu'ils soient liés aux impuretés ou aux atomes dopants provenant du processus de fabrication (cf chapitre I, paragraphe I.5) ou bien encore des interactions entre le rayonnement et la matière, ils vont modifier les propriétés électriques du semi-conducteur exposé aux radiations. Le terme « électriquement actif » vient du fait que les défauts vont introduire des niveaux d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur [66]. Les porteurs de charge contenus dans les bandes de valence et de conduction vont ainsi interagir avec ces niveaux d'énergie selon les processus décrits dans le paragraphe II.4. Ces défauts sont donc des lieux où de nouveaux mécanismes physiques peuvent se mettre en place. La théorie de Shockley-Read-Hall [48] (souvent abrégé SRH) permet de décrire de manière mathématique ces phénomènes physiques. Nous nous concentrerons essentiellement dans ce manuscrit sur la génération thermique de charges électriques mais dans un premier temps, la description mathématique de la quantité de charges présentes dans chaque bande énergétique d'un semi-conducteur idéal, sans dopants ni impuretés ou défauts, est proposée. Nous verrons dans un second temps les conséquences de l'introduction de défauts sur le comportement électrique d'un semi-conducteur, avant de finir ce paragraphe sur les paramètres essentiels qui régissent le mécanisme de génération de paires électron-trou au sein d'un semi-conducteur contenant des défauts électriquement actifs.

Le semi-conducteur idéal ou intrinsèque

Le semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur idéal dans lequel aucun dopage n'a été appliqué et où le taux d'impuretés est considéré comme négligeable. Afin de comprendre le comportement électrique d'un semi-conducteur pur, il est nécessaire d'évaluer les populations d'électrons et de trous qui résident dans chacune de ses bandes d'énergie. Ceci revient à effectuer un bilan des charges dans chaque bande. Une grandeur permettant d'effectuer ce bilan est la densité d'états. On parle de densité effective d'états énergétique $n(E)dE$, avec E l'énergie électronique et dE la gamme d'énergie considérée. La densité effective d'états énergétiques correspond au nombre de sites disponibles pour les électrons ou les trous dans leur bande respective. On note $n_C(E)$ la densité effective d'états dans la bande de conduction (pour les électrons) et $n_V(E)$ la densité effective d'états dans la bande de valence (pour les trous), toutes deux définies par tranches d'énergie dE, exprimées en $cm^{-3}eV^{-1}$ [67] :

$$n_C(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E - E_C)^{1/2} \tag{II.11}$$

$$n_V(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E_V - E)^{1/2} \tag{II.12}$$

Avec $\hbar$ la constante de Planck normalisée, et où les termes E_C et E_V désignent respectivement le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence, tandis que les termes m_e^* et m_h^* correspondent à la masse effective des électrons et des trous respectivement. La notion de masse « effective » vient du fait que les électrons émis dans la bande de conduction sont souvent appelés porteurs libres, mais dans le cas des semi-conducteurs cette appellation constitue un abus de langage. Dans les semi-conducteurs, les porteurs de charges ne sont pas complètement libres, à l'inverse des métaux. Pour être précis, ces charges devraient être qualifiées de « quasi-libres » ou que ce sont des « quasi-particules » libres. Cela s'explique par le fait que les charges sont toujours liées aux atomes du

réseau, et subissent leur influence. La notion « effective » traduit l'ensemble des forces agissant sur ces porteurs de charge et qui joue directement sur leur mobilité en accroissant leur inertie. Cependant pour des raisons de simplicité, nous emploierons le terme « libre » dans la suite de ce manuscrit.

La présence ou non d'un électron sur un niveau d'énergie E est une définition probabiliste, il faut donc en tenir compte. A l'équilibre thermodynamique, cette probabilité est décrite par la fonction de Fermi-Dirac [68], [69] :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \tag{II.13}$$

Avec E_F l'énergie de Fermi et k_B la constante de Boltzmann. Etant donné que la présence d'un trou constitue par définition l'évènement contraire de la présence d'un électron, et que ces deux évènements sont disjoints, on peut très simplement déduire la probabilité de présence d'un trou à partir de l'équation (II.13) :

$$f_h(E) = 1 - f_n(E) \tag{II.14}$$

En intégrant les équations (II.13) et (II.14) sur l'ensemble des énergies possibles dans chaque bande d'énergie, on obtient le nombre d'électrons dans la bande de conduction n et le nombre de trous dans la bande de valence p à l'équilibre par unité de volume [70] :

$$n = \int_{E_C}^{+\infty} n_C(E)\, f_n(E)\, dE \tag{II.15}$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} n_V(E)\, f_h(E)\, dE \tag{II.16}$$

En considérant que le semi-conducteur n'est pas dégénéré (le niveau de Fermi reste dans la bande interdite du semi-conducteur) et en utilisant l'approximation de Boltzmann, on peut résoudre les intégrales et calculer les termes n et p :

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi}}{k_B T}\right) \tag{II.17}$$

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_V}{k_B T}\right) \tag{II.18}$$

Avec N_C et N_V les densités d'états équivalentes dans la bande de conduction et dans la bande de valence respectivement, définies comme suit :

$$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \tag{II.19}$$

$$N_V = 2\left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \tag{II.20}$$

Le niveau de Fermi intrinsèque dépend de E_C et E_V ainsi que de N_C et N_V, et est défini selon la formulation [49] :

$$E_{F_i} = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2}\ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right) \tag{II.21}$$

Il faut préciser qu'il ne faut pas confondre l'énergie de Fermi E_F et le niveau de Fermi intrinsèque E_{F_i}. Ces deux grandeurs sont égales à $0\ K$ mais ne le sont plus à toute autre température [1]. A l'équilibre thermodynamique, la concentration intrinsèque de porteurs de charge n_i est égale à la concentration d'électrons dans la bande de conduction n et de trous dans la bande de valence p :

$$n_i = n = p = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{F_i}}{k_B T}\right) = N_V \exp\left(-\frac{E_{F_i} - E_V}{k_B T}\right) \tag{II.22}$$

En multipliant la densité d'électrons et de trous ensemble, on obtient une expression indépendante du niveau de Fermi intrinsèque, connue sous le nom de loi d'action de masse :

$$n_i^2 = np = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{k_B T}\right) = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \tag{II.23}$$

Où E_g correspond à la largeur de la bande interdite du semi-conducteur (exprimée en eV). De cette manière, nous pouvons réécrire l'expression de n_i (équation (II.22)) en fonction de l'énergie du gap du semi-conducteur :

$$n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_C N_V}\exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \tag{II.24}$$

[1] L'énergie de Fermi E_F représente l'augmentation d'énergie apportée à un système de fermions (ici d'électrons) par rapport à l'état fondamental lorsqu'une particule est ajoutée au système de fermions. Le niveau de Fermi intrinsèque E_{F_i} traduit plutôt la notion de répartition des électrons sur un niveau d'énergie E par rapport à ce niveau. Le niveau de Fermi est souvent comparé à la notion de potentiel chimique.

On peut également réécrire les densités de porteurs libres (équations (II.17) et (II.18)) comme une fonction de la densité de porteurs intrinsèque :

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{F_i}}{k_B T}\right) \tag{II.25}$$

$$p = n_i \exp\left(-\frac{E_F - E_{F_i}}{k_B T}\right) \tag{II.26}$$

Il est connu dans la littérature que la largeur de la bande interdite d'un semi-conducteur varie avec la température. La loi permettant de décrire cette variation de l'énergie du gap avec la température est une loi expérimentale donnée par *Varshni* [71] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \tag{II.27}$$

Où α et β sont des coefficients déterminés expérimentalement pour un semi-conducteur. Plusieurs formulations théoriques de la variation E_g avec la température existent mais aucune ne semble couramment admise aujourd'hui [72]. Une liste des valeurs de α et β pour différents semi-conducteurs [73] est proposée dans le Tableau II.1.

	Germanium (Ge)	Silicium (Si)	Arséniure de gallium (GaAs)
$E_g(0)\ [eV]$	0,7437	1,166	1,519
$\alpha\ [eV/K]$	$4{,}77 \times 10^{-4}$	$4{,}73 \times 10^{-4}$	$5{,}41 \times 10^{-4}$
$\beta\ [K]$	235	636	204

Tableau II.1 : Liste des coefficients utilisés pour décrire la dépendance en température de la largeur de la bande interdite de différents semi-conducteurs souvent rencontrés dans les imageurs.

Le semi-conducteur extrinsèque

La notion extrinsèque regroupe les cas où le semi-conducteur est dopé ou présente un nombre d'impuretés ou de défauts cristallins non négligeable. Ces espèces étrangères au réseau cristallin vont introduire des niveaux d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. Ces niveaux d'énergie vont modifier les densités de porteurs de charge dans les bandes de conduction et de valence. A cause des mécanismes induits par les pièges, l'équilibre thermodynamique n'est plus respecté et par conséquent la loi d'action de masse n'est plus valable (on est dans le cas $n_i^2 \neq np$). Pour pallier cela, le matériau va interagir avec les pièges pour tendre vers l'équilibre. En fonction de la région dans laquelle se trouvent les pièges, des mécanismes opposés vont se mettre en place, la génération ou la recombinaison de charge. Par exemple, un défaut situé dans une zone dépeuplée, là où la densité de porteurs libres est très inférieure à la densité de porteurs intrinsèque ($n_i^2 > np$) va avoir tendance à générer des charges pour pallier ce déficit. A l'inverse, dans les zones où la densité de charges libres dominent la densité de porteurs intrinsèque ($n_i^2 < np$), les pièges vont avoir tendance à déclencher des recombinaisons pour réduire l'excès de porteurs. La théorie ou statistique de Shockley-Read-Hall permet de donner une description mathématique des phénomènes de génération et de recombinaison des porteurs de charges par l'intermédiaire des niveaux d'énergie.

Tout comme les niveaux d'énergie dans les bandes de valence et de conduction, un porteur de charge possède une probabilité d'occupation d'un niveau de piège E_t décrite par la statistique de Fermi-Dirac [74] :

$$f_n(E_t) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_t - E_F}{k_B T})} \tag{II.28}$$

Pour déterminer quelles quantités d'électrons et de trous sont échangées avec les pièges entre les bandes de valence et de conduction, il est nécessaire d'établir un bilan de ces échanges en fonction d'une concentration de défauts N_t. A partir de ces informations, nous pouvons en déduire la concentration de niveaux de pièges occupés par des électrons n_t et par des trous p_t :

$$n_t = N_t \, f_n(E_t) \tag{II.29}$$

$$p_t = N_t \, (1 - f_n(E_t)) \tag{II.30}$$

Moll et *Sze* [75], [76] ont établi une formulation de ces échanges à partir des travaux de *W. Shockley*, *W.T. Read* et *R.N. Hall*, en définissant des taux de capture et d'émission de charges. On compte quatre mécanismes qui entrent en compétition au cours des transferts de charge avec des taux différents (ces mécanismes sont illustrés en Figure II.20) :

- L'émission d'électrons dans la bande de conduction : $R_{e,e} = n_t e_n$
- La capture d'un électron vers un état inoccupé : $R_{c,e} = p_t n c_n$
- L'émission d'un trou vers la bande de valence (équivalent à la capture d'un électron depuis la bande de valence) : $R_{e,h} = p_t e_p$
- La capture d'un trou vers un état occupé par un électron (équivalent à l'émission d'un électron vers la bande de valence) : $R_{c,h} = n_t p c_p$

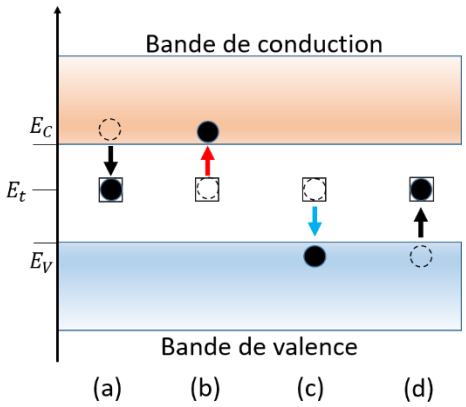


Figure II.20 : Représentation schématique des différents échanges qui se mettent en place entre la bande de conduction, de valence et un niveau de piège :

(a) Capture d'un électron par le piège ($R_{c,e}$)

(b) Emission d'un électron par le piège ($R_{e,e}$)

(c) Capture d'un trou par le piège ($R_{c,h}$)

(d) Emission d'un trou dans la bande de valence ($R_{e,h}$)

Une recombinaison est la succession de (a) puis de (c), la génération de (b) suivie de (d).

Avec $e_{n,p}$ le taux d'émission d'électrons et de trous respectivement, $c_{n,p}$ les coefficients de capture d'électrons et de trous respectivement. Pour être plus précis, ces coefficients sont égaux à $c_{n,p} = \sigma_{n,p} v_{th_{n,p}}$, avec $\sigma_{n,p}$ la section efficace de capture des électrons et des trous et $v_{th_{n,p}}$ la vitesse

thermique des électrons et des trous respectivement. Au cours du temps, les pièges ne sont pas constamment occupés par des électrons ou des trous. Dans le cas des électrons, les pièges sont occupés par ces porteurs lorsqu'un électron est capturé vers un niveau occupé (processus avec le taux $R_{c,e}$) et lorsqu'un trou est émis vers la bande de valence (processus avec le taux $R_{e,h}$). Du point de vue mathématique, la variation du nombre de pièges occupés par des électrons en fonction du temps est décrite selon :

$$\frac{dn_t}{dt} = -R_{e,e} + R_{c,e} - R_{c,h} + R_{e,h} = -n_t e_n + p_t n c_n - n_t p c_p + p_t e_p \tag{II.31}$$

Selon le principe de réversibilité (plus connu sous son nom anglais « principle of detailed balance ») [77], à l'équilibre la concentration d'électrons libres dans la bande de conduction et la concentration de trous libres dans la bande de valence doivent être égales. Pour satisfaire ces conditions, le taux d'occupation des pièges par les électrons doit être constant dans le temps, et les processus de capture et d'émission d'un même porteur de charge doivent se réaliser avec un même taux. On obtient donc les égalités suivantes :

$$\frac{dn_t}{dt} = 0 \quad \& \quad R_{e,e} = R_{c,e} \quad \& \quad R_{e,h} = R_{c,h} \tag{II.32}$$

En remplaçant chaque taux par son expression, nous pouvons réécrire ces égalités sous la forme :

$$n_t e_n = p_t n c_n \tag{II.33}$$

$$p_t e_p = n_t p c_p \tag{II.34}$$

Nous remplaçons ensuite chaque terme connu par son expression détaillée pour isoler e_n et e_p :

$$e_n = \frac{p_t n c_n}{n_t} = \frac{N_t\,(1 - f_n(E_t))\, n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{F_i}}{k_B T}\right) \sigma_n v_{th_n}}{N_t\, f_n(E_t)} = \sigma_n v_{th_n} n_i \exp\left(\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T}\right) \tag{II.35}$$

$$e_p = \frac{n_t p c_p}{p_t} = \frac{N_t\, f_n(E_t) n_i \exp\left(-\frac{E_F - E_{F_i}}{k_B T}\right) \sigma_p v_{th_p}}{N_t\,(1 - f_n(E_t))} = \sigma_p v_{th_p} n_i \exp\left(-\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T}\right) \tag{II.36}$$

On peut également écrire n_t comme une fonction de e_n et e_p :

$$n_t = N_t \frac{c_n n + e_p}{e_n + c_n n + c_p p + e_p} \tag{II.37}$$

Maintenant que nous avons exprimé chaque terme du bilan des échanges entre chaque bande, nous pouvons déterminer le taux de génération thermique de paires électron-trou. Ce taux de génération de paires électron-trou est défini comme le taux d'électrons générés par agitation thermique vers la bande de conduction auquel on a retranché la contribution du taux de capture des électrons par les pièges, ce qui est égal au taux d'émission de trous auquel on soustrait le taux de capture des trous par les pièges. Le taux de génération volumique U_G (avec l'unité $paires.s^{-1}.cm^{-3}$) s'exprime avec la formulation suivante :

$$U_G = R_{e,e} - R_{c,e} = R_{e,h} - R_{c,h} \tag{II.38}$$

En remplaçant chaque terme par son expression, on obtient [49] :

$$U_G = n_t e_n - p_t n c_n = N_t \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th_n} v_{th_p} (n_i^2 - np)}{\sigma_n v_{th_n} \left(n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T} \right) \right) + \sigma_p v_{th_p} \left(p + n_i \exp\left(-\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T} \right) \right)} \tag{II.39}$$

Cette expression permet de souligner l'importance du niveau de Fermi intrinsèque : plus le niveau d'énergie du piège E_t est proche du niveau intrinsèque de Fermi E_{F_i}, plus le taux de génération de paires électron-trou sera grand. A température ambiante, le niveau intrinsèque de Fermi est proche du milieu de la bande interdite du semi-conducteur, c'est pourquoi on évalue souvent la capacité d'un piège à générer des charges par rapport à l'écart entre son niveau d'énergie et le milieu de la bande interdite. Un raisonnement analogue avec les trous mène à la même formulation du taux de génération. Aussi, le taux de recombinaison U_R est l'exact opposé du taux de génération : $U_G = -U_R$. Il arrive parfois qu'un taux de recombinaison négatif soit donné dans des logiciels estimant les taux d'échange de porteurs entre les bandes d'énergie en présence de pièges. Ce taux de recombinaison négatif correspond bien à une grandeur physique, qui n'est autre que le taux de génération.

Au cours de ces travaux de thèse, l'accent fut porté sur les défauts générant des charges dans la zone sensible d'un pixel, c'est-à-dire la zone en déplétion de la jonction PN. Dans ces conditions particulières, nous pouvons simplifier l'expression du taux de génération de paires électron-trou d'un défaut, puisque les densités de de porteurs libres sont très inférieures à la densité intrinsèque de porteurs ($np \ll n_i^2$) [74] :

$$U_G = N_t \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th_n} v_{th_p} n_i}{\sigma_n v_{th_n} \exp\left(\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T} \right) + \sigma_p v_{th_p} \exp\left(-\frac{E_t - E_{F_i}}{k_B T} \right)} = N_t \frac{e_n e_p}{e_n + e_p} = N_t \, g \tag{II.40}$$

Avec g le taux de génération de paires électron-trou d'un seul défaut (exprimé en $paires.s^{-1}$). Le taux de génération de paires électron-trou est donc une fonction des sections efficaces de capture d'électron et de trou, de leur vitesse thermique, du niveau du piège ainsi que de la concentration de défauts. La température est également un facteur déterminant dans l'évaluation du taux de génération. Le taux de génération de paires électron-trou d'un piège est une grandeur physique importante puisqu'elle permet d'estimer la quantité de charges que va produire une population de défauts, charges qui peuvent être collectées et contribuer à l'augmentation du courant d'obscurité. Aussi, la présence d'un champ électrique induit une augmentation du taux de génération de paires

électron-trou. Les mécanismes responsables de ces effets de champ électrique seront décrits dans le chapitre suivant.

II.5.3 Propriétés et évolution structurelles des défauts cristallins : la réorganisation de la matière

La plupart des défauts ponctuels créés après irradiation vont avoir tendance à se recombiner ou s'associer en complexe pour minimiser leur énergie potentielle. L'ensemble des processus liés à la recombinaison et l'association de défauts est regroupé sous le terme « réorganisation » de la matière. Nous allons voir dans cette section comment sont classés les défauts cristallins, quelles peuvent être leur topologie, et quelles en sont les conséquences sur les niveaux d'énergie de ces défauts.

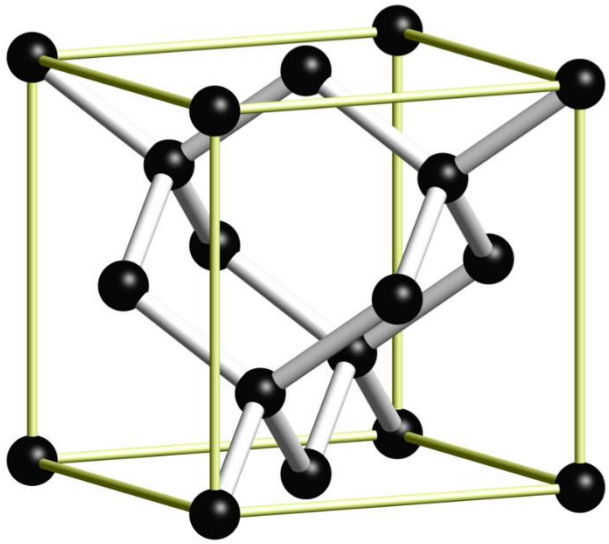


Figure II.21 : Maille cristallographique élémentaire du silicium. Les atomes de silicium sont arrangés selon une maille de type diamant.

La classification des défauts cristallins

Une fois que les paires de Frenkel ont recombiné, les lacunes et interstitiels restant sont qualifiés de défauts primaires, car leur création est la conséquence de l'interaction entre la particule chargée et les atomes du réseau. Les lacunes et les interstitiels font partie de la catégorie des défauts ponctuels, car une seule espèce est mise en jeu dans ce type de défauts (Figure II.22). On compte également les impuretés telles que l'oxygène, le carbone ou encore l'hydrogène dans les défauts ponctuels, ainsi que les atomes dopants qui n'auraient pas trouvé un site substitutionnel où se loger au cœur du réseau. Des défauts tels que les lacunes et interstitiels sont instables, cela signifie que leur existence sous forme ponctuelle ne leur suffit pas pour minimiser leur énergie potentielle et être piégé dans le réseau d'atomes, et ainsi rester à l'endroit où ils ont été créés.

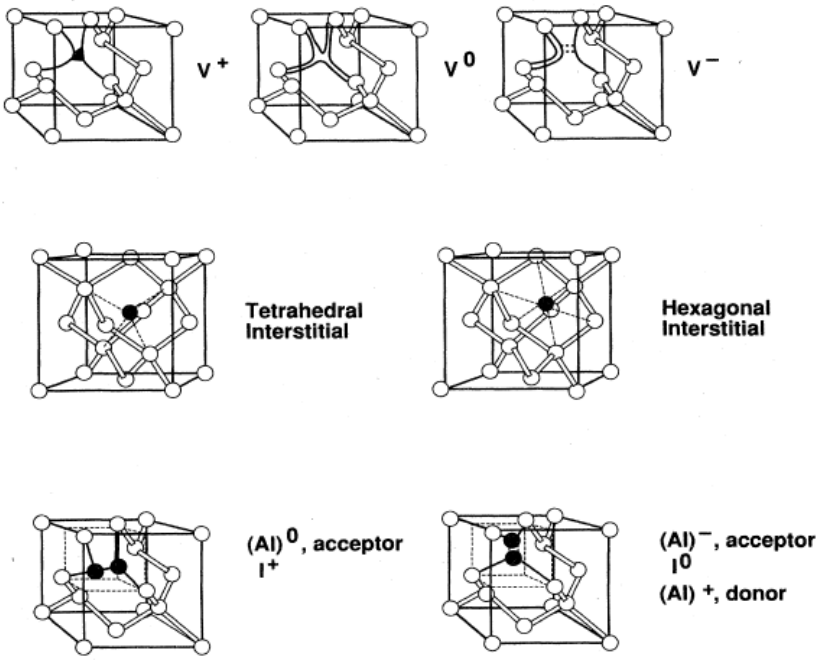


Figure II.22 : Illustration de différents défauts ponctuels dans une maille élémentaire de silicium. Un même défaut ponctuel peut se présenter sous différentes configurations, en fonction des liaisons énergétiques qu'il a établi avec son environnement proche [78].

Pour minimiser leur énergie, les lacunes et les interstitiels vont migrer et se déplacer de proche en proche pour trouver un site (parfois appelé puits) favorable. Si une lacune et un interstitiel ne se rencontrent pas au cours d'une recombinaison, ils peuvent alors s'associer avec une autre espèce et former ce que l'on appelle un défaut complexe. La nature de ces défauts complexes est très variée : un complexe peut se former à partir de deux lacunes ou plus, deux interstitiels ou plus, de plusieurs espèces d'impuretés, d'une lacune et d'un dopant ou d'un mélange de tous les complexes énumérés précédemment (Figure II.23). En fonction de son niveau d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur, on peut distinguer les pièges profonds et ceux qui ne le sont pas. Dans le cas du silicium, on peut considérer qu'un piège profond est un niveau situé à plus de $0.1\ eV$ d'une des extrémités des bandes de valence ou de conduction. En fonction des processus de réorganisation que vont subir les défauts, leurs structures et leurs propriétés électriques vont évoluer au cours du temps.

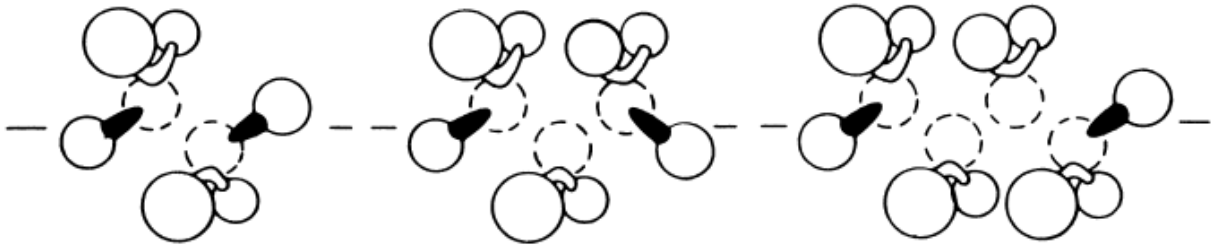


Figure II.23 : Illustration d'un défaut complexe, ici établi à partir de l'agrégation de deux lacunes (bilacune, à gauche), de trois lacunes (tri-lacune, au centre) et de quatre lacunes (quadri-lacune, à droite). Les complexes lacunaires sont couramment rencontrés dans le silicium après irradiation. Des complexes similaires existent pour les interstitiels ainsi que pour certaines espèces d'impuretés [66]. La migration des défauts ponctuels est le moteur de la création de ce type de défauts.

La migration des défauts : moteur de la réorganisation de la matière

La diffusion des interstitiels et des lacunes est le moteur de la production des défauts complexes. Chaque espèce possède ses propres caractéristiques de diffusion et sera donc plus ou moins mobile en fonction de ces propriétés. On décrit généralement la diffusion des défauts comme la succession de sauts entre les différents sites cristallins disponibles. Au cours d'un saut, un défaut va donc effectuer une transition d'un état initial vers un état final (Figure II.24). Cette transition s'effectue

selon une probabilité constante (assimilable à nombre de transitions constant par unité de temps) et défini. On suppose que dans le cas de la migration des défauts, la transition effectuée par un défaut ne conditionne pas la suivante : on dit alors que le système perd la mémoire [79]. Cela signifie que le défaut ne se souvient pas de l'état dans lequel il était avant d'effectuer un saut, car le temps de saut est très court par rapport au temps entre deux sauts consécutifs. Ceci permet de considérer que les sauts sont réalisés indépendamment les uns des autres. La migration d'un défaut i peut être décrite selon un processus de premier ordre activé thermiquement avec une loi d'Arrhenius [80] (loi exponentielle décroissante) :

$$W_i = w_{0_i} \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right) \tag{II.41}$$

Avec W_i la fréquence de saut d'un défaut i (fs^{-1}). Le terme E_m correspond à l'énergie de migration (eV) qui définit la hauteur de la barrière de potentiel que doit franchir le défaut pour migrer. Le terme w_{0_i} est la fréquence intrinsèque de saut ou plus couramment facteur de fréquence (fs^{-1}), égale au nombre de tentatives de saut effectuées par le défaut pour franchir la barrière de potentiel par unité de temps et T la température du système. Ainsi, W_i est similaire à une probabilité de saut par unité de temps. On note également que le temps moyen entre deux sauts successifs d'un défaut τ_i peut se calculer aisément connaissant W_i [81] :

$$\tau_i = \frac{1}{W_i} \tag{II.42}$$

Les paramètres E_m et w_{0_i} sont déterminés expérimentalement [66], [82] ou par simulation [83]–[86] et caractérisent la capacité de chaque espèce à migrer au sein du silicium. Ces paramètres servent à paramétrer l'algorithme de réorganisation de la matière développé au cours de la thèse décrit dans les chapitres V et VI de ce manuscrit.

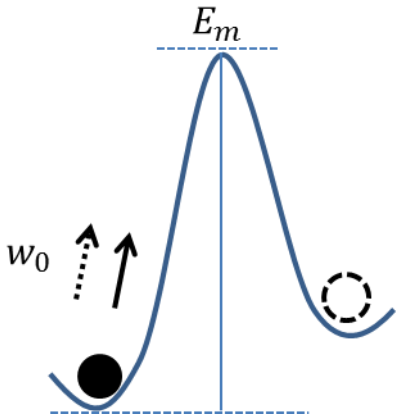


Figure II.24 : Illustration schématique simple du processus de migration. Le défaut, représenté par une sphère noire, doit franchir une barrière de potentiel de hauteur E_m pour arriver dans son état final. Cependant, le passage de cette barrière ne se réalise pas forcément au premier essai. Le défaut retente le saut avec une fréquence w_0. Une fois la migration terminée, le défaut arrive à son état final, ici représentée avec une sphère en pointillé.

Si ces paramètres sont importants pour étudier la cinétique de diffusion d'un défaut, la température est le dénominateur commun à la migration de tous les défauts. La température est en effet un paramètre important, puisqu'il va augmenter l'efficacité de la réorganisation de la matière en augmentant le nombre de sauts effectués par les défauts. C'est d'ailleurs pour cette raison qu'après avoir irradié un composant pour des tests, on élève la température du composant, pour forcer les défauts à se réorganiser et disparaître avec la température après irradiation au cours du temps [55]. Ce processus est appelé la guérison thermique des défauts (thermal annealing en anglais).

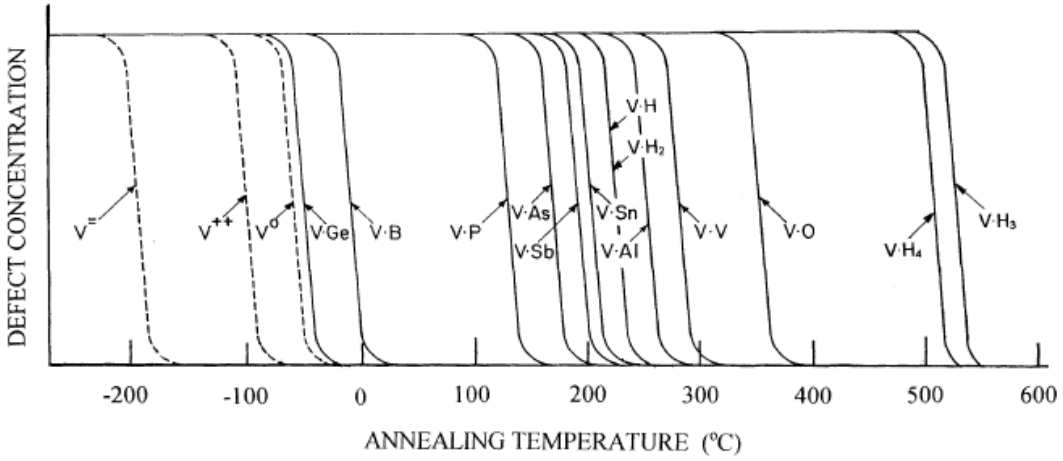


Figure II.25 : Evolution de la concentration des lacunes (suivant leur état de charge) et des complexes lacunaires en fonction de la température. Plus la température augmente, plus la concentration de défauts complexes comportant de plus en plus d'éléments diminue. L'augmentation de la température permet de déclencher la migration de certaines espèces de défauts Ainsi des défauts peuvent trouver des sites de dissociation ou de recombinaison, tandis que d'autres vont pouvoir s'agglomérer avant de disparaître à leur tour à plus haute température.

Les lacunes et les interstitiels sont connus pour être mobiles même à faible température (Figure II.25 et Figure II.26). L'interstitiel de silicium est même tellement mobile (à partir de $4{,}2\ K$) qu'il n'est quasiment pas observable à l'état seul [66]. Cette forte mobilité implique que la lacune et l'interstitiel sont instables et électriquement inactifs [56]. Les lacunes sont connues pour être responsables du phénomène d'augmentation transitoire de la diffusion, plus connue par son abréviation anglais TED pour Transient Enhanced Diffusion. Au cours de ce mécanisme, une lacune s'associe à un atome avec une capacité de migration inférieure à la lacune (typiquement l'atome de bore). Par ce biais, l'atome en question se voit conférer une mobilité beaucoup plus élevée que lorsqu'il était seul. Par conséquent, l'atome parcourt une plus grande distance par unité de temps au sein du réseau et migre jusqu'à sa dissociation avec la lacune. Le principal problème de ce mécanisme est d'étendre la zone d'implantation des atomes dopants, parfois de manière critique et pouvant engendrer le dysfonctionnement du composant [87].

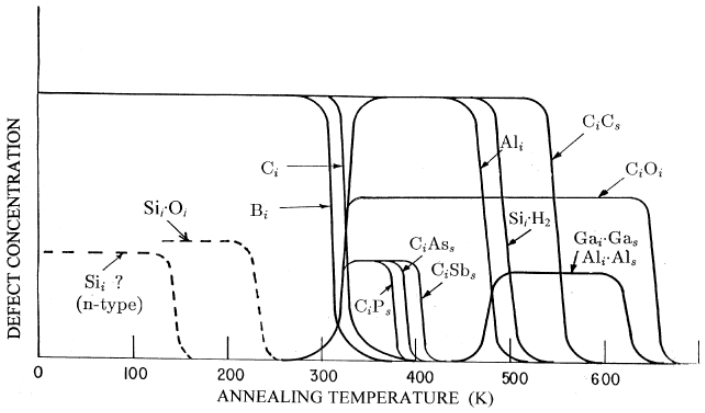


Figure II.26 : Evolution de la concentration de défauts de type interstitiels (silicium et impuretés) en fonction de la température. Comme dans le cas des complexes lacunaires (Figure II.25), l'augmentation de la température permet de faire migrer les défauts et d'augmenter la probabilité qu'ils s'associent. Chaque espèce de défaut présente une gamme de stabilité en température qui lui est propre [66].

En ce qui concerne les défauts plus complexes, *Trochet et al.* [83] ont montré récemment par simulation que la migration de défauts complexes tels que des tri-interstitiels s'effectue en plusieurs étapes de réorganisation locale, correspondant à une transition énergétique précise (Figure II.27). Au

cours de ce processus, chaque réarrangement partiel du défaut nécessite de franchir une barrière de potentiel que l'on pourrait comparer à l'énergie de migration E_m, jusqu'à atteindre l'état final de la migration. Pour être plus précis, le terme E_m mesuré expérimentalement correspond en fait à la plus haute énergie de migration mise en jeu au cours des réarrangements successifs. La simulation permet quant à elle de connaître l'énergie mise en jeu au cours de chaque réarrangement local du défaut au cours de sa migration. Les transitions énergétiques réalisées par le défaut ne sont pas identiques à chaque migration. En effet, chaque migration peut se dérouler suivant des étapes différentes, impliquant des hauteurs de barrière différentes. En règle générale, le défaut va suivre le « chemin énergétique » qui lui sera le plus favorable, c'est-à-dire celui impliquant les transitions les moins coûteuses en énergie. Une étude bibliographique a été menée afin de relever les valeurs courantes des paramètres E_m et w_0 pour les défauts identifiés dans la littérature et sera présentée en section II.5.5 de ce chapitre.

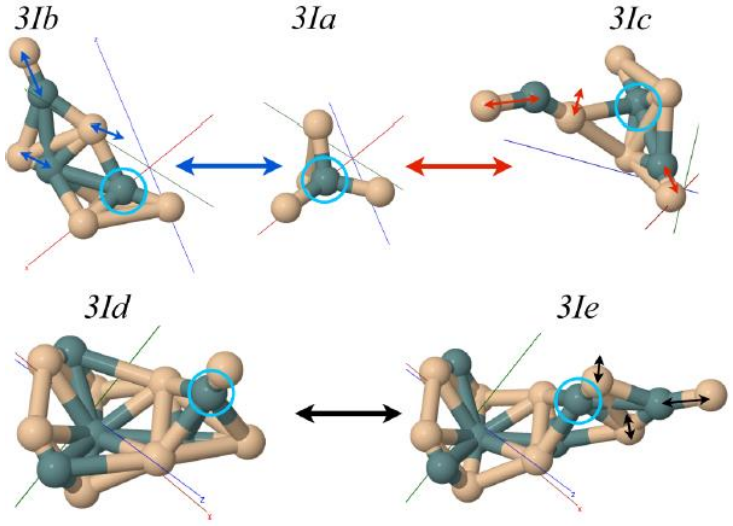


Figure II.27 : Un défaut complexe, ici le tri-interstitiel, peut présenter plusieurs configurations. Au cours de sa migration le défaut peut passer par ces différentes configurations pour s'adapter au mieux à son environnement. Pour changer de configuration, le défaut doit franchir une barrière énergétique. A cause de cela, certaines configurations moins coûteuses en énergie sont privilégiées par rapport à d'autres [83].

Dès le début de la recherche scientifique sur l'effet des radiations dans le silicium, des scientifiques ont constaté une dégradation différente du silicium en fonction du processus de fabrication dont il est issu. Dès 1963, *Crawford* [56] a constaté que les défauts dominants n'étaient pas de même nature suivant si le silicium était élaboré à partir du procédé de Czochralski ou de la méthode de la zone fondue flottante (cf chapitre I, paragraphe I.5). Dans le cas du procédé de Czochralski, le silicium présente une concentration en impureté d'oxygène environ 100 fois supérieure à celle mesurée dans un silicium créé à partir de la méthode de la zone fondue flottante. A cause de cette plus grande concentration d'impuretés d'oxygène, la population dominante de défauts dans un cristal Si-Cz est constituée de complexes de lacune-oxygène (couramment appelé le centre A dans la littérature), tandis que dans un cristal Si-Fz la population dominante est plutôt des complexes composés de lacunes et de dopants (souvent nommés centres E dans la littérature). *Konozenko* [88] a même comparé le silicium à faible taux d'impuretés (comme le Si-Fz) à un support d'observation des populations de défauts introduites par les radiations dans le silicium, comme les complexes lacunaires purs. Ceci s'explique par le fait que les impuretés vont rarement pouvoir interagir avec les défauts introduits par irradiation. Cette observation semble toujours d'actualité puisque plus récemment, *Bourgoin* et *De Angelis* ont fait la même observation dans les cellules solaires à base de silicium [57]. *Crawford* rapporte également que l'énergie de migration E_m peut être différente suivant le dopage du

cristal. D'après cette étude, l'énergie de migration semble plus grande dans un cristal de silicium dopé p que dans un cristal dopé n. Cette différence de mobilité peut s'expliquer en partie à cause des états de charge différents privilégiés dans un cristal dopé n ou dopé p qui vont établir des liaisons énergétiques différentes. Le lien entre l'état de charge du défaut, les liaisons énergétiques et les propriétés électriques et migratoires des défauts est détaillé dans le paragraphe suivant.

Les liaisons énergétiques et les états de charge des défauts

Que ce soit pour des défauts ponctuels ou des complexes, les défauts présentent des liaisons énergétiques avec d'autres défauts dans le cas des complexes ou avec les atomes environnants dans le cas des défauts ponctuels (Figure II.28). Ces liaisons peuvent être caractérisées expérimentalement pour identifier l'orientation de la liaison, les espèces mises en jeu dans cette liaison et l'intensité (énergie de liaison) de cette dernière. Des techniques comme la spectroscopie par résonance paramagnétique électronique [89] ou la résonance de spin électronique [90] peuvent être utilisées pour identifier ces liaisons énergétiques. La première technique sera détaillée dans la section II.5.4 de ce chapitre car elle est populaire au sein de la communauté scientifique.

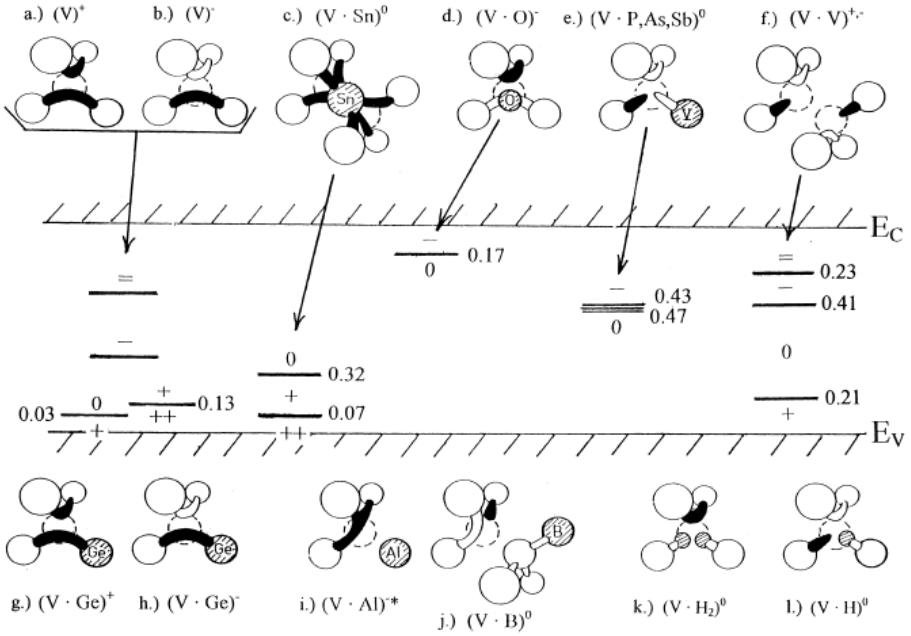


Figure II.28 : Illustration des différentes liaisons énergétiques établies dans différents défauts complexes. Deux états de charge différents d'un même défaut conduisent à l'introduction de deux niveaux d'énergie différents dans la bande interdite du semi-conducteur. Les liaisons énergétiques et les états de charge d'un défaut sont intimement liés et conduisent à une grande variété de défauts complexes [66].

Pour être plus précis ces liaisons énergétiques sont des liaisons dites « pendantes », à cause du manque ou d'un excès d'électrons qui ne permet pas de satisfaire les liaisons covalentes entre les différents atomes du réseau cristallin. Ces liaisons pendantes deviennent ensuite un lieu de piégeage pour les électrons. Ce piégeage d'électrons définit ce que l'on appelle l'état de charge du piège. La lacune simple possède par exemple cinq états de charge différents ($V^{++}, V^{+}, V^{0}, V^{-}, V^{--}$) [66]. L'état de charge est une caractéristique importante d'un défaut cristallin puisqu'il va déterminer la nature des échanges de charge entre les bandes de conduction et de valence, en introduisant notamment un niveau d'énergie propre à l'état de charge dans la bande interdite du semi-conducteur (Figure II.29). En conséquence, on distingue deux types de défauts : les niveaux accepteurs et les niveaux donneurs. Un niveau accepteur est défini comme étant négativement chargé si celui-ci est occupé par un électron et neutre s'il est vide. A l'inverse, un niveau donneur est défini comme un étant neutre s'il est occupé

par un électron et positivement chargé s'il est vide. Un défaut pouvant présenter des niveaux donneur et accepteur est qualifié d'amphotère.

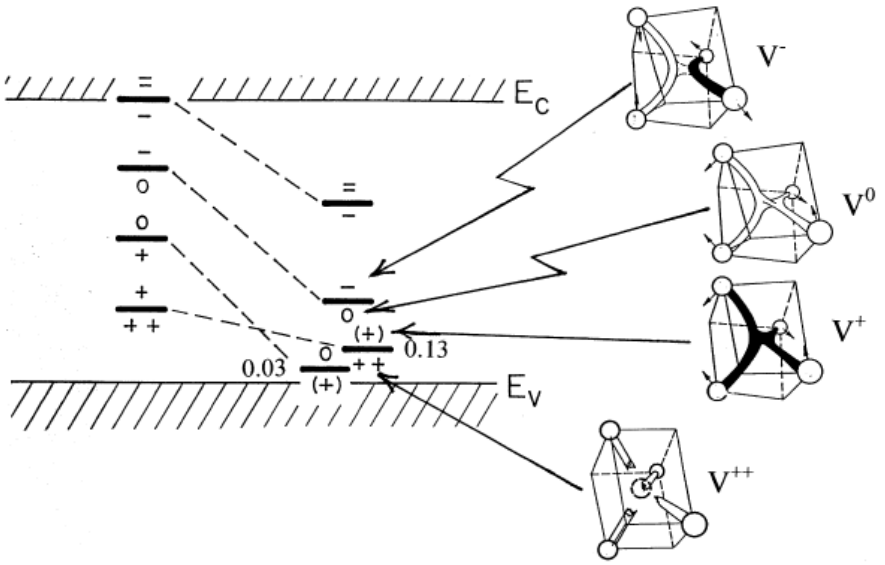


Figure II.29 : Un exemple concret de l'importance de l'état de charge d'un piège. La lacune simple présente de nombreux états de charge différents, et jouent sur la nature des échanges qui ont lieu entre le piège et les bandes énergétiques [66].

Aussi, le type de dopage va induire la dominance d'un état de charge d'un même défaut. Par exemple, on observe plus couramment un niveau donneur de la bilacune dans un silicium dopé p, alors que l'on observe plutôt un niveau accepteur dans un silicium dopé n [91]. Il a été constaté que l'énergie de migration d'un défaut pouvait être dépendante de son état de charge [66], et donc implicitement du type de dopage. C'est pour cette raison que l'injection de charges électriques, réalisée par un courant électrique ou par un rayonnement énergétique, tend à augmenter l'efficacité du processus de réorganisation et donc de guérison (injection annealing en anglais) [55]. *Brotherton* et *Bradley* ont également remarqué que l'état de charge d'un défaut influe sur les paramètres de sections efficaces de capture d'électrons et de trous [92]. Avant eux, *Evwaraye* et *Sun* [82] ont proposé le fait que la distorsion des liaisons et la répulsion coulombienne entre plusieurs électrons piégés dans des liaisons pendantes pouvaient entrer en compétition et affecter les sections efficaces de capture d'électrons et de trous, paramètres importants dans la génération thermique de porteurs de charge.

Enfin, certains états de charge sont qualifiés d'instables. Cette instabilité est causée par la capacité de certaines liaisons à capturer et libérer des électrons rapidement. Dans la littérature, on dit que ces liaisons particulières forment un système en « U négatif » [93]–[95]. En fait, pour qu'une liaison puisse capturer plus d'un électron, le système est censé fournir une énergie supplémentaire U pour surpasser la répulsion coulombienne entre les électrons capturés par la liaison. Certains auteurs ont montré qu'il était possible de s'affranchir de cette répulsion coulombienne lorsque la capture d'un électron est couplée avec un mécanisme de relaxation [95]. Ce mécanisme peut se présenter sous la forme d'un réarrangement local du défaut ou un processus de *Jahn-Teller* [96]. Par ce biais, une liaison pendante peut accueillir deux électrons pendant un court laps de temps. Le piège présente donc des états instables avec le temps à cause de ces mécanismes. Cette instabilité des états de charge d'un défaut est notamment tenue en partie responsable du phénomène de signal télégraphique aléatoire des pixels et autres composants à base de semi-conducteurs (RTS) [97], [98].

Les clusters : une catégorie particulière de défauts

Les agrégats de défauts ou les amas de défauts sont couramment appelés par leur dénomination anglaise : les clusters. Aujourd'hui les clusters sont une catégorie un peu à part de défauts car leurs caractéristiques sont encore parfois mal comprises ou sujet à discussion. Même si *Gossick* a proposé très tôt un modèle pour les clusters [65], le terme cluster est parfois utilisé aujourd'hui pour parler d'un complexe d'au moins deux défauts, parfois pour des complexes plus importants, de l'ordre de 4-5 défauts jusqu'à un nombre plus élevé dans le cas d'importantes cascades de dommage (Figure II.30). On ne sait pas encore bien définir si un cluster est un ensemble de défauts ponctuels, ou si à l'inverse un cluster est une entité à part entière avec des caractéristiques propres. On connait en revanche les effets de la présence de clusters au sein du silicium, qui sont non sans rappeler ceux observés pour les défauts plus simples : forte augmentation de la recombinaison de porteurs de charge, génération de charges dans les zones en déplétion [25], [75], [99]. La caractérisation structurelle et électrique des clusters est un sujet de recherche avec un fort intérêt aujourd'hui dans la communauté scientifique.

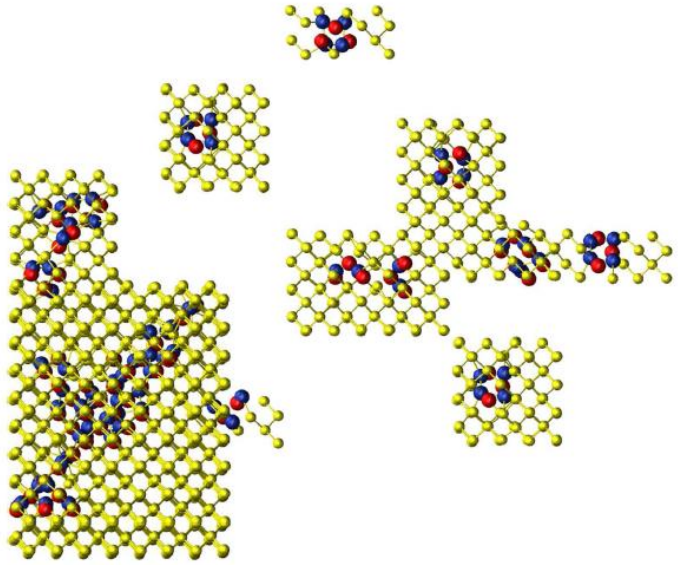


Figure II.30 : Simulation d'une cascade de dommage faisant apparaître des régions avec forte densité de défauts, appelés les clusters [63].

II.5.4 Principales techniques de détection et caractérisation des défauts structurels de la matière cristalline

Les défauts cristallins, ainsi que leurs propriétés électriques (comme les paramètres de piège) et structurelles, ont d'abord été identifiés et caractérisés au moyen de techniques expérimentales diverses et variées. Il existe aujourd'hui de nombreuses techniques expérimentales permettant de remonter aux paramètres des défauts présents dans l'échantillon testé. Ces caractéristiques sont essentielles pour déterminer le taux de génération thermique de paires électron-trou du défaut, et donc par conséquent sa contribution à l'augmentation du courant d'obscurité après irradiation. Une description des principales techniques de détection et caractérisation des défauts est proposée dans le paragraphe suivant.

Spectroscopie des transitoires de capacité de niveaux profonds

Cette technique est très populaire pour caractériser les défauts, grâce notamment à sa facilité de mise en place en laboratoire. Elle est plus connue sous son acronyme DLTS provenant de l'anglais

Deep Level Transient Spectroscopy [100]. Cette méthode permet d'établir les paramètres fondamentaux des défauts et mesure la concentration de ces défauts. L'état d'équilibre d'une jonction PN polarisée en inverse est perturbé par une impulsion de tension. Cette impulsion réduit le champ électrique dans la zone de déplétion et permet aux porteurs de charge libres de pénétrer dans la ZCE et de « recharger les défauts » [59]. Cette opération permet de remplir les niveaux de piège profonds. Après l'impulsion, lorsque la tension revient à son état initial, les défauts commencent à émettre par agitation thermique des porteurs coincés dans les pièges. Le temps de vidage des charges est une caractéristique propre au niveau du piège, puisqu'il dépend notamment de la distance entre le niveau de piège et la bande énergétique correspondant au porteur capturé (la bande de conduction pour les électrons, la bande de valence pour les trous) ainsi que de la température. La constante de temps de vidage (ou plus précisément de réémission) des porteurs est déterminée pour chaque défaut en faisant varier la température, et en faisant varier la taille de la fenêtre de mesure [101]. Une fenêtre correspond à deux points de mesure en temps réalisée après l'inversion de polarisation. Si la variation de la capacité est maximale sur la fenêtre de mesure sélectionnée, alors le temps correspondant à cette mesure est le temps de réémission des porteurs de charge capturé par un défaut [100]. La technique DLTS mesure ainsi la capacité transitoire de la jonction lors du rétablissement de l'état de charge. La cinétique de ce rétablissement est donc pilotée par le piège suivant ses propriétés et la température. Les principales contraintes de cette méthode sont l'obligation de refroidir le composant et l'utilisation de dispositifs de mesure sophistiqués pour limiter au maximum le bruit de mesure [102]. Le refroidissement de l'échantillon est nécessaire pour couvrir un spectre en niveau d'énergie dans la bande interdite le plus large possible. Par exemple, des pièges situés près des bandes ont plus de chances libérer des porteurs de charges à basse température (faible agitation thermique) par rapport aux niveaux plus profonds. L'utilisation de dispositifs de mesure à faible bruit est nécessaire à cause du faible niveau de signal que représente le transitoire de capacité généré par les défauts (de l'ordre du pA/cm^2 au nA/cm^2). Une dernière contrainte directement liée à ce problème est la concentration minimale de défauts requise dans un échantillon pour que cette population soit détectable et mesurable. Pour la DLTS, une concentration de 10^{12} à 10^{13} défauts par cm^3 est estimée pour que la mesure soit réalisable.

Spectroscopie par résonance paramagnétique électronique

La spectroscopie par résonance paramagnétique électronique (ou Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopy en anglais) : cette méthode utilise la capacité des électrons à absorber puis réémettre l'énergie d'un rayonnement électromagnétique lorsqu'ils sont placés dans un champ magnétique [64], [89], [103]. Avec cette méthode, il est possible d'identifier les défauts, leur composition ainsi que leur orientation dans la structure cristalline. On obtient ainsi pour une gamme de champ magnétique donnée un spectre permettant d'identifier les pièges présents dans l'échantillon testé. Il est également possible de suivre l'évolution du défaut au cours de diverses interactions avec son environnement, comme par exemple sa migration ou son interaction avec d'autres défauts. Cette méthode est privilégiée pour caractériser la structure du défaut et son environnement proche [66].

Résonance Magnétique Détectée Optiquement

La méthode de la résonance magnétique détectée optiquement (Optically Detected Magnetic Resonance en anglais, abrégé ODMR) repose sur le fait que les micro-ondes (hyperfréquences) induisent des transitions entre les différents niveaux Zeeman d'un électron (les spins d'un électron) [104]–[106]. Pour être plus précis, le signal mesuré caractéristique d'un piège correspond à un changement d'intensité ou de polarisation de la luminescence produite par chaque transition. Le spectre engendré par la luminescence de ces niveaux excités est caractéristique des pièges. Ce type d'expérience permet de déterminer de manière précise les niveaux d'énergie des défauts.

Photoluminescence

La photoluminescence est un procédé qui utilise les photons comme source de détection des défauts. Lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, les photons qui composent cette lumière vont exciter les électrons de la bande de valence, et si l'énergie est suffisante, un électron peut traverser le gap du semi-conducteur. La photoluminescence se base donc sur l'effet photoélectrique. Dans ce cas précis, pour la mesure de la photoluminescence, on se place dans le cas où l'on ne cherche pas à collecter les charges photo-générées. De cette manière, les électrons peuvent recombiner en retournant dans la bande de valence. En recombinant, l'électron émet un photon qui correspond à la largeur de la bande interdite. C'est ce phénomène que l'on nomme photoluminescence [107]–[109]. En présence de défauts, la longueur d'onde du photon émis sera différente. Les défauts induisent un décalage du spectre d'émission des photons. Le spectre des photons permet ainsi de remonter aux caractéristiques des défauts. L'utilisation d'une source laser permet d'envoyer de manière contrôlée de la lumière pour induire une photoluminescence résolue en temps. Il est ainsi possible d'accéder aux taux de recombinaison des porteurs et à leur durée de vie, permettant de déduire les niveaux d'énergie et les sections efficaces de capture des porteurs de charge. Cependant, dans le cas d'une recombinaison radiative au niveau d'un centre profond tel que la photoluminescence, on n'observe souvent qu'un spectre avec des raies très large, provoquées par des interactions entre un électron (ou un trou) et les noyaux voisins [106]. Cela affecte donc la précision avec laquelle sont déterminés les niveaux d'énergie.

La spectroscopie du courant d'obscurité

La spectroscopie du courant d'obscurité (ou Dark Current Spectroscopy en anglais, abrégé DCS) consiste à mesurer directement le taux de génération des défauts (cf paragraphe II.5.2). Cette opération est possible puisque le courant d'obscurité résulte principalement des charges générées dans la zone en déplétion des pixels. La particularité de cette technique est d'effectuer les mesures de taux de génération dans plusieurs micro-volumes (c'est-à-dire dans chaque pixel) et non dans un seul volume de mesure [110]. En traçant l'histogramme du taux de génération recueilli dans chaque pixel, on peut identifier les principaux défauts contributeurs du courant d'obscurité. L'histogramme se manifeste ainsi par des pics de courant centrés sur le taux de génération associé au défaut qui a généré ce pic. La succession de pics de courant peut être révélateur de la contribution de défauts aux propriétés identiques : le premier pic correspond à un défaut, le second pic à deux défauts du même type et ainsi de suite. Cette méthode présente l'avantage de ne pas avoir à effectuer de rampe en température comme la DLTS par exemple, tout en permettant d'accéder aux propriétés de niveaux profonds. La DCS permet aussi de mesurer des concentrations de défauts assez faibles (de l'ordre de $10^8\ cm^{-3}$ au minimum) [102]. Cependant, si une population de pièges est trop dominante (en nombre d'individus), elle peut masquer la contribution d'autres défauts. Aussi, si les taux de génération de deux populations de défauts distinctes sont proches, la contribution d'une des deux populations peut se confondre avec l'autre, rendant l'identification des défauts difficiles.

Spectroscopie des courants thermo-stimulés

La spectroscopie des courants thermo-stimulés (ou Thermally Stimulated Current en anglais, abrégé TSC) consiste à remplir les pièges présent dans un semi-conducteur, par injection de charges électriques ou par excitation lumineuse, à basse température [111], [112]. Le but de cette opération est de capturer les charges dans les pièges le plus longtemps possible sans réémission. Une fois tous les pièges remplis, une rampe en température est appliquée de manière progressive pour libérer les charges contenues dans les pièges. En fonction de la profondeur du piège, les charges vont se dépiéger avec des cinétiques qui seront propres aux caractéristiques du défaut. On observe ainsi des pics de

courant électrique lorsque l'on fait monter la température, signature des charges émises par les pièges. L'analyse de ces pics de courant permet de remonter au niveau d'énergie du piège, aux sections efficaces de capture d'électrons ou de trous ainsi qu'à la concentration des défauts. Il faut cependant ne pas confondre la spectroscopie des courants thermo-stimulés avec la technique de spectroscopie du courant de dépolarisation stimulé thermiquement, parfois nommée de manière identique [2].

Il existe d'autres techniques d'identification et de caractérisation de défauts comme la technique des courants transitoires (TCT) [113], [114], la résonance du spin électronique (ESR) [90], [115], ou des variantes de celles présentées dans ce chapitre (Laplace DLTS [116], laser-DLTS [117]…) permettant d'accéder à des informations sur la structure et les propriétés des défauts qui ne seront pas présentées dans ce manuscrit. Ces méthodes expérimentales ont permis de révéler l'existence de nombreuses espèces de défauts, que ce soit des défauts liés aux dopants, aux impuretés, ou des complexes lacunaires ou d'interstitiels. En ce qui concerne les clusters, même s'ils ont tendance à disparaître avec le temps pour former des défauts de taille moins grande, leurs propriétés électriques sont encore mal comprises et font l'objet de nombreuses recherches. Malgré les technologies de pointe utilisées pour déterminer les propriétés structurelles et électriques des défauts, les dispositifs expérimentaux sont inévitablement entachés d'incertitudes de mesure. Ces incertitudes donnent lieu à des estimations différentes pour un même défaut, menant à des écarts de plusieurs ordres de grandeur, essentiellement sur les paramètres de sections efficaces de capture d'électron et de trou. Nous verrons dans le chapitre IV que ces incertitudes sont à prendre en considération dans l'estimation du taux de génération de paires électron-trou des défauts et des effets du champ électrique sur la génération du courant d'obscurité dans les pixels irradiés. Un inventaire des défauts cristallins rencontrés dans le silicium après irradiation, récapitulant les propriétés de migration et électriques de ces pièges, est proposé dans le paragraphe suivant.

II.5.5 Inventaire des défauts cristallins rencontrés dans le silicium après irradiation

Grâce aux nombreuses techniques expérimentales de détection, ainsi qu'aux nouveaux outils de simulation, il est possible de connaître les propriétés électriques et structurelles des défauts. Les calculs *ab initio* par exemple permettent de déterminer le niveau énergétique introduit par un défaut à partir de sa configuration dans le réseau cristallin [98], [118], au moyen des équations complexes de la mécanique quantique. Ces calculs donnent aujourd'hui des résultats proches des mesures expérimentales de niveau de piège.

Cependant, chaque méthode de caractérisation possède ses limites. Les techniques expérimentales s'accompagnent souvent d'incertitudes sur les mesures, et les conditions dans lesquelles les expériences ont été réalisées vont également affecter le résultat des mesures. La simulation n'est pas en reste, puisqu'en fonction des hypothèses de calcul faites par les scientifiques, le résultat ne sera pas toujours identique. Par conséquent, on peut observer des divergences parfois assez importantes pour un même paramètre. Parfois, certaines informations sont manquantes et

[2] La technique de spectroscopie du courant de polarisation thermo-stimulé ne permet que d'étudier les propriétés diélectriques d'un matériau. Ceci est possible par l'application d'un champ électrique suivi d'un abaissement de la température afin de « geler » l'orientation qu'ont prise les molécules suite à la présence d'un champ électrique. Une rampe en température est ensuite appliquée pour que les molécules retrouvent leur orientation normale, et le courant émis lors de ce changement de configuration est une signature propre à chaque molécule.

imposent de faire des hypothèses pour les simulations. Le cas typique est le manque d'informations sur les sections efficaces de capture des porteurs minoritaires.

Cette section a pour objectif de répertorier l'ensemble des valeurs des paramètres électriques et de migration des défauts de la manière la plus exhaustive possible. Le premier tableau (Tableau II.2) se concentre sur les propriétés électriques des défauts, tandis que le deuxième tableau (Tableau II.3) se focalise sur les propriétés de migration des défauts. Lorsque l'état de charge du défaut est connu, il est indiqué en exposant à côté du symbole du défaut. Par exemple, le défaut $V_2^{-/0}$ est une bilacune chargée négativement lorsqu'un électron est piégé et neutre si le défaut est inoccupé. La lettre V désigne un défaut lacunaire, l'indice indique le nombre de lacunes impliquées dans le défaut. La lettre I désigne le défaut interstitiel de silicium, et comme pour la lacune, l'indice indique le nombre d'interstitiels impliqués dans le défaut. Les autres éléments sont représentés par leur symbole dans le tableau périodique de *Mendeleïev*. L'indice i signifie que l'élément est en position interstitielle dans le réseau d'atomes. Les niveaux d'énergie des pièges sont exprimés par rapport à la bande de conduction E_C ou la bande de valence E_V. Si une information est inconnue, elle est indiquée par le symbole $\emptyset$. Les unités sont indiquées dans chaque tableau quand cela est nécessaire. Ces tableaux serviront de base d'entrée pour les simulations effectuées dans les chapitres IV, V et VI.

Les informations concernant les sections efficaces de porteurs minoritaires manquent cruellement dans la littérature, à cause de la difficulté à la mesurer. De nombreux auteurs référencés dans le Tableau II.2 ont fait mention de cette difficulté dans leurs publications. Ce manque de connaissances implique d'émettre des hypothèses sur ces sections efficaces. Par simplicité, on fixe généralement les sections efficaces de capture d'électron et de trou à valeur égale si une seule d'entre elle est connue. Ce manque d'informations est encore plus important dans le cas de petits clusters tels que le tri-interstitiel ou les clusters formés autour d'une tri-lacune. Les choix effectués pour simuler la contribution de ce type de pièges à l'augmentation du courant d'obscurité seront explicités dans les chapitres IV, et VI.

Tout comme pour les propriétés électriques, la littérature souffre d'un manque d'informations sur les facteurs de fréquence pour caractériser la migration des défauts. Si cette donnée n'est pas connue, elle est fixée à une valeur de l'ordre de la fréquence de Debye, c'est-à-dire de $10^{-2}\ fs^{-1}$. Les auteurs extraient souvent de leurs analyses l'énergie de migration car c'est le paramètre macroscopique le plus déterminant pour évaluer la capacité de migration d'un défaut. Cette donnée peut également varier suivant les conditions de mesures (cf paragraphe II.5.3 de ce chapitre) ou de simulation. Les choix effectués pour fixer ces valeurs dans le cadre des simulations réalisées dans les chapitres V et VI seront aussi justifiés.

Nom du défaut	Niveau d'énergie (eV)	Sections efficaces σ_n/σ_p (m^2)	Type	Réf.
Défauts ponctuels				
$V^{0/+}$	$E_V + 0{,}05$	∅	Donneur	[93]
$V^{+/++}$	$E_V + 0{,}13$	∅	Donneur	[93]
$V^{--/-}$	$E_C - 0{,}11$	∅	Accepteur	[78]
$V^{-/0}$	$E_C - 0{,}57$	∅	Accepteur	[78]
$Au^{-/0}$	$E_C - [0{,}54$ à $0{,}56]$	$1{,}4$ à 5×10^{-20} / 1 à $7{,}6 \times 10^{-19}$	Accepteur	[119]–[122]
$B_i^{-/0}$	$E_C - 0{,}37$	∅	Accepteur	[66], [91], [93]
$B_i^{0/+}$	$E_C - 0{,}13$	∅	Donneur	[66], [91], [93]
$C_i^{-/0}$	$E_C - 0{,}11$	6×10^{-19} / ∅	Accepteur	[123]
$C_i^{0/+}$	$E_V + 0{,}28$	4×10^{-19} / ∅	Donneur	[123]
$Al_i^{+/++}$	$E_V + 0{,}17$	∅	Donneur	[66]
Défauts complexes				
$VO_i^{-/0}$	$E_C - [0{,}164$ à $0{,}17]$	5×10^{-19} à 5×10^{-18} / ∅	Accepteur	[56], [57], [59], [91], [92], [123]
$V_2O_i^{-/0}$	$E_C - 0{,}44$ à $0{,}50$	$7{,}1 \times 10^{-19}$ / ∅	Accepteur	[99], [124]–[126]
$V_2O_i^{--/-}$	$E_C - 0{,}23$	∅	Accepteur	[124]–[127]
$V_2O_i^{0/+}$	$E_V + 0{,}24$	∅	Donneur	[126], [128]
V_3O_i	$E_V + 0{,}34$	$2{,}3 \times 10^{-16}$ / ∅	Donneur	[125]
$V_2^{--/-}$	$E_C - [0{,}22$ à $0{,}25]$	6×10^{-21} à 5×10^{-17} / ∅	Accepteur	[57], [59], [82], [92], [123], [129], [130]
$V_2^{-/0}$	$E_C - [0{,}39$ à $0{,}42]$	$1{,}6 \times 10^{-20}$ à 5×10^{-17} / 5×10^{-19}	Accepteur	[56], [57], [59], [82], [91], [92], [99], [123], [129]–[131]
$V_2^{0/+}$	$E_V + [0{,}194$ à $0{,}3]$	4×10^{-20} à 6×10^{-19} / 10^{-21} à 4×10^{-20}	Donneur	[56], [57], [82], [91], [132]
$V_3^{-/0}$	$E_C - [0{,}455$ à $0{,}46]$	$2{,}4$ à 5×10^{-19} / 5×10^{-19} à $2{,}15 \times 10^{-17}$	Accepteur	[131], [133], [134]
I_2	$E_V + [0{,}4$ à $0{,}6]$	∅	∅	[134]
I_3	$E_C - 0.2\ ou\ E_V + [0{,}15$ à $0{,}18]$	∅	∅	[98], [134]
$VP^{-/0}$	$E_C - [0{,}4$ à $0{,}47]$	∅ / 4×10^{-19}	Donneur	[56], [57], [66], [88], [92]
VSb	$E_C - 0{,}44$	∅	Donneur	[66]
VB	$E_V + 0{,}45$	$3{,}2 \times 10^{-19}$ / ∅	Donneur	[88]
$C_iO_i^{0/+}$	$E_V + [0{,}36$ à $0.38]$	5×10^{-19} à 5×10^{-18} / ∅	Donneur	[123], [135]
VAl	$E_V + 0{,}07$	∅	Accepteur	[66]
VAs	$E_C - 0{,}47$	∅	Donneur	[66]

Tableau II.2 : Inventaire des propriétés électriques des défauts ponctuels et complexes connus dans le silicium. Lorsque l'information est connue, les niveaux d'énergie, les sections efficaces de capture d'électrons et de trous ainsi que la nature du piège sont indiqués. Les paramètres de pièges sont parfois difficiles à mesurer et très dépendants du type et de la précision de la mesure. On observe ainsi une gamme de valeurs pour un même paramètre, s'étendant sur plusieurs ordres de grandeurs.

Nom du défaut	Energie de migration (eV)	Facteur de fréquence (fs^{-1})	Réf.
V	0,1 à 0,723	$1{,}282 \times 10^{-3}$	[56], [63], [66], [85], [86], [136]–[141]
V_2	1 à 1,47	10^{-7} à 10^{-3}	[56], [57], [63], [82], [83], [91], [92], [141], [142]
V_3	1,32 à 1,47	10^{-2}	[63], [83], [143]
$VO_i^{-/0}$	1,3 à 1,98	10^{-2} à 1,6	[56], [57], [91], [92], [123], [144], [145]
$V_2O_i^{-/0}$	1,6 à 2,14	$1{,}5 \times 10^{-3}$ à 2×10^{-2}	[124], [145], [146]
V_3O_i	1,5	$2{,}1 \times 10^{-5}$	[143]
$VP^{-/0}$	0,93 à 0,96	10^{-2}	[142]
I	0,3 à 1,37	1,717	[63], [86], [138]
I_2	0,15 à 0,28	10^{-7} à 10^{-2}	[63], [83], [134], [138]
I_3	1,66	10^{-2}	[63], [83]
C_i	0,71 à 0,87	10^{-2}	[66], [147]–[150]
O_i	2 à 3,5	10^{-2}	[142], [144], [151]–[158]
$C_iO_i{}^{0/+}$	1,99	10^{-2}	[145]
B_i	0,6	10^{-2}	[66]
Al_i	1,2	10^{-2}	[66]

Tableau II.3 : Inventaire des propriétés de migration des défauts cristallins. Ces paramètres sont soit déterminés expérimentalement soit par simulation. Comme pour les propriétés électriques, les caractéristiques de migration des défauts ne sont pas connues avec une grande précision, à cause des incertitudes expérimentales et des hypothèses de calcul lors des simulations.

II.6 Conclusions du chapitre

Au cours de sa mission un satellite est exposé à différentes sources de particules issues de l'environnement spatial. La nature, le flux et l'énergie de ces particules varient avec le temps et l'orbite du satellite. Ces particules énergétiques sont capables de traverser le blindage et les différents composants électroniques embarqués à bord du satellite. Ces interactions entre le rayonnement énergétique vont la plupart du temps dégrader les matériaux et les performances des composants affectés. Ces dégradations peuvent se manifester sous différentes formes, en fonction de la nature de l'interaction. Ces dégradations peuvent se produire ponctuellement (effets singuliers) ou s'accumuler dans le temps (effets cumulés). Les effets de ces dégradations peuvent être destructifs ou causer des dommages réversibles.

Ce chapitre s'est focalisé sur un type de dégradation cumulée, appelé les déplacements atomiques. Ces déplacements atomiques sont introduits lors d'interactions entre des particules énergétiques (protons, ions, électrons) et les noyaux des atomes du réseau cristallin. Lorsque l'énergie de la particule est suffisante, elle peut engendrer le long de son parcours des cascades de dommage

comprenant un grand nombre de déplacements atomiques. Même si une grande partie des atomes retrouvent une place normale dans le réseau cristallin, le reste se retrouve définitivement éjecté de son site en position interstitielle. Le vide laissé derrière un atome est appelé une lacune, et avec l'interstitiel forment une paire de Frenkel. Ces paires de Frenkel sont ce que l'on appelle des défauts cristallins ponctuels et sont instables. Au cours du temps, les lacunes et les interstitiels vont migrer dans la matière afin de trouver un site où se stabiliser. Ces migrations successives vont permettre à des défauts ponctuels de se rencontrer et de s'associer entre eux pour gagner en stabilité. Ce processus de réorganisation donne naissance à des défauts plus complexes, stables et électriquement actifs. Ce sont ces défauts complexes qui sont notamment à l'origine de l'introduction de niveaux intermédiaires d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. La réorganisation de la matière et les effets des niveaux intermédiaires d'énergie sont au cœur de la problématique des travaux de thèse présentés dans ce manuscrit. Plus précisément ce sont les charges électriques générées par les défauts cristallins, introduits par irradiation après réorganisation des défauts dans la zone de déplétion d'un pixel, qui sont l'objet d'étude de la thèse. En effet, ces défauts sont responsables de l'augmentation du courant d'obscurité dans les imageurs après irradiation. Les principaux mécanismes menant à la réorganisation des défauts, et les processus menant à l'introduction de défauts électriquement actifs ont été décrits dans ce chapitre. Nous nous appuierons sur les mécanismes présentés dans ce chapitre pour étudier l'impact de la réorganisation des défauts sur la modélisation du courant d'obscurité dans les imageurs dans les chapitres V et VI. Le chapitre suivant est porté exclusivement sur le courant d'obscurité et ses moyens de prédiction, et notamment celui utilisé dans ces travaux de thèse.

Bibliographie du chapitre

[1] S. Bourdarie et M. Xapsos, « The Space Radiation Environment », *IEEE Trans Nucl Sci.*, p. 25, 2008.

[2] V. Maget, « Développement et comparaison de méthodes d'assimilationde données appliquées à la restitution de la dynamiquedes ceintures de radiation terrestres », Toulouse, ISAE, 2007.

[3] V. Pierrard, *L'environnement spatial de la Terre*. Louvain-la-Neuve (Belgique): UCL-Presses universitaires de Louvain, 2009.

[4] S. Bourdarie, « Modélisation de la dynamique des ceintures de radiations à l'échelle de l'orage magnétique », Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 1996.

[5] Space Technology Course, Association RADECS, et Frankreich, Éd., *Space radiation environment and its effects on spacecraft and systems: SREC 04 ; Space Technology Course ; 14 - 18 June 2004, Toulouse*. Toulouse: CEPADUES-Ed, 2004.

[6] A. Holmes-Siedle et L. Adams, *Handbook of Radiation Effects*, Second Edition. Oxford, New York: Oxford University Press, 2002.

[7] E. G. Stassinopoulos et J. P. Raymond, « The space radiation environment for electronics », *Proc. IEEE*, vol. 76, n° 11, p. 1423-1442, nov. 1988, doi: 10.1109/5.90113.

[8] A. Johnston, « Optoelectronic Devices with Complex Failure Modes », p. 63.

[9] A. Varotsou, « Utilisation de modèles physiques pour comprendre la dynamique des ceintures de radiation d'électrons de la terre », p. 118.

[10] « Solar Weather », *Intelsat*. http://www.intelsat.com/tools-resources/library/satellite-101/space-weather/ (consulté le mai 18, 2020).

[11] R. Ecoffet, « In-flight Anomalies on Electronic Devices », in *Radiation Effects on Embedded Systems*, R. VELAZCO, P. FOUILLAT, et R. REIS, Éd. Dordrecht: Springer Netherlands, 2007, p. 31-68.

[12] B. S. : G. Rachel Weintraub : GSFC, « NASA - Safeguarding Our Satellites From the Sun ». https://www.nasa.gov/mission_pages/stereo/news/stereo_1859.html (consulté le mai 18, 2020).

[13] « Likelihood of space super-storms estimated from longest period of magnetic field observations », janv. 29, 2020. https://warwick.ac.uk/newsandevents/pressreleases/likelihood_of_space.

[14] L. Dusseau, « Interactions Rayonnements-Matière », Institut d'Electronique du Sud, 2009.

[15] P. Jean, « Cours de M1 - Astrophysique nucléaire et physique des particules ». Université Paul Sabatier, 2015.
[16] E. Infeld, « Basic Principles of Plasma Physics: a Statistical Approach. By S. Ichimaru. Benjamin Frontiers in Physics, 1973. 324 pp. $19.50 (hardcover), $12.50 (paperback). », *J. Plasma Phys.*, vol. 13, n° 3, p. 571-572, juin 1975, doi: 10.1017/S0022377800025289.
[17] H. Bethe, W. Heitler, et P. A. M. Dirac, « On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons », *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*, vol. 146, n° 856, p. 83-112, août 1934, doi: 10.1098/rspa.1934.0140.
[18] C. 22 NUCS 342, « Rutherford scattering - Introduction to Nuclear Science », Simon Fraser University, mars 16, 2011, Consulté le: juin 05, 2020. [En ligne]. Disponible sur: https://web-docs.gsi.de/~wolle/TELEKOLLEG/KERN/LECTURE/Fraser/L22.pdf.
[19] J. F. Ziegler et J. P. Biersack, « The Stopping and Range of Ions in Matter », in *Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter*, D. A. Bromley, Éd. Boston, MA: Springer US, 1985, p. 93-129.
[20] H. S. W. Massey, « Theory of Atomic Collisions », in *Atoms II / Atome II*, F. Hund, P. Gombás, et H. S. W. Massey, Éd. Berlin, Heidelberg: Springer, 1956, p. 232-306.
[21] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, et P. V. Thomsen, « INTEGRAL EQUATIONS GOVERNING RADIATION EFFECTS. (NOTES ON ATOMIC COLLISIONS, III) », *Kgl Dan. Vidensk. Selsk. Mat Fys Medd*, vol. Vol: 33: No. 10, janv. 1963, Consulté le: févr. 15, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://www.osti.gov/biblio/4701226-integral-equations-governing-radiation-effects-notes-atomic-collisions-iii.
[22] T. Nuns, « Etude du comportement des capteurs d'images CCD commerciaux en ambiance spatiale », p. 142.
[23] C. Poivey, « TNID Total Non Ionizing Dose or DD Displacement Damage - ppt download », présenté à SCC Workshop, CERN, mai 09, 2017, Consulté le: nov. 19, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://slideplayer.com/slide/13154892/.
[24] C. Inguimbert, « Prédiction des événements singuliers induits par les protons : contribution à une nouvelle approche de la définition du volume sensible », p. 133.
[25] J. R. Srour et J. W. Palko, « Displacement Damage Effects in Irradiated Semiconductor Devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 60, n° 3, p. 1740-1766, juin 2013, doi: 10.1109/TNS.2013.2261316.
[26] C. Inguimbert, P. Arnolda, T. Nuns, et G. Rolland, « "Effective NIEL" in Silicon: Calculation Using Molecular Dynamics Simulation Results », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 57, n° 4, p. 1915-1923, août 2010, doi: 10.1109/TNS.2010.2049581.
[27] S. Duzellier, « Radiation effects on electronic devices in space », *Aerosp. Sci. Technol.*, vol. 9, n° 1, p. 93-99, janv. 2005, doi: 10.1016/j.ast.2004.08.006.
[28] « SEECA - Section 4 ». https://radhome.gsfc.nasa.gov/radhome/papers/seeca4.htm (consulté le mai 25, 2020).
[29] E. Petersen, *Single Event Effects in Aerospace: Petersen/Single Event Effects in Aerospace*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2011.
[30] « Soft Errors/Single Event Effects – IROC Technologies ». https://www.iroctech.com/library/soft-errorssingle-event-effects/ (consulté le mai 25, 2020).
[31] P. E. Dodd, M. R. Shaneyfelt, J. R. Schwank, G. L. Hash, B. L. Draper, et P. S. Winokur, « Single-Event Upset and Snapback in Silicon-on-Insulator Devices », p. 7, 2000.
[32] J. F. Verwey, E. A. Amerasekera, et J. Bisschop, « The physics of SiO2layers », *Rep. Prog. Phys.*, vol. 53, n° 10, p. 1297–1331, oct. 1990, doi: 10.1088/0034-4885/53/10/002.
[33] G. A. Ausman et F. B. McLean, « Electron−hole pair creation energy in SiO2 », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 26, n° 4, p. 173-175, févr. 1975, doi: 10.1063/1.88104.
[34] T. R. Oldham, A. J. Lelis, et F. B. McLean, « Spatial Dependence of Trapped Holes Determined from Tunneling Analysis and Measured Annealing », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 33, n° 6, p. 1203-1209, déc. 1986, doi: 10.1109/TNS.1986.4334579.
[35] H. E. Boesch et J. M. McGarrity, « Charge Yield and Dose Effects in MOS Capacitors at 80 K », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 23, n° 6, p. 1520-1525, déc. 1976, doi: 10.1109/TNS.1976.4328532.

[36] H. E. Boesch, F. B. McLean, J. M. McGarrity, et G. A. Ausman, « Hole Transport and Charge Relaxation in Irradiated SiO2 MOS Capacitors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 22, n° 6, p. 2163-2167, déc. 1975, doi: 10.1109/TNS.1975.4328098.
[37] « Ionizing Radiation Effects on Silicon-on-Sapphire Devices and Silicon Dioxide Films. » https://apps.dtic.mil/sti/citations/ADA046169 (consulté le juin 05, 2020).
[38] T. R. Oldham et F. B. McLean, « Total ionizing dose effects in MOS oxides and devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 50, n° 3, p. 483-499, juin 2003, doi: 10.1109/TNS.2003.812927.
[39] V. Goiffon, « Contribution à une approche structurée de la conception des imageurs CMOS en vue de leur durcissement à l'environnement radiatif spatial », p. 238.
[40] V. Goiffon, M. Estribeau, et P. Magnan, « Overview of Ionizing Radiation Effects in Image Sensors Fabricated in a Deep-Submicrometer CMOS Imaging Technology », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 56, n° 11, p. 2594-2601, nov. 2009, doi: 10.1109/TED.2009.2030623.
[41] H. J. Barnaby, « Total-Ionizing-Dose Effects in Modern CMOS Technologies », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 53, n° 6, p. 3103-3121, déc. 2006, doi: 10.1109/TNS.2006.885952.
[42] R. P. Behera, T. S. Nidhin, M. Sakthivel, T. Jayanthi, et K. Madhusoodanan, « Total ionizing dose effects in GaAs-Si based electronic components », in *2017 Innovations in Power and Advanced Computing Technologies (i-PACT)*, avr. 2017, p. 1-5, doi: 10.1109/IPACT.2017.8245063.
[43] C. Durnez *et al.*, « Total Ionizing Dose Radiation-Induced Dark Current Random Telegraph Signal in Pinned Photodiode CMOS Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 1, p. 92-100, janv. 2018, doi: 10.1109/TNS.2017.2779979.
[44] T. Sakurai et T. Sugano, « Theory of continuously distributed trap states at Si-SiO2 interfaces », *J. Appl. Phys.*, vol. 52, n° 4, p. 2889-2896, avr. 1981, doi: 10.1063/1.329023.
[45] F. B. McLean, « A Framework for Understanding Radiation-Induced Interface States in SiO2 MOS Structures », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 27, n° 6, p. 1651-1657, déc. 1980, doi: 10.1109/TNS.1980.4331084.
[46] G. Anelli *et al.*, « Radiation tolerant VLSI circuits in standard deep submicron CMOS technologies for the LHC experiments: practical design aspects », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 46, n° 6, p. 1690-1696, déc. 1999, doi: 10.1109/23.819140.
[47] V. Goiffon *et al.*, « Radiation Hardening of Digital Color CMOS Camera-on-a-Chip Building Blocks for Multi-MGy Total Ionizing Dose Environments », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 45-53, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2636566.
[48] W. Shockley et W. T. Read, « Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons », *Phys. Rev.*, vol. 87, n° 5, p. 835-842, sept. 1952, doi: 10.1103/PhysRev.87.835.
[49] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: Wiley, 1981.
[50] J. R. Srour et D. H. Lo, « Universal damage factor for radiation-induced dark current in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, n° 6, p. 2451–2459, 2000.
[51] X. Wang, P. R. Rao, A. Mierop, et A. J. P. Theuwissen, « Random Telegraph Signal in CMOS Image Sensor Pixels », in *2006 International Electron Devices Meeting*, déc. 2006, p. 1-4, doi: 10.1109/IEDM.2006.346973.
[52] D. Fiore, M. Campajola, C. Nappi, E. Sarnelli, et F. D. Capua, « Random Telegraph Signal Investigation in Different CMOS SPAD Layouts », in *2018 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Proceedings (NSS/MIC)*, nov. 2018, p. 1-4, doi: 10.1109/NSSMIC.2018.8824585.
[53] J. Yu, D. J. Collins, A. Yasan, S. Bae, et S. Ramaswami, « Hot pixel reduction in CMOS image sensor pixels », in *Digital Photography VI*, janv. 2010, vol. 7537, p. 753704, doi: 10.1117/12.839118.
[54] M. Deveaux, G. Claus, G. Deptuch, W. Dulinski, Y. Gornushkin, et M. Winter, « Neutron radiation hardness of monolithic active pixel sensors for charged particle tracking », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.*, vol. 512, n° 1, p. 71-76, oct. 2003, doi: 10.1016/S0168-9002(03)01878-3.
[55] J. R. Srour, C. J. Marshall, et P. W. Marshall, « Review of displacement damage effects in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 50, n° 3, p. 653-670, juin 2003, doi: 10.1109/TNS.2003.813197.

[56] J. H. Crawford, « Radiation Effects in Diamond Lattice Semiconductors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 10, n° 5, p. 1-10, nov. 1963, doi: 10.1109/TNS.1963.4323298.
[57] J. C. Bourgoin et N. de Angelis, « Radiation-induced defects in solar cell materials », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 66, n° 1, p. 467-477, févr. 2001, doi: 10.1016/S0927-0248(00)00208-7.
[58] R. L. Pease, E. W. Enlow, G. L. Dinger, et P. Marshall, « Comparison of Proton and Neutron Carrier Removal Rates », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 34, n° 6, p. 1140-1146, déc. 1987, doi: 10.1109/TNS.1987.4337443.
[59] P. Arnolda, « La création de défauts de déplacements atomiques dans le silicium et son impact sur les composants électroniques à applications spatiales », ISAE Toulouse, 2011.
[60] S. Wood *et al.*, « Simulation of Radiation Damage in Solids », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 28, n° 6, p. 4107-4112, déc. 1981, doi: 10.1109/TNS.1981.4335684.
[61] L. F. Makarenko, S. B. Lastovski, F. P. Korshunov, L. I. Murin, et M. Moll, « Primary defect transformations in high-resistivity p-type silicon irradiated with electrons at cryogenic temperatures », *Phys. B Condens. Matter*, vol. 404, n° 23, p. 4561-4564, déc. 2009, doi: 10.1016/j.physb.2009.08.101.
[62] K. Nordlund *et al.*, « Primary radiation damage: A review of current understanding and models », *J. Nucl. Mater.*, vol. 512, p. 450-479, déc. 2018, doi: 10.1016/j.jnucmat.2018.10.027.
[63] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single Particle Displacement Damage in Silicon; Part II: Generation and Long-Time Relaxation of Damage Structure », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 141-148, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2628089.
[64] G. D. Watkins et J. W. Corbett, « Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of the Divacancy », *Phys. Rev.*, vol. 138, n° 2A, p. A543-A555, avr. 1965, doi: 10.1103/PhysRev.138.A543.
[65] B. R. Gossick, « Disordered Regions in Semiconductors Bombarded by Fast Neutrons », *J. Appl. Phys.*, vol. 30, p. 1214-1218, août 1959, doi: 10.1063/1.1735295.
[66] G. D. Watkins, « Intrinsic defects in silicon », *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 3, n° 4, p. 227-235, août 2000, doi: 10.1016/S1369-8001(00)00037-8.
[67] A. Chovet et P. Masson, « Cours de Physique des Semi-conducteurs ». Ecole Polytechnique Universitare de Marseille, 2005 2004, Consulté le: avr. 23, 2018. [En ligne]. Disponible sur: http://clasesadomicilio.wifeo.com/documents/Cours-de-physique-des-SC---Poly---BAC-3.pdf.
[68] P. A. M. Dirac et R. H. Fowler, « On the theory of quantum mechanics », *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*, vol. 112, n° 762, p. 661-677, oct. 1926, doi: 10.1098/rspa.1926.0133.
[69] A. Zannoni, « On the Quantization of the Monoatomic Ideal Gas », *ArXivcond-Mat9912229*, déc. 1999, Consulté le: juin 08, 2020. [En ligne]. Disponible sur: http://arxiv.org/abs/cond-mat/9912229.
[70] « Physique des semi-conducteurs : Fondamentaux - Semi-conducteurs intrinsèques ». http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_M05_C02/co/Contenu_03.html (consulté le juin 02, 2020).
[71] Y. P. Varshni, « Temperature dependence of the energy gap in semiconductors », *Physica*, vol. 34, n° 1, p. 149-154, janv. 1967, doi: 10.1016/0031-8914(67)90062-6.
[72] K. O'Donnell et X. Chen, « Temperature Dependence of Semiconductor Band Gaps », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 58, p. 2924-2926, juill. 1991, doi: 10.1063/1.104723.
[73] « 2.2.5 Temperature dependence of the energy bandgap ». https://ecee.colorado.edu/~bart/book/eband5.htm (consulté le juin 03, 2020).
[74] D. A. Neamen, *Semiconductor physics and devices: basic principles*, 3rd ed. Boston: McGraw-Hill, 2003.
[75] M. Moll, « Radiation damage in silicon particle detectors », Ph.D Thesis, University of Hamburg, 1999.
[76] S. M. Sze, « Semiconductor devices, physics and technology ». Hoboken, N.J. : John Wiley, 2002, Consulté le: juin 08, 2020. [En ligne]. Disponible sur: https://trove.nla.gov.au/version/46608446.

[77] L. Boltzmann, « Lectures on Gas Theory », *Univ. Berkeley Press*, vol. 17, nº 3, p. 76-76, mars 1964, doi: 10.1063/1.3051493.
[78] P. M. Fahey, P. B. Griffin, et J. D. Plummer, « Point defects and dopant diffusion in silicon », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 61, nº 2, p. 289-384, avr. 1989, doi: 10.1103/RevModPhys.61.289.
[79] A. F. Voter, « INTRODUCTION TO THE KINETIC MONTE CARLO METHOD », in *Radiation Effects in Solids*, Dordrecht, 2007, p. 1-23, doi: 10.1007/978-1-4020-5295-8_1.
[80] S. Arrhenius, « PAPER 2 - ON THE REACTION VELOCITY OF THE INVERSION OF CANE SUGAR BY ACIDS††An extract, translated from the German, from an article in Zeitschrift für Physikalische Chemie, 4, 226 (1889). », in *Selected Readings in Chemical Kinetics*, M. H. Back et K. J. Laidler, Éd. Pergamon, 1967, p. 31-35.
[81] K. Nordlund, « Kinetic Monte Carlo ». 2006, Consulté le: août 23, 2018. [En ligne]. Disponible sur: http://beam.acclab.helsinki.fi/~knordlun/mc/mc8nc.pdf.
[82] A. O. Evwaraye et E. Sun, « Electron-irradiation-induced divacancy in lightly doped silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 47, nº 9, p. 3776-3780, sept. 1976, doi: 10.1063/1.323260.
[83] M. Trochet, L. K. Béland, J.-F. Joly, P. Brommer, et N. Mousseau, « Diffusion of point defects in crystalline silicon using the kinetic activation-relaxation technique method », *Phys. Rev. B*, vol. 91, nº 22, p. 224106, juin 2015, doi: 10.1103/PhysRevB.91.224106.
[84] N. Mousseau *et al.*, « Following atomistic kinetics on experimental timescales with the kinetic Activation–Relaxation Technique », *Comput. Mater. Sci.*, vol. 100, p. 111-123, avr. 2015, doi: 10.1016/j.commatsci.2014.11.047.
[85] F. El-Mellouhi, N. Mousseau, et P. Ordejón, « Sampling the diffusion paths of a neutral vacancy in silicon with quantum mechanical calculations », *Phys. Rev. B*, vol. 70, nº 20, p. 205202, nov. 2004, doi: 10.1103/PhysRevB.70.205202.
[86] M. Tang, L. Colombo, J. Zhu, et T. Diaz de la Rubia, « Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studiesof self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes », *Phys. Rev. B*, vol. 55, nº 21, p. 14279-14289, juin 1997, doi: 10.1103/PhysRevB.55.14279.
[87] M. Jung, R. Gunawan, R. Braatz, et E. Seebauer, « A Simplified Picture for Transient Enhanced Diffusion of Boron in Silicon », *J. Electrochem. Soc. - J ELECTROCHEM SOC*, vol. 151, janv. 2004, doi: 10.1149/1.1628238.
[88] I. D. Konozenko, A. K. Semenyuk, et V. I. Khivrich, « Radiation Defects Created by Co60 γ-Rays in p- and n-Type Si of High Purity », *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys. - PHYS STATUS SOLIDI B-BASIC SO*, vol. 35, p. 1043-1052, janv. 1969, doi: 10.1002/pssb.19690350257.
[89] G. D. Watkins et J. W. Corbett, « Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance and Electron-Nuclear Double Resonance of the Si-E Center », *Phys. Rev.*, vol. 134, nº 5A, p. A1359-A1377, juin 1964, doi: 10.1103/PhysRev.134.A1359.
[90] G. D. Watkins, J. W. Corbett, et R. M. Walker, « Spin Resonance in Electron Irradiated Silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 30, nº 8, p. 1198-1203, août 1959, doi: 10.1063/1.1735293.
[91] A. Hallén, N. Keskitalo, F. Masszi, et V. Nágl, « Lifetime in proton irradiated silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 79, nº 8, p. 3906-3914, avr. 1996, doi: 10.1063/1.361816.
[92] S. D. Brotherton et P. Bradley, « Defect production and lifetime control in electron and γ-irradiated silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 53, nº 8, p. 5720-5732, août 1982, doi: 10.1063/1.331460.
[93] G. D. Watkins et J. R. Troxell, « Negative-U Properties for Point Defects in Silicon », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 44, nº 9, p. 593-596, mars 1980, doi: 10.1103/PhysRevLett.44.593.
[94] R. D. Harris, J. L. Newton, et G. D. Watkins, « Negative- U Properties for Interstitial Boron in Silicon », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 48, nº 18, p. 1271-1274, mai 1982, doi: 10.1103/PhysRevLett.48.1271.
[95] P. W. Anderson, « Model for the Electronic Structure of Amorphous Semiconductors », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 34, nº 15, p. 953-955, avr. 1975, doi: 10.1103/PhysRevLett.34.953.
[96] H. A. Jahn, E. Teller, et F. G. Donnan, « Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states - I—Orbital degeneracy », *Proc. R. Soc. Lond. Ser. - Math. Phys. Sci.*, vol. 161, nº 905, p. 220-235, juill. 1937, doi: 10.1098/rspa.1937.0142.

[97] C. Claeys *et al.*, « Random telegraph signal noise in advanced high performance and memory devices », in *2016 31st Symposium on Microelectronics Technology and Devices (SBMicro)*, août 2016, p. 1-6, doi: 10.1109/SBMicro.2016.7731315.
[98] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single-Particle Displacement Damage in Silicon; Part III: First Principle Characterization of Defect Properties », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 2, p. 724-731, févr. 2018, doi: 10.1109/TNS.2018.2790843.
[99] C. Tivarus et W. C. McColgin, « Dark Current Spectroscopy of Irradiated CCD Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 3, p. 1719-1724, juin 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.919263.
[100] D. V. Lang, « Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 45, n° 7, p. 3023-3032, juill. 1974, doi: 10.1063/1.1663719.
[101] C. Virmontois, « Analyse des effets des déplacements atomiques induits par l'environnement radiatif spatial sur la conception des imageurs CMOS », Toulouse, ISAE, 2012.
[102] J.-M. Belloir, « Spectroscopie du courant d'obscurité induit par les effets de déplacement atomique des radiations spatiales et nucléaires dans les capteurs d'images CMOS à photodiode pincée », Toulouse, ISAE, 2016.
[103] « Electron Paramagnetic Resonance of Gold in Silicon. II. Cluster Centres - Höhne - 1982 - physica status solidi (b) - Wiley Online Library ». https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/pssb.2221090211 (consulté le janv. 21, 2020).
[104] A. Kastler, « Méthodes optiques d'étude de la résonance magnétique », *Physica*, vol. 17, n° 3, p. 191-204, mars 1951, doi: 10.1016/0031-8914(51)90058-4.
[105] A. Kastler, « Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d'une inégalité de population des niveaux de quantifigation spatiale des atomes. Application à l'expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique », *J Phys Radium*, vol. 11, n° 6, p. 255-265, 1950, doi: 10.1051/jphysrad:01950001106025500.
[106] R. T. Cox, « Détection optique de la résonance magnétique de centres profonds dans les semiconducteurs », *Rev. Phys. Appl.*, vol. 15, n° 3, p. 653-659, 1980, doi: 10.1051/rphysap:01980001503065300.
[107] J. Noolandi, K. M. Hong, et R. A. Street, « A geminate recombination model for photoluminescence decay in plasma-deposited amorphous Si:H », *Solid State Commun.*, vol. 34, n° 1, p. 45-48, avr. 1980, doi: 10.1016/0038-1098(80)90626-2.
[108] P. K. Giri, S. Coffa, et E. Rimini, « Evidence for small interstitial clusters as the origin of photoluminescence W band in ion-implanted silicon », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, n° 3, p. 291-293, janv. 2001, doi: 10.1063/1.1339253.
[109] M. Kira, F. Jahnke, et S. W. Koch, « Quantum Theory of Secondary Emission in Optically Excited Semiconductor Quantum Wells », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, n° 17, p. 3544-3547, avr. 1999, doi: 10.1103/PhysRevLett.82.3544.
[110] R. D. McGrath, J. Doty, G. Lupino, G. Ricker, et J. Vallerga, « Counting of deep-level traps using a charge-coupled device », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 34, n° 12, p. 2555-2557, déc. 1987, doi: 10.1109/T-ED.1987.23348.
[111] U. Biggeri, E. Borchi, M. Bruzzi, Z. Li, et S. Lazanu, « Studies of deep levels in high resistivity silicon detectors irradiated by high fluence fast neutrons using a thermally stimulated current spectrometer », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 41, n° 4, p. 964-970, août 1994, doi: 10.1109/23.322840.
[112] E. Borchi, M. Bruzzi, et M. S. Mazzoni, « Thermally stimulated and leakage current analysis of neutron irriadated silicon detectors », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.*, vol. 310, n° 1, p. 273-276, déc. 1991, doi: 10.1016/0168-9002(91)91042-T.
[113] E. Fretwurst, V. Eremin, H. Feick, J. Gerhardt, Z. Li, et G. Lindström, « Investigation of damage-induced defects in silicon by TCT », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.*, vol. 388, n° 3, p. 356-360, avr. 1997, doi: 10.1016/S0168-9002(97)00002-8.
[114] G. Kramberger *et al.*, « Investigation of Irradiated Silicon Detectors by Edge-TCT », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 57, n° 4, p. 2294-2302, août 2010, doi: 10.1109/TNS.2010.2051957.

[115] G. D. Watkins et J. W. Corbett, « Defects in Irradiated Silicon. I. Electron Spin Resonance of the Si-A Center », *Phys. Rev.*, vol. 121, n° 4, p. 1001-1014, févr. 1961, doi: 10.1103/PhysRev.121.1001.
[116] L. Rubaldo, « Une nouvelle génération d'étude spectroscopique à haute résolution des défauts électroniques dans le silicium : la Laplace DLTS », These de doctorat, Grenoble 1, 2001.
[117] M. McPherson, « Emission and capture processes in radiation-damaged silicon semiconductor diodes », *Curr. Appl. Phys.*, vol. 2, p. 359-364, oct. 2002, doi: 10.1016/S1567-1739(02)00140-2.
[118] A. Luis Santos Ferreira-Resende, « An ab initio Study of Deep-Level Defects in Silicon », PhD Thesis, University of Exeter, 1999.
[119] F. Domengie, P. Morin, et D. Bauza, « Modeling the dark current histogram induced by gold contamination in complementary-metal-oxide-semiconductor image sensors », *J. Appl. Phys.*, vol. 118, n° 2, p. 024501, juill. 2015, doi: 10.1063/1.4922969.
[120] V. Kalyanaraman et V. Kumar, « Properties of the gold related acceptor level in silicon », *Phys. Status Solidi A*, vol. 70, n° 1, p. 317-323, 1982, doi: 10.1002/pssa.2210700137.
[121] G. Bemski, « Recombination Properties of Gold in Silicon », *Phys. Rev.*, vol. 111, n° 6, p. 1515-1518, sept. 1958, doi: 10.1103/PhysRev.111.1515.
[122] E. Schibli et A. G. Milnes, « Lifetime and capture cross-section studies of deep impurities in silicon », *Mater. Sci. Eng.*, vol. 2, n° 5, p. 229-241, janv. 1968, doi: 10.1016/0025-5416(68)90036-0.
[123] M. Moll, H. Feick, E. Fretwurst, G. Lindström, et C. Schütze, « Comparison of defects produced by fast neutrons and 60Co-gammas in high-resistivity silicon detectors using deep-level transient spectroscopy », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.*, vol. 388, n° 3, p. 335–339, 1997.
[124] M. Mikelsen *et al.*, « Annealing of the divacancy-oxygen and vacancy-oxygen complexes in silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 75, n° 15, p. 155202, avr. 2007, doi: 10.1103/PhysRevB.75.155202.
[125] C. A. Londos, L. Fytros, et G. Georgiou, « IR Studies of Oxygen-Yacancy Related Defects in Irradiated Silicon », *Defect Diffus. Forum*, vol. 171–172, p. 1-32, janv. 1999, doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.171-172.1.
[126] V. P. Markevich, A. R. Peaker, B. Hamilton, S. B. Lastovskii, et L. I. Murin, « Donor levels of the divacancy-oxygen defect in silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 115, n° 1, p. 012004, janv. 2014, doi: 10.1063/1.4837995.
[127] E. V. Monakhov, B. S. Avset, A. Hallén, et B. G. Svensson, « Formation of a double acceptor center during divacancy annealing in low-doped high-purity oxygenated Si », *Phys. Rev. B*, vol. 65, n° 23, p. 233207, juin 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.65.233207.
[128] M. -A. Trauwaert, J. Vanhellemont, H. E. Maes, A. -M. Van Bavel, G. Langouche, et P. Clauws, « Low-temperature anneal of the divacancy in p-type silicon: A transformation from V2 to VxOy complexes? », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 66, n° 22, p. 3056-3057, mai 1995, doi: 10.1063/1.114276.
[129] M. W. Hüppi, « Proton irradiation of silicon: Complete electrical characterization of the induced recombination centers », *J. Appl. Phys.*, vol. 68, n° 6, p. 2702-2707, sept. 1990, doi: 10.1063/1.346470.
[130] P. Hazdra, K. Brand, et J. Vobecký, « Defect distribution in MeV proton irradiated silicon measured by high-voltage current transient spectroscopy », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 192, n° 3, p. 291-300, mai 2002, doi: 10.1016/S0168-583X(01)01161-2.
[131] M. Petasecca, F. Moscatelli, D. Passeri, et G. U. Pignatel, « Numerical Simulation of Radiation Damage Effects in p-Type and n-Type FZ Silicon Detectors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 53, n° 5, p. 2971-2976, oct. 2006, doi: 10.1109/TNS.2006.881910.
[132] S. D. Brotherton, G. J. Parker, et A. Gill, « Photoionization cross section of electron irradiation induced levels in silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 54, n° 9, p. 5112-5116, sept. 1983, doi: 10.1063/1.332732.
[133] R. Radu, I. Pintilie, L. C. Nistor, E. Fretwurst, G. Lindstroem, et L. F. Makarenko, « Investigation of point and extended defects in electron irradiated silicon—Dependence on the particle energy », *J. Appl. Phys.*, vol. 117, n° 16, p. 164503, avr. 2015, doi: 10.1063/1.4918924.

[134] *Defects in Semiconductors*. Academic Press, 2015.
[135] J. M. Trombetta et G. D. Watkins, « Identification of an interstitial carbon-interstitial oxygen complex in silicon », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 51, nº 14, p. 1103-1105, oct. 1987, doi: 10.1063/1.98754.
[136] L. J. Munro et D. J. Wales, « Defect migration in crystalline silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 59, nº 6, p. 3969-3980, févr. 1999, doi: 10.1103/PhysRevB.59.3969.
[137] D. Maroudas et R. A. Brown, « Calculation of thermodynamic and transport properties of intrinsic point defects in silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 47, nº 23, p. 15562-15577, juin 1993, doi: 10.1103/PhysRevB.47.15562.
[138] G. H. Gilmer, T. Diaz de la Rubia, D. M. Stock, et M. Jaraiz, « Diffusion and interactions of point defects in silicon: molecular dynamics simulations », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.*, vol. 102, nº 1, p. 247-255, août 1995, doi: 10.1016/0168-583X(95)80150-K.
[139] Y. Kumeda, D. J. Wales, et L. J. Munro, « Transition states and rearrangement mechanisms from hybrid eigenvector-following and density functional theory.: Application to C10H10 and defect migration in crystalline silicon », *Chem. Phys. Lett.*, vol. 341, nº 1, p. 185-194, juin 2001, doi: 10.1016/S0009-2614(01)00334-7.
[140] P. Pichler, « Intrinsic Point Defects », in *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*, P. Pichler, Éd. Vienna: Springer Vienna, 2004, p. 77-227.
[141] D. Caliste et P. Pochet, « Vacancy-Assisted Diffusion in Silicon: A Three-Temperature-Regime Model », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, nº 13, p. 135901, sept. 2006, doi: 10.1103/PhysRevLett.97.135901.
[142] M. M. Sokoloski, « Structure and kinetics of defects in silicon », NASA, Washington D.C, Technical Note NASA TN D-4154, nov. 1967. Consulté le: févr. 07, 2020. [En ligne]. Disponible sur: https://ntrs.nasa.gov/archive/nasa/casi.ntrs.nasa.gov/19670030860.pdf.
[143] N. Ganagona, L. Vines, E. V. Monakhov, et B. G. Svensson, « Formation kinetics of trivacancy-oxygen pairs in silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 116, nº 12, p. 124510, sept. 2014, doi: 10.1063/1.4896066.
[144] M. Furuhashi et K. Taniguchi, « Diffusion and dissociation mechanisms of vacancy-oxygen complex in silicon », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 86, nº 14, p. 142107, avr. 2005, doi: 10.1063/1.1897433.
[145] P. Pichler, « Impurity Diffusion in Silicon », in *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*, P. Pichler, Éd. Vienna: Springer Vienna, 2004, p. 229-279.
[146] J. Coutinho, R. Jones, S. Öberg, et P. R. Briddon, « The formation, dissociation and electrical activity of divacancy-oxygen complexes in Si », *Phys. B Condens. Matter*, vol. 340-342, p. 523-527, déc. 2003, doi: 10.1016/j.physb.2003.09.143.
[147] P. Werner, U. Gösele, H.-J. Gossmann, et D. C. Jacobson, « Carbon diffusion in silicon », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, nº 17, p. 2465-2467, oct. 1998, doi: 10.1063/1.122483.
[148] P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, et J. M. Poate, « The effect of carbon on diffusion in silicon », *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 36, nº 1, p. 275-281, janv. 1996, doi: 10.1016/0921-5107(95)01273-7.
[149] R. B. Capaz, A. Dal Pino, et J. D. Joannopoulos, « Identification of the migration path of interstitial carbon in silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 50, nº 11, p. 7439-7442, sept. 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.50.7439.
[150] P. Pichler, « Isovalent Impurities », in *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*, P. Pichler, Éd. Vienna: Springer Vienna, 2004, p. 281-329.
[151] C. Haas, « The diffusion of oxygen in silicon and germanium », *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 15, nº 1, p. 108-111, août 1960, doi: 10.1016/0022-3697(60)90106-2.
[152] R. C. Newman et R. Jones, « Chapter 8 Diffusion of Oxygen in Silicon », in *Semiconductors and Semimetals*, vol. 42, R. K. Willardson, A. C. Beer, et E. R. Weber, Éd. Elsevier, 1994, p. 289-352.
[153] R. A. Logan et A. J. Peters, « Diffusion of Oxygen in Silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 30, nº 11, p. 1627-1630, nov. 1959, doi: 10.1063/1.1735025.
[154] G. D. Watkins, J. W. Corbett, et R. S. McDonald, « Diffusion of oxygen in silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 53, nº 10, p. 7097-7098, oct. 1982, doi: 10.1063/1.330017.

[155] Y. J. Lee, J. von Boehm, M. Pesola, et R. M. Nieminen, « First-principles study of migration, restructuring, and dissociation energies of oxygen complexes in silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 65, n° 8, p. 085205, févr. 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.65.085205.
[156] J. Dzelme, I. Ertsinsh, B. Zapol, et A. Misiuk, « Structure and diffusion of oxygen and silicon interstitials in silicon », *J. Alloys Compd.*, vol. 286, n° 1, p. 254-257, mai 1999, doi: 10.1016/S0925-8388(98)01016-0.
[157] S. Öberg *et al.*, « First stage of oxygen aggregation in silicon: the oxygen dimer », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, n° 14, p. 2930, 1998.
[158] R. C. Newman, « Defects in silicon », *Rep. Prog. Phys.*, vol. 45, 1982.

Chapitre III : Le courant d'obscurité : son origine et ses méthodes d'estimation

Le chapitre I a permis de montrer que les différents processus de fabrication et d'usinage du silicium sont des sources d'impuretés et de défauts cristallins. Ces espèces étrangères sont susceptibles d'introduire des niveaux intermédiaires d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur. Si ces défauts sont situés à proximité ou dans le volume sensible du pixel, les charges générées par ces défauts peuvent atteindre la région de collection du pixel et seront intégrées au signal photo-généré. Ce signal parasite sera donc propre à chaque pixel dans le capteur qui sort d'usine. C'est un bruit intrinsèque qu'on ne peut supprimer, présent même en l'absence d'excitation lumineuse. C'est ce que l'on appelle le courant d'obscurité. Les impuretés cristallines n'étant pas réparties de manière identique dans chaque pixel, on observe une disparité sur l'intensité du courant d'obscurité dans la matrice de pixels. Cette disparité forme ainsi une distribution du courant d'obscurité, appelée Dark Current Non Uniformity en anglais, abrégé DCNU.

Nous avons vu également au cours du chapitre II que les interactions entre le rayonnement énergétique issu de l'environnement spatial et la matière qui compose le capteur d'image sont une source de défauts cristallins complexes électriquement actifs. Ces défauts complexes, résultats de l'exposition aux particules énergétiques, vont augmenter l'amplitude moyenne du courant d'obscurité dans chaque pixel de la matrice. De manière similaire aux impuretés disséminées pendant la fabrication du composant électronique, les défauts complexes ne vont pas être introduits en quantité égale dans chaque pixel car l'exposition au rayonnement énergétique est relativement uniforme, mais ses conséquences ne le sont pas. De ce fait, la matrice de pixels présente une distribution de l'augmentation du courant d'obscurité.

Le courant d'obscurité possède deux sources distinctes, liées à la localisation des centres de génération de charges. On distingue ainsi le courant de diffusion et le courant de génération. L'estimation par le calcul de ce courant d'obscurité a fait l'objet de nombreuses recherches scientifiques depuis au moins cinq décennies. Les méthodes analytiques et numériques permettant d'estimer le courant d'obscurité dans les imageurs irradiés seront évoquées dans ce chapitre, avant de nous concentrer sur la méthode utilisée au cours des travaux de thèse présentés dans ce manuscrit. Les sources du courant d'obscurité seront également expliquées avec plus de précisions.

III.1 Définition du courant d'obscurité

Même dans l'obscurité totale, un imageur enregistre un signal non nul à cause de ces charges additionnelles. Ce signal correspond au courant d'obscurité. L'apparition de ce courant parasite est favorisée par le mode de fonctionnement des imageurs lorsqu'ils capturent une scène. Le pixel étant polarisé en inverse, une zone de déplétion est créée au sein de la zone sensible du pixel (cf chapitre I). Ce manque de porteurs de charge incite les défauts et états d'interface à générer des charges pour pallier ce manque et ainsi tendre vers la densité de porteurs à l'équilibre thermodynamique.

Le courant d'obscurité induit une diminution de la dynamique utile de l'imageur [1]. En conséquence, le signal des objets faiblement lumineux se confond avec le bruit [2]. Dans le cas des senseurs stellaires (connus également sous le nom « star trackers » en anglais, voir Figure III.1), la mauvaise détection des objets peut avoir des conséquences problématiques, puisque leur rôle est d'identifier les constellations d'étoiles pour fournir une position et une orientation aux satellites en orbite. Si un objet faiblement lumineux n'est pas détecté car est confondu avec le bruit, ou à l'inverse

si un pixel chaud est confondu avec une étoile très lumineuse, l'estimation de l'orientation du satellite sera plus longue à effectuer [3]. L'identification et l'estimation du courant d'obscurité dans les imageurs est donc encore aujourd'hui un sujet à fort intérêt dans le domaine aérospatial.



Figure III.1 : Senseurs stellaires ou « star trackers » en anglais, de la gamme Hydra du constructeur Sodern. Les matrices de pixels des senseurs stellaires sont essentielles pour identifier les constellations d'étoiles, afin de fournir une orientation et une position au système de contrôle d'attitude et d'orbite du satellite. Crédits : Sodern

Le courant d'obscurité présente deux contributions distinctes : le courant de diffusion et le courant de génération [4]. Dans la suite de cette section, ces deux contributions seront décrites, ainsi que les paramètres les influençant.

III.1.1 Le courant de génération

Le courant de génération provient de la génération thermique de paires électron-trou dans la zone de déplétion du pixel. On distingue la contribution volumique et la contribution surfacique du courant de génération. La contribution volumique du courant d'obscurité trouve sa source dans les défauts cristallins qui génèrent des charges, notée $I_{gen,vol}$. La contribution surfacique quant à elle est liée aux états d'interface en contact avec la zone de déplétion, notée $I_{gen,surf}$ [5]. Il est possible d'exprimer le courant de génération volumique à partir de l'équation du taux de génération thermique de paires électron-trou (dans le cas où $np \ll n_i^2$) décrite dans le chapitre II (paragraphe II.5.2, équation II.39) :

$$I_{gen,vol} = qWS \sum_{x=1}^{N} \frac{N_{t,x}\sigma_{n,x}\sigma_{p,x}v_{th_n}v_{th_p}n_i}{\sigma_{n,x}v_{th_n}\exp\left(\frac{E_{t,x}-E_{F_i}}{k_BT}\right)+\sigma_{p,x}v_{th_p}\exp\left(-\frac{E_{t,x}-E_{F_i}}{k_BT}\right)} = qWS\sum_{x=1}^{N} U_{G,x} \quad \text{(III.1)}$$

Avec $U_{G,x}$ le taux de génération thermique volumique de paires électron-trou d'une espèce de défauts x (en $paires.s^{-1}.m^{-3}$), $N_{t,x}$ la densité volumique de défauts x (en $défauts.m^{-3}$), q la charge d'un électron (en C), W la profondeur de la zone de déplétion (en m) et S la surface de la zone de la déplétion (en m^2). Le terme de somme est là pour rappeler que N espèces de défauts peuvent cohabiter au sein d'un même pixel. De cette manière, chaque population de défauts va contribuer au courant de génération selon ses caractéristiques électriques et sa concentration. En supposant que la densité de pièges est uniforme dans le volume du pixel, on peut réécrire le courant de génération volumique en fonction de la durée de vie moyenne des porteurs de charges τ_g [6] :

$$I_{gen,vol} = \frac{qWSn_i}{\tau_g} \quad \text{(III.2)}$$

Où le terme τ_g s'exprime :

$$\tau_g = \frac{1}{n_i} \frac{1}{\sum_{x=1}^{N} U_{G,x}} \quad \text{(III.3)}$$

La contribution surfacique s'exprime de manière similaire [6] :

$$I_{gen,surf} = qS \sum_{x=1}^{N} \frac{N_{S,x}\sigma_{sn,x}\sigma_{sp,x}v_{th_n}v_{th_p}n_i}{\sigma_{sn,x}v_{th_n}\exp\left(\frac{E_{st,x}-E_{F_i}}{k_BT}\right)+\sigma_{sp,x}v_{th_p}\exp\left(-\frac{E_{st,x}-E_{F_i}}{k_BT}\right)} = qS\sum_{x=1}^{N} U_{S,x} \quad \text{(III.4)}$$

Avec $N_{S,x}$ la densité surfacique de centres de génération de type x, $U_{S,x}$ le taux de génération thermique surfacique de paires électron-trou. Une optimisation récente des imageurs permet de réduire la contribution surfacique, en limitant la surface en contact avec la zone de déplétion [7], [8].

III.1.2 Le courant de diffusion des porteurs minoritaires

Le courant de diffusion est engendré par le même mécanisme que le courant de génération, à la différence près que les charges sont générées en dehors du volume de déplétion, c'est-à-dire dans les zones quasi neutres N et P de la jonction. Pour qu'elles soient intégrées au paquet de photo-charges, ces charges doivent migrer de leur centre de génération jusqu'à la zone de déplétion. Une fois arrivées à proximité de la zone de charge d'espace, le champ électrique va permettre la collection de ces charges. Ce processus de diffusion est régi par les propriétés de diffusion des électrons et des trous. Le courant de diffusion est la somme du courant d'électrons dans la région P et du courant de trous dans la région N et peut s'écrire sous la forme [9]:

$$I_{diff} = qSn_i^2\left(\frac{D_n}{N_A L_n}+\frac{D_p}{N_D L_p}\right) \quad \text{(III.5)}$$

Avec $D_{n,p}$ la constante de diffusion des électrons et des trous, $L_{n,p}$ la longueur de diffusion des électrons et des trous et $N_{A,D}$ la concentration de dopants de type accepteur et donneur respectivement.

III.1.3 Dépendances paramétriques du courant d'obscurité

Bien que le courant de génération possède une contribution surfacique et volumique, la contribution surfacique est généralement négligée car on suppose que la densité de pièges en surface du pixel est négligeable comparée à la densité de pièges en volume. Le courant d'obscurité total peut donc s'écrire comme la somme du courant de génération volumique et du courant de diffusion :

$$I_{obs} = I_{gén,vol} + I_{diff} = \frac{qWSn_i}{\tau_g} + qSn_i^2\left(\frac{D_n}{N_A L_n}+\frac{D_p}{N_D L_p}\right) \quad \text{(III.6)}$$

Le courant d'obscurité est très sensible à la température, puisque celui-ci double environ tous les $7-8\,K$. Pour faire apparaître cette dépendance en température dans l'expression du courant

d'obscurité, il faut reprendre l'expression de la densité de porteurs intrinsèque présentée dans le chapitre II (paragraphe II.5.2, équation II.24) en développant les termes N_C et N_V :

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) = 2\left(\frac{2\pi k}{h^2}\right)^{3/2} m_n^{*\,3/4} m_p^{*\,3/4} T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) = A \times T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad \text{(III.7)}$$

Avec A le terme regroupant toutes les constantes. En développant le terme n_i dans l'expression du courant d'obscurité, ce dernier s'écrit sous la forme [4]:

$$I_{obs} = \frac{qWS}{\tau_g} A \times T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) + qS\left(\frac{D_n}{N_A L_n} + \frac{D_p}{N_D L_p}\right) A^2 \times T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad \text{(III.8)}$$

Par le biais de cette équation, le courant de génération a pu être identifié comme ayant une dépendance en $T^{\frac{3}{2}}$ et le courant de diffusion en T^3, d'où la forte sensibilité du courant d'obscurité à la température

III.1.4 Dispersion du courant d'obscurité et les moyens actuels de limitation

Le paragraphe III.1.1 a montré que l'intensité du courant d'obscurité dépend de la concentration de défauts cristallins. Les propriétés électriques et la densité de chaque population de défauts contenue dans un pixel vont déterminer l'intensité du courant d'obscurité. Dans un premier temps, ce sont les populations d'impuretés qui vont déterminer le courant d'obscurité du pixel à la sortie d'usine. Le chapitre I (section I.5) a montré que la densité et les espèces mises en jeu pouvaient différer d'un pixel à l'autre à cause des nombreux procédés de fabrication et d'usinage, engendrant une première disparité de l'intensité du courant d'obscurité d'un pixel à l'autre. Ceci est la première cause de la dispersion du courant d'obscurité.

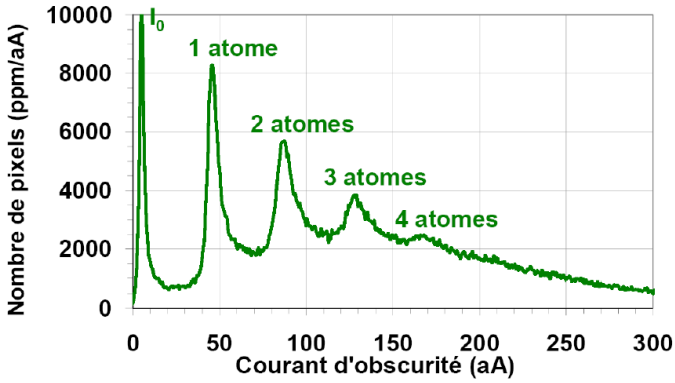


Figure III.2 : Histogramme du courant d'obscurité d'un imageur contaminé avec des atomes d'or [10]. Certains pixels ont reçu plus de contaminants d'or que d'autres. Plus il y a de contaminants, plus le courant d'obscurité est élevé. A l'inverse, certains pixels n'ont pas n'ont pas été contaminés par les atomes d'or (pic intrinsèque I_0). On observe donc une dispersion du courant d'obscurité sur l'ensemble d'une matrice de pixels.

Ensuite, les défauts introduits dans le pixel lors de son exposition aux particules énergétiques sont responsables de l'augmentation du courant d'obscurité. Les effets de l'irradiation étant non uniformes, certains pixels vont subir plus de dommages que leurs voisins (voir Figure III.2). Au cours du chapitre II (paragraphe II.5.3), nous avons vu que les phénomènes de réorganisation de la matière pouvaient engendrer la création d'espèces de défauts diverses et variées. Ainsi, chaque cascade de dommage ne va pas introduire des populations de défauts identiques. C'est la seconde cause de la dispersion du courant d'obscurité, également appelée distribution du courant d'obscurité ou encore non uniformité du courant d'obscurité (Dark Current Non Uniformity en anglais, abrégé DCNU). Une illustration de la non uniformité du courant d'obscurité est présentée en Figure III.3.

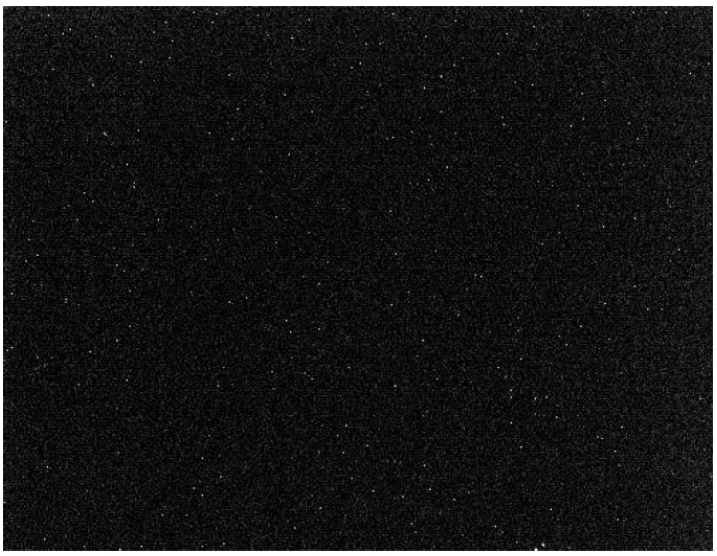


Figure III.3 : Distribution non uniforme du courant d'obscurité (Dark Current Non Uniformity). Ce cliché a été enregistré dans le noir total et pourtant certains pixels présentent une forte intensité lumineuse : ce sont les pixels chauds (hot pixels en anglais).

De par leur design, les imageurs sont entourés d'un blindage conséquent qui arrête une partie des particules énergétiques, ou tout du moins ralentit ces particules si elles sont de haute énergie. Le spectre en énergie reçu par un capteur d'image n'est donc pas identique au spectre en énergie de l'environnement spatial. Pour un spectre de protons représentatif de cet environnement, un imageur recevra en moyenne des protons d'une dizaine de MeV. A cause de sa fonction, le capteur d'image n'est protégé que sur les côtés, la face sensible étant orientée vers le milieu extérieur.

Un moyen simple de réduire le courant d'obscurité est de refroidir l'imageur. Cependant les contraintes d'alimentation électrique et de coût d'un tel dispositif rendent cette solution difficilement réalisable dans le cas d'une mission spatiale. A titre d'exemple, un kilogramme d'équipements spatiaux peut être facturé entre 4700 à 12600 $ pour un lancement via un *Falcon 9* de la compagnie *SpaceX*, ou encore d'environ 5600 à 10600 $ selon une estimation en 2020 pour *Ariane 6* [11]. Même si les industries du secteur aérospatial tentent de réduire les coûts de production de leur lanceur tout en augmentant leur tonnage (capacité de transport) pour rester compétitifs, le coût de lancement reste une part très importante du budget d'une mission spatiale. Par conséquent, l'ajout de masse est l'une des principales contraintes de développement d'un instrument scientifique. Dans le domaine de l'astronomie, une solution classique consiste à soustraire un cliché effectué dans le noir par l'imageur aux images prises par ce dernier à temps d'exposition équivalent. Cette opération ajoute cependant du bruit, puisque les bruits du cliché d'obscurité et de l'image s'ajoutent de manière quadratique [4]. Finalement, pour tenter de contrer les effets de l'augmentation du courant d'obscurité, certaines recherches se sont concentrées sur des algorithmes de correction du courant d'obscurité embarqués directement dans les satellites. Le but de ce type d'algorithme est de corriger les images en temps réel en fonction de la connaissance du courant d'obscurité au moment de la mesure [2], [12].

En parallèle de la recherche de solutions techniques pour limiter l'augmentation du courant d'obscurité dans les imageurs, les scientifiques ont mené de nombreuses de recherches pour comprendre les mécanismes physiques à l'origine de l'augmentation du courant d'obscurité. Par extension à ces recherches, les efforts se sont portés en grande partie sur la proposition de méthodes permettant de prédire et d'anticiper cette dégradation des performances du capteur d'image au cours de la vie d'un satellite. Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans la continuité de ces efforts de recherche, pour tenter d'estimer de la manière la plus réaliste possible la distribution du courant d'obscurité d'un imageur après avoir été exposé aux particules énergétiques typiquement

rencontrées dans l'environnement spatial. Dans la section suivante, les principales techniques d'estimation du courant d'obscurité après irradiation seront rappelées avant de décrire plus en détails la technique ayant servi de point de départ aux travaux de recherche réalisés au cours de la thèse.

III.2 Historique des méthodes de prédiction du courant d'obscurité

Les facteurs de dommage

Les premières études théoriques et expérimentales des effets des déplacements atomiques sur des matériaux semi-conducteurs remontent aux années 1940 [13]. A cette époque les imageurs à base de semi-conducteurs n'existaient pas encore (cf chapitre I, paragraphe I.1), les tests étaient donc réalisés sur des composants simples tels que des transistors ou des jonctions PN. Lorsque les premiers imageurs CCD sont nés dans les années 1950, l'intérêt pour leur tenue aux radiations a rapidement progressé [14]. Ce n'est cependant qu'au cours des années 1970 que les premières techniques d'estimation de l'augmentation du courant d'obscurité ont été proposées. Elles reposent notamment sur l'utilisation de « facteurs de dommage », coefficient de proportionnalité permettant de relier une exposition radiative à la dégradation d'une grandeur physique caractéristique au composant testé. L'utilisation d'un facteur de dommage permet de s'affranchir de contraintes comme la connaissance très précise du composant testé, des propriétés de migration des électrons et des trous et des mécanismes de réorganisation dominants dans le composant étudié. Le facteur de dommage est donc un coefficient de proportionnalité qui permet d'effectuer des hypothèses simplificatrice pour faciliter l'estimation du courant d'obscurité après irradiation.

Srour par exemple a proposé un facteur de dommage centré sur l'augmentation du nombre de porteurs de charge générés après irradiation défini pour un type de particule et une énergie donnés [15]. On trouve également le facteur d'endommagement lié à l'augmentation du courant de fuite (équivalent au courant d'obscurité) dans la région déplétée par unité de volume causée par une fluence d'un type de particule donnée, défini également à une énergie et type de particule donnés [16]. Il existe un dérivé de ce coefficient appelé le facteur de dommage de particule [17], égal au produit du facteur d'endommagement lié à l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (courant d'obscurité par unité de surface) et de la profondeur de la zone déplétée. Les auteurs ont montré que ce coefficient évoluait linéairement avec le NIEL, la perte d'énergie par processus non-ionisants. Dans le même temps, *Marshall* [18], [19] a proposé le facteur de dommage de l'énergie de dommage, reliant l'augmentation moyenne du courant d'obscurité et l'énergie de dommage déposée dans la zone en déplétion d'un pixel. L'énergie de dommage n'est autre que l'énergie absorbée par les atomes par processus non-ionisants.

Enfin, *Srour* a combiné les connaissances accumulées sur les facteurs de dommage pour proposer le facteur de dommage universel pour l'augmentation du courant d'obscurité dans les composants à base de silicium [20]. Ce coefficient constitue la base de la modélisation moderne de l'augmentation du courant d'obscurité. Ces travaux font office de référence dans la communauté depuis deux décennies et ont été utilisés par de nombreux auteurs par la suite pour appuyer leurs résultats [7], [21]–[24]. La technique d'estimation originale développée par l'ONERA utilise également le facteur de dommage universel proposé par *Srour* [25]. Son incorporation dans le modèle de l'ONERA sera précisée dans le paragraphe III.3.2 de ce chapitre. Le facteur de dommage universel du courant d'obscurité exprime la proportionnalité entre l'augmentation du taux de génération thermique de paires électron-trou dans le volume de déplétion par unité de dose de dommage de déplacement déposée, soit en $porteurs\ de\ charge/(cm^3.s)\ /\ (MeV/g)$ [20]. Ce coefficient est qualifié d'universel car il est applicable à n'importe quel dispositif électronique à base de silicium utilisant une zone de déplétion comme région de collection des charges électriques. Aussi, ce coefficient de proportionnalité

est utilisable pour n'importe quelle fluence de particules, pour de nombreux types de particules comme les protons, neutrons ou ions lourds, à l'exception des électrons de basse énergie. Contrairement aux autres coefficients de dommage cités précédemment, l'utilisation de ce coefficient est indépendante du rayonnement utilisé pour irradier le composant en question. Le facteur de dommage universel, noté K_{dark_0}, est égal à $1{,}9 \times 10^5\ porteurs\ de\ charge/(cm^3.s)\ /\ (MeV/g)$ une semaine après irradiation à $300\ K$. Ce résultat provient d'un ajustement linéaire réalisé sur des mesures expérimentales issues de nombreux composants électroniques (transistors, jonctions PN, imageurs, capacités MOS, diodes…) irradiés avec des protons, neutrons, électrons et ions. L'auteur souligne cependant que ces résultats de mesure, issues de la littérature, comportent parfois des inconnues sur les conditions de mesure, comme par exemple la durée exacte entre la mesure et l'arrêt de l'irradiation ou la température de mesure. Ceci donne une incertitude sur la valeur exacte de ce coefficient, mais sa valeur est rarement remise en cause aujourd'hui dans la littérature [26].

Ce facteur étant défini à une température de $300\ K$, il est nécessaire d'introduire un facteur de correction en température pour l'utiliser à une autre température. La génération de charges par les défauts étant un mécanisme déclenché thermiquement, on peut considérer que le facteur de dommage suit une loi d'Arrhenius :

$$K_{dark}(T) = K_0 exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \tag{III.9}$$

Avec E_a l'énergie d'activation du courant d'obscurité, K_0 le terme pré-exponentiel et T la température de mesure en Kelvin. A $300\ K$, ce terme est égal au facteur de dommage universel de référence. En effectuant le rapport entre l'équation (III.9) à la température de mesure et à la température de référence ($300\ K$), on obtient le facteur correctif en température :

$$K_{dark}(T) = \frac{K_{dark}(T)}{K_{dark}(300K)} = K_{dark_0} exp\left(-\frac{E_a}{k_B}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{300}\right)\right) \tag{III.10}$$

Avec K_{dark_0} le facteur de dommage universel de référence (1 semaine après irradiation à $300\ K$). Cette loi exponentielle permet ainsi de déterminer le facteur de dommage universel pour n'importe quelle température. L'énergie d'activation du courant d'obscurité est un paramètre important qui détermine la sensibilité du courant d'obscurité à la température. On trouve couramment dans la littérature une valeur moyenne d'énergie d'activation du courant d'obscurité comprise entre $0{,}62\ eV$ et $0{,}64\ eV$ après irradiation [15], [20], [27]–[29]. Cette valeur de l'énergie d'activation du courant d'obscurité est proche de l'énergie du milieu de la bande interdite du silicium ($\sim 0{,}56\ eV$). Une énergie d'activation proche du milieu du gap indique que la génération thermique de charges est le processus dominant du courant d'obscurité. A l'inverse une énergie d'activation proche du gap du silicium ($\sim 1{,}12 eV$) indique plutôt que le courant de diffusion est le mécanisme dominant du courant d'obscurité [30].

De manière similaire à la température, si l'on souhaite connaître K_{dark} à un temps de mesure après irradiation autre que 1 semaine, il faut également appliquer un facteur correctif. Contrairement au facteur correctif en température, il n'y a pas de loi simple permettant d'appliquer une correction en temps au facteur de dommage universel. Pour réaliser une telle correction, la notion de facteur de guérison ou de taux de recuit est utilisée. Un facteur de guérison évalue de manière empirique la quantité de défauts qui ont recombiné (on dit qu'ils ont « guéri ») dans un système à plusieurs instants de mesure (voir Figure III.4). La guérison des défauts est évaluée indirectement en mesurant la densité

de courant d'obscurité à différents temps de mesure $J_{obs}(t)$. Connaissant l'intensité de la densité de courant d'obscurité avant irradiation $J_{obs}(0)$, et en choisissant un temps assez grand pour être considéré comme « à l'infini » pour exprimer la densité de courant d'obscurité après irradiation $J_{obs}(\infty)$, le facteur de guérison s'exprime selon :

$$AF(t) = \frac{J_{obs}(t) - J_{obs}(0)}{J_{obs}(\infty) - J_{obs}(0)} \tag{III.11}$$

Selon l'équation (III.11), le facteur de guérison pour un temps « infini » $AF(\infty)$ est égal à 1, puisque tous les défauts sont censés avoir guéris. Dans leurs travaux, *Srour et al.* [20] ont considéré que le temps « infini » est égal à 1000 heures, bien que le processus de guérison ne soit pas totalement terminé. Ce temps correspond cependant à une convention dans la communauté scientifique. Le facteur de guérison est ici calculé par le biais de la mesure de la densité de courant d'obscurité, mais d'autres grandeurs physiques sensibles aux effets des radiations peuvent être utilisées, comme par exemple le temps de vie des porteurs minoritaires [31]. Ce coefficient traduit la capacité d'un système à se relaxer après avoir été exposé à une source de radiations. Bien que ce coefficient soit très utilisé dans le domaine expérimental pour évaluer la robustesse d'un composant face aux particules énergétiques, son utilisation dans le domaine numérique peut souffrir de certaines incertitudes, car ce coefficient n'est valable que pour un composant donné et pour un type de particule donné.

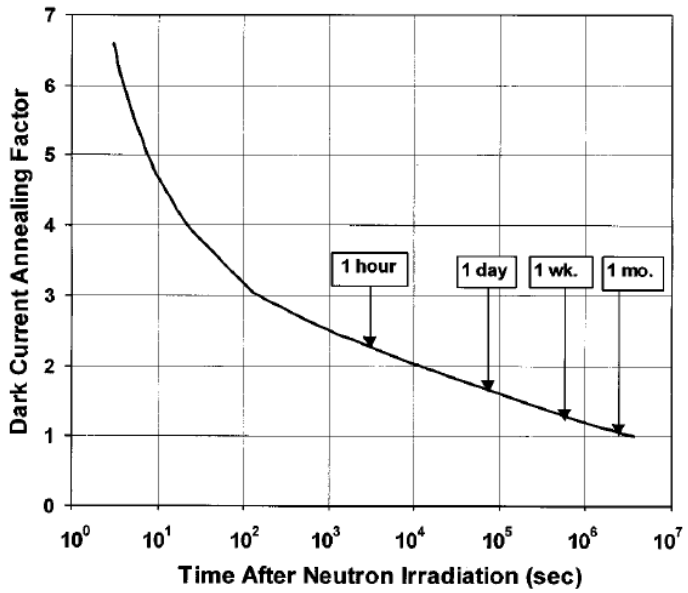


Figure III.4 : Evolution du facteur de guérison en fonction du temps [20]. Le facteur de guérison dépend ici de l'intensité du courant d'obscurité en fonction du temps après irradiation. La cinétique de guérison est très rapide lors des premières minutes après irradiation. Le fit d'une telle courbe permet de calculer le facteur correctif en temps pour le facteur de dommage universel.

Il convient donc d'être prudent dans son utilisation si l'on souhaite généraliser un facteur de guérison à plusieurs types de particules et différents composants. Il est généralement admis dans la littérature qu'un mois après irradiation, le facteur de guérison est d'environ 90 % [19], [32], [33]. Finalement, pour corriger le facteur de dommage universel en temps, il suffit de connaître le facteur de guérison au bout d'une semaine (puisque le facteur universel est défini une semaine après irradiation) et le facteur de guérison au temps de la mesure souhaité.

Le rapport entre les deux facteurs de guérison nous permet de connaître la fraction de défauts qui a guéri entre le temps de référence (1 semaine dans notre cas) et le temps de la mesure :

$$K_{dark}(t) = K_{dark_0} \times \frac{AF(t)}{AF\left(t_{réf.}\right)} \quad \text{(III.12)}$$

Finalement, le facteur de dommage universel à une température autre que $300\ K$ pour un temps après irradiation autre que 1 semaine s'exprime :

$$K_{dark}(t,T) = K_{dark_0} \frac{AF(t)}{AF\left(t_{réf.}\right)} exp\left(-\frac{E_a}{k_B}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{300}\right)\right) \quad \text{(III.13)}$$

Les méthodes statistiques

Même si les facteurs de dommage occupent une place importante dans l'estimation du courant d'obscurité après irradiation, d'autres méthodes ont été élaborées pour prédire la distribution de la variation du courant d'obscurité plutôt que la dégradation moyenne. Ce type de méthode permet de rendre compte de la non uniformité de l'irradiation aux particules énergétiques par le biais de lois statistiques. La première méthode d'estimation de la distribution du courant d'obscurité pixel à pixel repose sur la théorie de la microdosimétrie [34]. Pour ce faire, *Dale* et *Marshall* ont utilisé le NIEL, la perte d'énergie par processus non-ionisants pour évaluer cette distribution. Lorsque qu'un grand nombre d'interactions se produit dans un pixel, on peut supposer que la dégradation sera représentative de la moyenne qui est donnée par le NIEL. Sachant que chaque type d'interaction nucléaire (coulombienne, élastique et inélastique) n'a pas la même probabilité de se produire, il faut traiter ces interactions de manière séparée. La probabilité qu'une interaction se produise s'exprime selon :

$$N = \sigma_{eff} \phi V_{dép.} \rho \frac{N_A}{A} \quad \text{(III.14)}$$

Avec σ_{eff} la section efficace d'interaction (en cm^2), ϕ la fluence de particules énergétiques (en $particules/cm^2$), $V_{dép.}$ la taille du volume déplété dans le pixel (en cm^3), ρ la densité volumique du matériau sensible (en cm^{-3}), N_A le nombre d'Avogadro et A la masse atomique du matériau cible.

Du fait du grand nombre d'interactions coulombiennes qui se produit généralement dans un pixel, *Marshall* a pu évaluer analytiquement la statistique du nombre d'interactions coulombiennes dans un pixel. Ce nombre d'interactions est égal à la $N^{ième}$ convolution de la densité de probabilité du nombre d'atomes déplacés par une seule interaction coulombienne (dite « individuelle ») par elle-même. Le résultat dépend assez peu de l'allure de la distribution individuelle si le nombre moyen d'interactions est suffisant. Par soucis de simplification et pour pouvoir mener le calcul littéralement, une fonction gaussienne a été choisie par *Marshall*, ayant pour moyenne μ_{disp} et d'écart-type σ_{disp}. Cette fonction présente l'avantage de garder sa forme après chaque convolution ce qui facilite grandement le calcul. Finalement, *Marshall* a montré que la distribution de dommage causée par les interactions coulombiennes possède une moyenne égale au produit du nombre d'interaction moyen et de la moyenne de la densité de probabilité individuelle d'une interaction coulombienne. Son écart type est quant à lui égal à la racine carré du nombre moyen d'interactions coulombiennes et de l'écart-type de la densité de probabilité individuelle d'une interaction coulombienne.

Pour les faibles fluences (autrement dit faibles nombres d'interactions), le nombre d'interactions par pixel suit une loi de Poisson qui tend progressivement vers une gaussienne lorsque le niveau d'irradiation augmente. Pour les réactions nucléaires élastiques et inélastiques, la convergence vers la loi gaussienne nécessite des fluences plus élevées à cause des plus faibles sections efficaces d'interaction (plus faibles probabilités d'interactions). La démonstration peut être trouvée dans les références [35], [36].

Finalement, la distribution du courant d'obscurité est évaluée comme étant la convolution des distributions de dommage correspondant à chaque type d'interaction (voir Figure III.5). Le facteur de dommage de l'énergie de dommage est utilisé pour convertir la distribution de déplacements atomiques en distribution de courant d'obscurité.

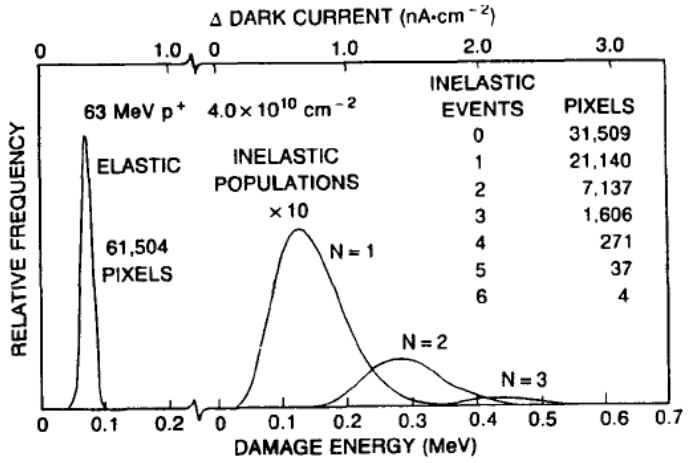


Figure III.5 : Distribution de l'énergie de dommage en fonction du nombre moyen d'interactions par pixel [18].

De nombreux auteurs ont ensuite repris et amélioré ces travaux pour qu'ils soient applicables à des cas divers. *Robbins* [37] et *Germanicus* [23] ont proposé respectivement des améliorations pour une meilleure estimation du courant d'obscurité à basse fluence, et proposé un ajustement des paramètres des distributions pour obtenir une distribution de la variation du courant d'obscurité plus réaliste. *Bogaerts* [26] a quant à lui proposé une amélioration pour tenir compte des effets de champ électrique sur la génération thermique de porteurs de charge. *Virmontois* [22] a également amélioré cette méthode pour la rendre compatible avec des capteurs CMOS, plus sensible à la dose ionisante et qui affecte les paramètres des distributions. Cette amélioration consiste à utiliser une loi Gamma plutôt qu'une loi gaussienne pour améliorer la distribution de l'énergie de dommage. Plus de détails sur l'historique des méthodes de prédiction du courant d'obscurité peuvent être trouvés dans [13], [14], [20], [35].

III.3 Présentation de la méthode d'estimation du courant d'obscurité dans les imageurs utilisée pendant la thèse

De son côté, l'ONERA développe une méthode numérique basée sur la méthode de Monte Carlo permettant de modéliser la distribution du courant d'obscurité dans un imageur après irradiation [25], [36], [38]–[40]. Le principe de calcul est analogue aux méthodes analytiques basées sur les produits de convolution. La convolution est ici réalisée numériquement par un algorithme Monte Carlo. Cela présente l'avantage d'être plus rigoureux en utilisant des distributions de dommage plus réalistes. Les interactions sont traitées séquentiellement et les dommages ajoutés à chaque pixel. Les interactions élastiques et inélastiques sont traitées numériquement par l'intermédiaire des modèles analytiques de sections efficaces. Ces réactions nucléaires sont modélisés par une application *GEANT4* (appelée *ARAMIS*), ce qui permet de simuler les effets de bords [35], [36]. De cette manière, en

fonction des dimensions du pixel de l'imageur et de l'énergie de la particule incidente que l'on souhaite étudier, chaque déplacement atomique est comptabilisé dans le pixel impacté ainsi que dans ses proches voisins, puisque les noyaux de recul peuvent parfois parcourir des distances supérieures aux dimensions du pixel. Pour les interactions coulombiennes, le calcul est plus simple puisque les noyaux déplacés parcourent des distances beaucoup plus faibles que lors de réactions nucléaires. Seule la section efficace d'interaction coulombienne est nécessaire.

En fonction de la fluence utilisée et des dimensions du pixel, le nombre d'interactions est calculé pour chaque pixel dans *DAAN*. Pour chaque interaction, le nombre de déplacements atomiques créés dans chaque pixel est calculé suivant les sections efficaces d'interactions ou par *ARAMIS*. Le courant d'obscurité circulant dans chaque pixel est calculé en convertissant le nombre total de déplacements atomiques avec le facteur de dommage universel de *Srour*. Depuis 2017, *DAAN* permet également de prendre en compte les effets du champ électrique sur l'évaluation du courant d'obscurité dans un pixel. Les étapes clés de l'estimation de la distribution du courant d'obscurité par la méthode numérique de l'ONERA sont détaillées dans les paragraphes suivants.

L'outil numérique *DAAN*, qui a été principalement développé durant la thèse, est un programme permettant de calculer l'énergie déposée dans un pixel par déplacements atomiques grâce à la physique des interactions entre la matière et les particules et d'en déduire l'augmentation du courant d'obscurité associée. La quantité de déplacements atomiques que va subir un pixel peut être différente de celle de son voisin le plus proche, conduisant à une distribution non uniforme de la dégradation des pixels, et ainsi à une distribution de l'augmentation du courant d'obscurité induit par le rayonnement énergétique sur l'ensemble des pixels d'un imageur. L'outil numérique développé consiste à évaluer cette distribution du courant d'obscurité [32]. Cet outil a besoin de faire appel à différentes bibliothèques et sous-programme pour fonctionner. L'organigramme de *DAAN* est présenté en Figure III.6.

La partie principale du programme, *DAAN_2.2.1*, centralise les contributions des autres sous-programmes. Les bibliothèques indépendantes SRIM_85_ONELIB_1.0 et BASIC_FUNCTION_ONELIB_1.2 permettent de calculer les paramètres nécessaires pour connaître le nombre moyen d'interactions par pixel pour chaque type d'interaction nucléaire. Par exemple, la bibliothèque indépendante BASIC_FUNCTION_ONELIB_1.2 permet de calculer les paramètres du matériau cible ainsi que des particules incidentes et d'établir la loi statistique de comptage qui détermine le nombre de réaction nucléaire par pixel connaissant la fluence appliquée. La bibliothèque SRIM_85_ONELIB_1.0 quant à elle calcule la section efficace des protons ainsi que la fonction de partition de *Lindhard* [41], nécessaire au calcul du nombre de déplacements atomiques générés par les interactions coulombiennes. L'application *ARAMIS* est conçue dans le but de générer une base de données de déplacements atomiques produits par les interactions nucléaires élastiques et inélastiques. En revanche les interactions coulombiennes sont traitées directement dans *DAAN_2.2.1*, car l'énergie mise en jeu dans ce type d'interaction est plus faible que pour les interactions élastiques et inélastiques. Le parcours des noyaux de recul produit par les interactions coulombiennes est beaucoup plus court que celui des noyaux de recul issus des interactions inélastiques et élastiques.

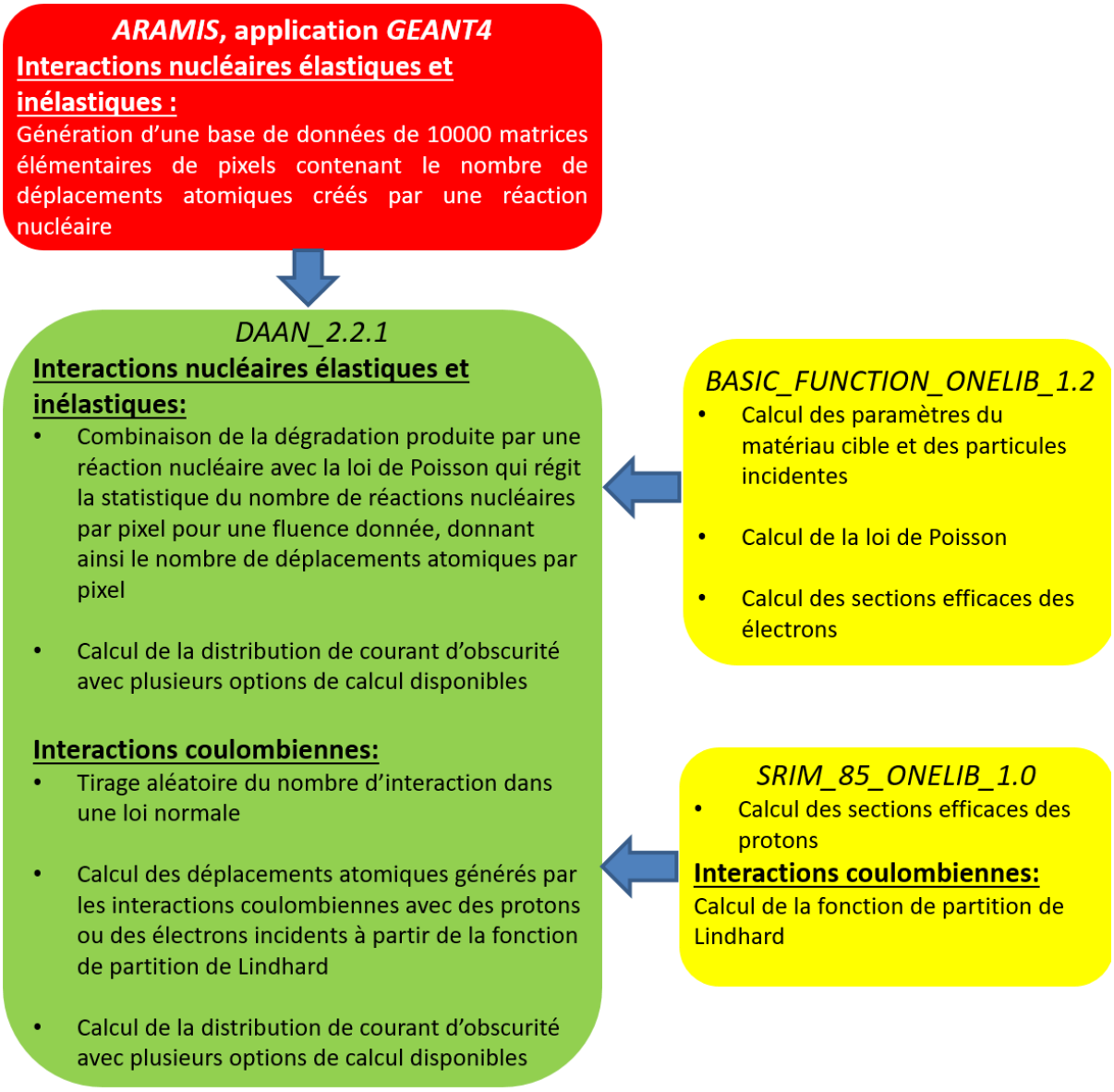


Figure III.6 : Organigramme de l'outil numérique de prédiction de la distribution du courant d'obscurité dans un imageur après irradiation DAAN_2.2.1.

Contrairement aux interactions élastiques et inélastiques, les effets de bords sont donc négligés pour les interactions coulombiennes. Les travaux de thèse se sont concentrés en grande partie sur le programme *DAAN_2.2.1*. *ARAMIS* a également fait l'objet de légères modifications pour extraire des informations nécessaires aux calculs présentés dans le chapitre VI de ce manuscrit.

III.3.1 L'application GEANT4 pour les imageurs: *ARAMIS*

ARAMIS (Analysis Radiation Mechanisms in Image Sensors) permet de réaliser un nombre de simulations d'interactions nucléaires défini par l'utilisateur dans une matrice de pixels élémentaire lorsqu'une particule énergétique vient impacter le pixel central de cette matrice. Les interactions nucléaires peuvent produire des noyaux de recul énergétique d'une énergie supérieure au MeV. Dans le cas des interactions élastiques et inélastiques, ces noyaux de recul sont capables de traverser un voire plusieurs pixels voisins (voir Figure III.7). Les interactions coulombiennes sont quant à elle traitée dans *DAAN* car les noyaux de recul, possédant une énergie inférieure, vont parcourir une distance bien

moindre et rester dans le pixel où ils ont été générés. Dans le but de tenir compte des noyaux de recul très énergétiques, le code de Monte Carlo *GEANT4* a été utilisé pour modéliser le transport des particules en trois dimensions. *GEANT4* (GEometry And Tracking) est un outil C++ développé par une collaboration internationale [42]. Il permet de décrire le passage de particules à travers la matière par la méthode de Monte Carlo. *GEANT4* est utilisé à des fins diverses et variées, aussi bien pour l'étude du rayonnement énergétique pour des problématiques physiques, biologiques, l'astrophysique voire même la médecine. La version 9.6 patch 03 de *GEANT4* a été utilisée pour effectuer nos calculs.

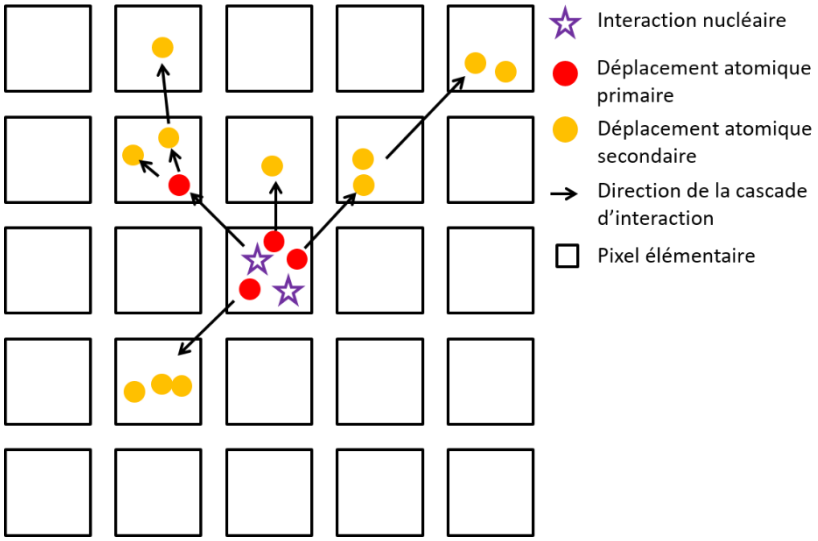


Figure III.7 : Représentation schématique d'une matrice élémentaire de pixels simulée dans ARAMIS. Dans le cas des interactions nucléaires élastiques et inélastiques, une interaction peut générer des déplacements atomiques dans le pixel voisin par le phénomène de cascade de dommage. Ce phénomène est pris en compte dans l'estimation du courant d'obscurité après irradiation.

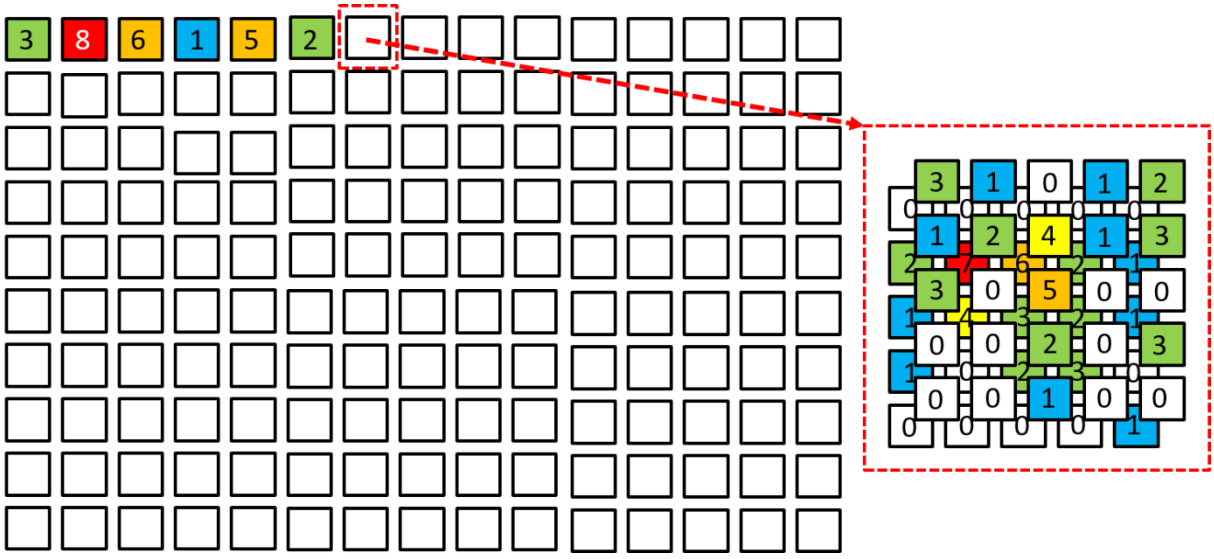


Figure III.8 : Utilisation des matrices élémentaires de pixels dans DAAN. Les matrices élémentaires créées dans ARAMIS répertorient le nombre de déplacements atomiques générés par chaque interaction. Lors du traitement d'un pixel dans DAAN, une matrice élémentaire est tirée aléatoirement pour chaque interaction nucléaire. Ainsi, la superposition de ces matrices élémentaires donne le nombre final de déplacements atomiques.

La quantité de déplacements atomiques produits dans les pixels sous l'influence d'une irradiation est inscrite dans un fichier qui est exploitable avec le programme *DAAN* pour évaluer la distribution de courant d'obscurité. Dans notre cas 10000 simulations sont réalisées, afin d'avoir une

statistique suffisamment représentative des interactions qui ont lieu dans notre imageur. Le but principal de l'application *ARAMIS* est donc de créer une base de données de déplacements atomiques. Pour calculer le nombre de réactions nucléaires, l'application *ARAMIS* a besoin de connaître l'angle d'incidence des particules, leur énergie, ainsi que la géométrie de la cible et les matériaux qui la composent. La matrice élémentaire est dimensionnée pour pouvoir suivre l'ensemble des cascades d'interactions et leurs effets sur les pixels adjacents. Dans les cas étudiés pendant la thèse, une matrice de pixels 5x5 est suffisante pour contenir les cascades de dommage extrêmes. Le fichier de sortie de l'application *ARAMIS* s'apparente donc à une matrice de données 5x5 dans laquelle chaque case représente le nombre de déplacements atomiques contenus dans chaque pixel (voir Figure III.8). De cette manière, l'application calcule le nombre de déplacements atomiques générés dans la cascade de dommage par les mécanismes physiques présentés dans le chapitre II (paragraphe II.2.2), et les atomes déplacés contenus dans chaque pixel de la matrice élémentaire sont enregistrés dans le fichier de sortie. Le programme *DAAN* utilise en entrée cette base de données de dommage pour estimer le nombre de déplacements atomiques contenus dans un pixel ayant subi N interactions dans le cas des interactions élastiques et inélastiques. Afin d'avoir une géométrie réaliste des pixels, un fichier d'entrée est utilisé pour paramétrer la géométrie du pixel élémentaire [35] : taille du volume en déplétion, taille du pixel, volume des couches latérales, supérieures et inférieures (voir Figure III.9). Les matériaux qui composent ces couches peuvent être sélectionnés aisément par l'utilisateur. L'impact de ces couches sur les interactions entre la particule énergétique et la matière est donc pris en compte dans la simulation de la cascade de dommage.

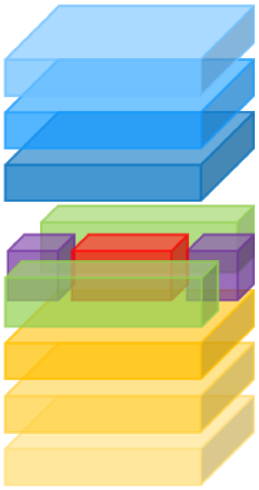


Figure III.9 : Représentation schématique pour paramétrer la géométrie d'un pixel dans ARAMIS [35]. La taille de chaque volume est modifiable aisément avec un fichier d'entrée. Cette technique permet de simuler une grande variété de pixels.

III.3.2 L'outil de calcul numérique par méthode Monte Carlo : *DAAN*

Le programme *DAAN_2.2.1* (pour DAmage ANalysis) est un ensemble de fonctions C++ développées pour calculer le nombre de déplacements atomiques induits par le rayonnement énergétique dans un pixel. Ce programme permet de regrouper le traitement des interactions élastiques, inélastiques et coulombiennes. Une fois que les paramètres du matériau cible et des particules incidentes sont récupérées auprès des bibliothèques indépendantes, *DAAN* traite une par une les différentes interactions demandées par l'utilisateur. Pour chaque type d'interaction traité, *DAAN* détermine le nombre d'interactions qui se produit dans un pixel. Les pixels sont traités indépendamment les uns des autres. Un fichier d'entrée permet à l'utilisateur de modifier simplement les paramètres de simulation comme l'énergie de la particule incidente et sa nature, la fluence associée, la température de simulation ainsi que les dimensions du pixel.

La série d'interactions qui se produit dans un pixel s'apparente à une expérience de comptage, il est donc possible d'assimiler la statistique des interactions à une loi de Poisson :

$$P(N) = e^{-\lambda}\frac{\lambda^N}{N!} \tag{III.15}$$

$P(N)$ représente la probabilité d'avoir N évènements (i.e interactions nucléaires) se produisant dans le pixel et le paramètre λ est la moyenne de la distribution de probabilité. Ce paramètre est défini comme :

$$\lambda = \sigma_{eff} \times \phi \times \eta \times V \times R \tag{III.16}$$

avec σ_{eff} la section efficace d'interaction (cm^2), assimilable à une surface, ϕ la fluence des particules incidentes ($particules/cm^2$), η la densité atomique par unité de volume du matériau ($atomes/cm^3$) et V le volume du pixel étudié (cm^{-3}). Le terme R désigne quant à lui le rapport entre le nombre d'interactions total créées dans la matrice par la particule et le nombre d'interactions créées dans la zone sensible du pixel. Ce rapport permet de calculer le nombre moyen réel d'interactions qui ont lieu dans le volume du pixel étudié. Ce facteur est utilisé pour les interactions élastiques et inélastiques car les interactions peuvent se produire en dehors du pixel étudié, contrairement au cas des interactions coulombiennes. Si en moyenne un grand nombre d'évènements se réalisent lors de l'expérience de comptage, c'est-à-dire si on a un grand λ (supérieur à 20), la loi de Poisson converge vers une distribution de probabilité normale :

$$P(N) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{N-\lambda}{\sigma}\right)^2\right) \tag{III.17}$$

où σ est l'écart-type de la distribution de probabilité défini comme $\sigma = \sqrt{\lambda}$. Une fois les paramètres des lois de probabilité régissant la statistique de d'endommagement d'un pixel calculés, la dégradation produite pour chaque interaction (le nombre d'atomes déplacés) qui survient dans un pixel peut être déterminée. Concernant les interactions élastiques et inélastiques, les déplacements atomiques produits par chaque interaction seront déterminés par tirage aléatoire dans la base de données de matrices élémentaires issues de l'application *ARAMIS*. Le cas des interactions coulombiennes est différent, puisque l'on calcule d'abord l'énergie de recul du noyau pour chaque interaction en utilisant la section efficace d'interaction coulombienne ZBL [43] qui tient compte de l'écrantage électrostatique. Ensuite le nombre de déplacements atomiques est donné grâce à la fonction de partition de *Lindhard* $G(Q)$ [41].

Une fois le nombre de déplacements atomiques calculé, il est possible de les convertir en courant d'obscurité. De manière classique dans *DAAN*, on utilise le facteur de dommage universel comme décrit dans le paragraphe III.2 de ce chapitre. Dans nos simulations, l'énergie d'activation du courant d'obscurité à $0{,}62\ eV$ et le temps de mesure après irradiation est fixé à 1 mois. Connaissant le nombre d'atomes déplacés dans un pixel, on accède à l'augmentation de la densité de courant d'obscurité ΔJ_{dark} correspondante grâce à l'expression suivante :

$$\Delta J_{dark} = qWK_{dark}(t,T) \times DDD = qWK_{dark}(t,T)N_{displ.}\frac{2T_d}{V_{dép.}\rho} \tag{III.18}$$

Avec $N_{displ.}$ le nombre d'atomes déplacés dans le volume du pixel, T_d l'énergie seuil de déplacement ($21\ eV$ dans le silicium), $V_{dép.}$ la taille du volume déplété du pixel (cm^3), ρ la densité volumique du silicium (cm^{-3}), W la profondeur de la zone déplétée du pixel (cm). La DCNU est ainsi construite en déterminant interaction après interaction, pour chaque type d'interaction, le nombre d'atomes déplacés à chaque fois et la densité de courant d'obscurité associée à l'ensemble de ces déplacements atomiques.

Cette méthode de calcul de la DCNU est la méthode d'utilisation dite classique de *DAAN*. Des travaux de thèse réalisés précédemment à l'ONERA [35] ont permis d'inclure une option de calcul permettant de considérer les effets du champ électrique sur le courant d'obscurité dans le cas d'un calcul en une dimension. Les améliorations apportées à cette méthode de calcul feront l'objet du chapitre IV. Les effets du champ électrique sur le courant d'obscurité en une dimension seront présentés dans le paragraphe III.3.3. La thèse a permis d'étudier plusieurs méthodes différentes pour convertir les déplacements atomiques en courant d'obscurité. Voici la liste exhaustive des options de calcul disponibles dans *DAAN* :

- **Utilisation du facteur de dommage universel à énergie d'activation fixe :** c'est la méthode par défaut pour convertir les déplacements atomiques, existante avant mes travaux de thèse. Cette méthode vient d'être détaillée dans le paragraphe précédent. Un résultat de ce type de simulation est présenté dans le paragraphe III.3.4 de ce chapitre.

- **Tirage aléatoire d'une énergie d'activation par interaction** : plutôt que d'utiliser une énergie d'activation fixe et unique pour toutes les interactions, l'énergie d'activation utilisée dans le facteur de *Srour* est tirée aléatoirement dans une distribution gaussienne, caractérisée par une énergie d'activation moyenne et un écart-type définis en entrée par l'utilisateur. Le nombre de déplacements atomiques générés par une interaction est donc converti en courant d'obscurité avec un facteur de *Srour* dépendant d'une énergie d'activation tirée aléatoirement. Ce type de simulation a essentiellement été étudié lors du stage réalisé à l'ONERA qui a précédé la thèse et a constitué le point de départ des travaux de thèse. Cependant, les résultats de cette étude ne seront pas présentés dans ce manuscrit. Pour résumé, cette étude a consisté à analyser la variation de la distribution du courant d'obscurité lorsque l'énergie d'activation d'une interaction nucléaire était tirée dans une distribution gaussienne. Cette méthode est une manière indirecte d'étudier l'influence d'une distribution de pièges sur la prédiction du courant d'obscurité.

- **Facteur d'amplification lié au champ électrique :** un facteur correctif lié aux effets de champ électrique est calculé pour chaque interaction nucléaire qui se produit dans le pixel. Ce facteur amplifie la quantité de déplacements atomiques calculée initialement par *DAAN*. Plus précisément, à chaque interaction nucléaire qui se produit dans le pixel, une profondeur d'interaction est tirée uniformément de manière aléatoire, et grâce à une carte de champ électrique fournie par l'un de nos partenaires (Teledyne E2V), nous pouvons en déduire un champ électrique associé. Le facteur correctif est ensuite calculé analytiquement grâce à ce champ électrique. L'expression analytique de ce facteur correctif sera présentée dans le paragraphe suivant. Les travaux de thèse ont permis de passer d'une modélisation de ces effets de champ électrique en une dimension (disponible avant mes travaux de thèse, un résultat de ce type de simulation est présenté dans la section III.3.4) à trois dimensions (voir chapitre IV).

- **Taux de génération de paires électron-trou d'une base de données de pièges** : cette méthode n'est pas compatible avec l'utilisation du facteur de *Srour*, puisque cette méthode est une alternative simplifiée qui permet de déduire les courants d'obscurité sans connaître la nature des défauts présents dans le semi-conducteur après irradiation. Un piège est tiré aléatoirement de manière uniforme à chaque interaction nucléaire. Le taux de génération de tous les pièges inscrits dans la base de données étant calculé au préalable au début du programme, le taux de génération de paires électron-trou associé au piège tiré aléatoirement est appelé puis multiplié par le nombre de déplacements atomiques de l'interaction considérée. On obtient donc un courant électrique issu d'un nombre de pièges proportionnel aux déplacements atomiques calculés. La conversion par utilisation du taux de génération des pièges peut être utilisée avec ou sans le facteur d'amplification lié au champ électrique présenté dans le point précédent. Les résultats associés à cette méthode de calcul ne seront pas présentés dans ce manuscrit, car il s'est avéré que cette méthode n'est pas très réaliste. En effet, elle repose sur l'hypothèse qu'un déplacement atomique correspond à un défaut complexe, or ce n'est pas réaliste.

- **Utilisation d'une base de données de pièges et d'un facteur de guérison issus de simulation de type Kinetic Monte Carlo (KMC) :** cette méthode sera détaillée dans les chapitres V et VI de ce manuscrit. L'algorithme de type Kinetic Monte Carlo développé au cours de la thèse a été utilisé pour modéliser la réorganisation de la matière après irradiation. Ainsi, une population type de défauts a pu être établie ainsi qu'un taux de guérison représentatif pour une simulation 1 mois après irradiation. Les résultats du KMC sont mis en entrée de *DAAN* pour tenir compte de la réorganisation des défauts. Un taux de génération moyen en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D proposé dans le chapitre IV est calculé pour chaque interaction nucléaire. Le nombre de déplacements atomiques générés lors d'une interaction est converti en courant d'obscurité via ce taux de génération moyen amplifié. Nous reviendrons sur ce type de modélisation dans le chapitre VI.

- **Prise en compte de la dose ionisante cumulée (TID) :** cette option permet à *DAAN* de tenir compte de la contribution de la dose ionisante dans l'estimation de la distribution du courant d'obscurité en plus de la contribution de la DDD. Les paramètres d'ajustement selon une loi asymétrique de Weibull de la distribution expérimentale de courant d'obscurité sont donnés en entrée de *DAAN*, et pour chaque pixel un tirage aléatoire est effectué dans cette loi de probabilité. On ajoute ainsi la contribution de la dose ionisante selon des tirages aléatoires successifs. Cette option est surtout utile pour estimer la distribution de courant d'obscurité pour les faibles valeurs de courants, car la TID est en général responsable d'une contribution homogène de courants de faibles intensités. Les résultats de cette étude seront présentés en Annexe C.

Ces différentes méthodes de calcul sont activables depuis le fichier d'entrée de l'application *DAAN*, via un entier ou un booléen. L'application lit le fichier d'entrée et active les fonctions correspondant à la méthode de calcul souhaitée par l'utilisateur. L'application *DAAN* a subi de nombreuses modifications au cours de la thèse, dans le but de générer plusieurs fichiers de sortie propres à chaque méthode calcul. Un programme d'exploitation de données écrit en langage Python permet de lire ces fichiers de sortie, afin d'extraire le maximum d'informations de nos simulations. Les méthodes de calcul utilisant le facteur d'amplification lié au champ électrique et le taux de génération de paires électron-trou d'une base de données de pièges ont été optimisées à la fin de la première année de thèse pour réduire le temps de calcul des simulations. La réduction du temps de calcul est estimée à environ à un facteur 5 : une simulation qui durait 5 jours dure désormais un peu moins d'une journée depuis l'optimisation des méthodes de calcul. Cette optimisation permet une gestion plus souple des ressources de la machine et permet de lancer un plus grand nombre de simulations. Aussi, quelques bogues ont été

identifiés et corrigés. Chaque évolution de l'application a été suivie d'une phase de validation pour s'assurer de l'absence de bogues dans *DAAN*.

III.3.3 Prise en compte des effets du champ électrique en une dimension dans *DAAN*

Au cours du chapitre I (paragraphe I.3.2.1), nous avons vu que la jonction de blocs semi-conducteur P et N engendre la création d'un champ électrique au cœur du pixel. Le champ électrique n'est pas constant au sein de la jonction : il dépend du profil du dopage des blocs P et N. Le maximum de la distribution de champ électrique est atteint à l'interface entre le bloc P et le bloc N, et décroît lorsque que l'on s'éloigne du centre de la jonction. Lorsque la jonction PN est polarisée en inverse, l'intensité du champ électrique augmente car la différence de potentiel entre les deux bornes de polarisation augmente. Ce champ électrique est essentiel au fonctionnement des imageurs car il permet de vider la zone de charge d'espace de porteurs libres, et empêchent les charges photo-générées de recombiner avant qu'elles ne soient collectées.

Cependant le champ électrique peut contribuer en partie à l'augmentation du courant d'obscurité observée dans les imageurs après irradiation. La présence d'un champ électrique à proximité d'un défaut électriquement actif induit une augmentation du nombre de charges générées thermiquement par unité de temps (autrement dit le taux de génération de paires électron-trou) par ce défaut [18], [19], [44], [45]. Cette amplification de la production de charges s'explique par le fait que le champ électrique permet l'apparition de mécanismes physiques qui facilitent le passage d'un porteur de charge au sein de la bande interdite du semi-conducteur, c'est-à-dire d'un électron vers la bande de conduction ou d'un trou vers la bande de valence. L'augmentation du taux de génération de paires électron-trou est proportionnelle à l'intensité du champ électrique, et le mécanisme qui dominera cette augmentation du taux de génération dépend aussi de l'amplitude du champ électrique. Le champ électrique affectera différemment le taux de génération en fonction des propriétés électriques du piège, à savoir son niveau d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur, ses sections efficaces de capture d'électron et de trou ainsi que de son état de charge (cf chapitre II). Expérimentalement, les effets du champ électrique se manifestent par une diminution de l'énergie d'activation du courant d'obscurité mesuré dans le pixel [26], [46], [47] (voir Figure III.10).

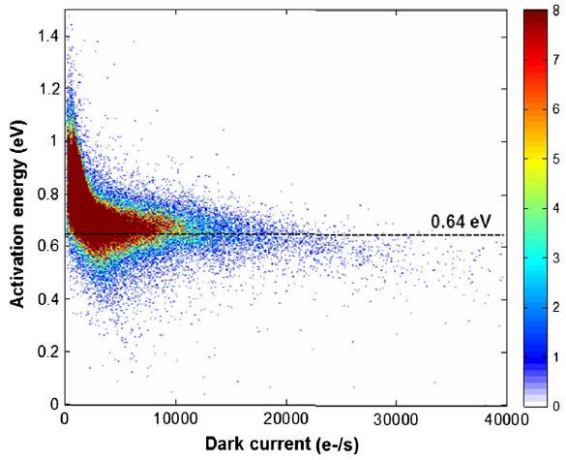


Figure III.10 : Distribution en deux dimensions de l'énergie d'activation en fonction du courant d'obscurité dans un capteur d'imageur après irradiation [46]. On remarque certaines énergie d'activation sont localisées sous le seuil de 0,64 eV. On attribue cette décroissance de l'énergie d'activation aux effets du champ électrique sur le taux de génération thermique de paires électron-trou. L'échelle de couleur représente la densité de pixels correspondant à un pas d'échantillonnage spécifique en énergie d'activation et en courant d'obscurité.

Pour rappel, en l'absence de champ électrique, les taux d'émission d'électrons e_n et de trous e_p par un piège s'écrivent (cf chapitre II, paragraphe II.5.2):

$$e_n = \sigma_n \nu_{th_n} N_C exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad \text{(III.19)}$$

$$e_p = \sigma_p \nu_{th_p} N_V exp\left(-\frac{E_g - E_i}{k_B T}\right) \quad \text{(III.20)}$$

Où $\sigma_{n,p}$ sont la section efficace des électrons et des trous respectivement (m^2), $\nu_{th_{n,p}}$ la vitesse thermique des électrons et des trous respectivement (m/s), N_C la densité d'électrons dans la bande de conduction (m^{-3}), N_V la densité de trous dans la bande de valence (m^{-3}), E_i l'énergie d'ionisation, l'énergie entre le niveau de piège et la bande de conduction (eV), E_g la largeur de la bande interdite ($1{,}12\ eV$ pour le silicium), k_B la constante de Boltzmann (eV/K) et T la température du matériau (K).

La vitesse thermique des électrons et des trous est déterminée selon l'expression suivante [9] :

$$\nu_{th_{n,p}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*_{n,p}}} \quad \text{(III.21)}$$

Avec $m^*_{n,p}$ les masses effectives des électrons et des trous considérées comme approximativement égales ($\approx 9{,}11 \times 10^{-31}\ kg$).

Il faut également noter qu'un piège peut être apparenté à deux types de centre différents : un centre coulombien ou un centre de Dirac. En reprenant les termes définis dans le chapitre II (paragraphe II.5.3), on peut définir un centre coulombien comme le cas où un piège est donneur pour les trous et accepteur pour les électrons. A l'inverse, un piège est centre de Dirac si il est donneur pour les électrons et accepteur pour les trous [48], [49].

L'outil *DAAN* prend en compte les deux effets du champ électrique les plus connus dans les jonctions PN à base de silicium : l'effet Poole-Frenkel (abrégé PF) et l'effet Tunnel Assisté par Phonons (Phonon Assisted Tunneling en anglais, abrégé PAT). En première approximation, ces mécanismes ont été incorporés à *DAAN* selon une modélisation en une dimension. Une telle modélisation implique que le porteur de charge émis depuis le piège vers une bande énergétique ne possède qu'une seule direction d'émission, ce qui n'est pas réellement le cas. Une modélisation en une dimension des mécanismes liés au champ électrique a pour conséquence de surestimer leurs effets sur le taux de génération de paires électron-trou et donc sur le courant d'obscurité. L'objectif de ce paragraphe est de présenter le modèle analytique utilisé pour tenir compte des effets de champ électrique sur le courant d'obscurité avant son amélioration [35], [39] au cours des travaux de recherche présentés dans ce manuscrit. Le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions développés au cours de la thèse sera présenté dans le chapitre IV de ce manuscrit.

L'effet Poole-Frenkel

L'effet Poole-Frenkel [50] est un mécanisme consistant en la génération thermique d'un porteur de charge assisté par un abaissement de la barrière de potentiel ΔE_i dû à la présence d'un champ électrique, dans notre cas celui régnant au sein de la jonction PN du semi-conducteur. L'abaissement de la barrière permet ainsi aux électrons de quitter plus facilement la bande de valence pour rejoindre la bande de conduction et aux trous de passer de la bande de conduction à la bande de valence (Figure III.11). Ce mécanisme n'a lieu que pour les centres coulombiens puisque celui-ci provient de l'attraction coulombienne régnant entre le porteur de charge libéré du piège et le champ électrique local. Selon le formalisme proposé par *Vincent et al.* [48], l'expression du taux d'émission d'électrons et de trous en tenant compte de l'abaissement de la barrière de potentiel ΔE_i lié à la présence d'un champ électrique est :

$$e_n' = \sigma_n \nu_{th_n} N_C \, exp\left(-\frac{E_i - \Delta E_i}{k_B T}\right) = e_n \, exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) \tag{III.22}$$

$$e_p' = \sigma_p \nu_{th_p} N_V exp\left(-\frac{E_g - E_i - \Delta E_i}{k_B T}\right) = e_p exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) \tag{III.23}$$

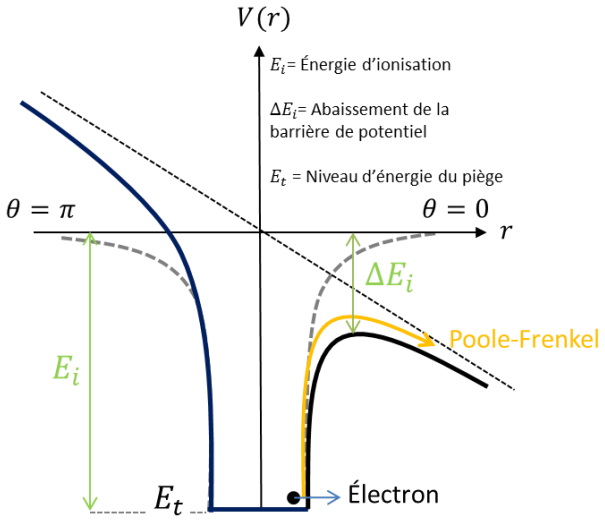


Figure III.11 : Illustration de l'effet Poole-Frenkel. L'abaissement de la barrière de potentiel facilite l'émission de l'électron vers la bande de conduction. Un mécanisme similaire est possible pour les trous également.

Le facteur d'amplification lié à l'effet Poole-Frenkel du taux d'émission d'électrons et de trous s'exprime donc de la manière suivante:

$$\lambda_{PF} = \frac{e_n'}{e_n} = \frac{e_p'}{e_p} = exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) \tag{III.24}$$

En revanche, cette expression ne nous renseigne pas sur les paramètres influençant l'effet Poole-Frenkel. Pour obtenir ces informations, il faut partir de l'expression de l'amplitude du potentiel V à une distance x :

$$V(x) = \frac{q}{4\pi\varepsilon x} + Fx \tag{III.25}$$

avec q la charge élémentaire (C), F le champ électrique (V/m) et ε la permittivité du matériau. Ce potentiel atteint son maximum en x_{max} lorsque la dérivée de ce dernier est nulle ($\frac{dV(x)}{dx} = 0$) soit :

$$\frac{-q}{4\pi\varepsilon x^2} + F = 0 \rightarrow x_{max} = \left(\frac{q}{4\pi\varepsilon F}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{III.26}$$

Dans une modélisation en une dimension, la barrière de potentiel possède une valeur unique égale à la valeur du potentiel à son maximum multipliée par q. En introduisant x_{max} dans l'expression de $V(x)$, on obtient :

$$\Delta E_i = qV_{max} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon} \times \left(\frac{4\pi\varepsilon F}{q}\right)^{\frac{1}{2}} + qF \times \left(\frac{q}{4\pi\varepsilon F}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{q^{\frac{3}{2}}F^{\frac{1}{2}}}{(4\pi\varepsilon)^{\frac{1}{2}}} + \frac{q^{\frac{3}{2}}F^{\frac{1}{2}}}{(4\pi\varepsilon)^{\frac{1}{2}}} = \left(\frac{q^3F}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{III.27}$$

Connaissant l'expression de la barrière de potentiel, on peut réécrire le facteur d'amplification liée à l'effet Poole-Frenkel en une dimension :

$$\lambda_{PF} = exp\left(\frac{1}{k_B T}\left(\frac{q^3F}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \tag{III.28}$$

On constate donc que l'effet Poole-Frenkel ne dépend que du champ électrique régnant dans le matériau et des propriétés du matériau, et que les électrons et les trous sont affectés de la même manière par l'effet Poole-Frenkel. L'effet Poole-Frenkel est indépendant du niveau d'énergie du piège.

Cette expression du facteur d'amplification par effet Poole-Frenkel suppose que le porteur de charge n'est émis que dans une seule direction (parallèle au champ électrique, en sens opposé). Si l'on reprend la Figure III.11, cela signifie que $\theta = 0$. Cette situation constitue le pire cas d'amplification [51], [52]. Puisque le modèle 1D ne prend pas les autres directions d'émission en compte, le modèle 1D surestime les effets du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou.

L'effet Tunnel Assisté par Phonons

L'effet Poole-Frenkel n'est pas le seul phénomène physique provoqué par la présence d'un champ électrique. L'effet Tunnel Assisté par Phonon (ou en anglais PAT : Phonon-Assisted Tunnelling) est un second mécanisme physique qui amplifie le taux d'émission de porteurs de charge des pièges. L'effet PAT se produit en deux temps : le porteur de charge se place à un niveau virtuel sous la barrière de potentiel via l'agitation thermique, puis traverse la barrière de potentiel grâce à l'effet tunnel [53], [54] (Figure III.12).

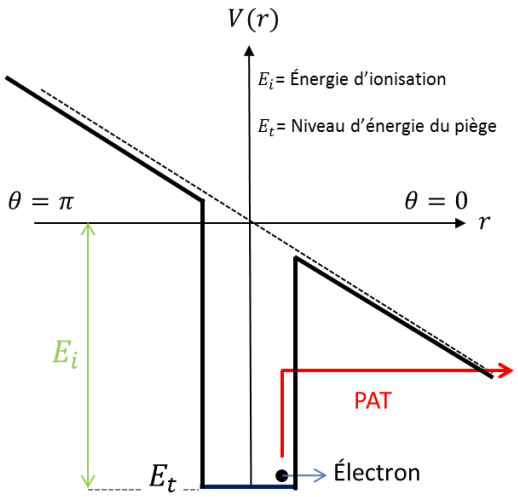


Figure III.12 : Illustration de l'effet Tunnel Assisté par Phonon. Le porteur de charge, ici l'électron, est acheminé sous le sommet de la barrière de potentiel par agitation thermique, puis traverse la barrière de potentiel par effet tunnel.

Dans le but d'évaluer l'effet de ce mécanisme, nous considérons dans un premier temps un centre de Dirac, pour éliminer l'effet Poole-Frenkel. Le porteur de charge traverse donc la barrière de potentiel pour atteindre la bande de conduction si c'est un électron, la bande de valence si c'est un trou. Pour décrire l'effet PAT, il est nécessaire d'introduire l'expression de la transparence d'une barrière de potentiel [48] :

$$T = exp\left(-\frac{4}{3}\frac{(2m_{n,p}^*)^{1/2}E_i^{3/2}}{q\hbar F}\right) \tag{III.29}$$

Avec $m_{n,p}^*$ la masse effective d'un électron ou d'un trou (kg), $\hbar$ la constante de Planck réduite. Le calcul de la transparence de la barrière est inspiré de la théorie de *Fowler-Nordheim* [55]. La probabilité de traversée la barrière de potentiel, considérée ici triangulaire, peut être obtenue en résolvant l'équation de *Schrödinger* [56] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{n,p}^*}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi \tag{III.30}$$

La barrière de potentiel pouvant se décomposer en une succession de plusieurs barrières de potentiel plus petite, nous pouvons nous placer dans l'approximation WKB (*Wentzel*, *Kramers*, *Brillouin*) [57]. Le détail des calculs pour résoudre l'équation de *Schrödinger* en fonction des approximations énoncées ci-dessus peut être trouvée dans [48] et [35].

La probabilité pour un porteur de charge d'atteindre une bande d'énergie via l'effet PAT est le produit de la probabilité d'être émis thermiquement à un niveau virtuel sous la barrière de potentiel et de la probabilité de traverser la barrière de potentiel.

Le taux d'émission d'électrons et de trous des pièges amplifié par l'effet PAT s'exprime comme suit :

$$e'_n = e_n + \int_0^{(E_C - E_t)/k_B T} e_n exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m_n^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \quad \text{(III.31)}$$

$$e'_p = e_p + \int_0^{E_t/k_B T} e_p exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m_p^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \quad \text{(III.32)}$$

Où z est une énergie possible de transition normalisée par l'énergie thermique $k_B T$. L'amplification du taux d'émission de porteurs de charge dépend donc que du champ électrique F, de la masse effective des porteurs de charge $m_{n,p}^*$ et du niveau d'énergie du piège E_t. Le facteur d'amplification d'émission de charge des pièges vient logiquement :

$$\lambda_{n,PAT} = \frac{e'_n}{e_n} = 1 + \int_0^{(E_C - E_t)/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m_n^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \quad \text{(III.33)}$$

$$\lambda_{p,PAT} = \frac{e'_p}{e_p} = 1 + \int_0^{E_t/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m_p^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \quad \text{(III.34)}$$

Ces équations n'ont pas de solutions analytiques et doivent être résolues numériquement. Il existe également un mécanisme d'effet tunnel direct (sans l'aide d'un phonon) mais ce phénomène ne se produit que pour de très forts champs électriques (environ $7 \times 10^7\ V/m$ selon *Hurkx* [58]), une gamme que l'on ne rencontre que dans des dispositifs particuliers comme les SPAD [59] (Single-Photon Avalanche Diode) mais rarement dans les imageurs. Cet effet est donc négligé. L'influence de l'effet Poole-Frenkel sur le mécanisme d'effet tunnel assisté par phonon est étudiée dans le paragraphe suivant.

Combinaison de l'effet Poole-Frenkel et Tunnel Assisté par Phonons

Les deux effets d'amplification de taux d'émission de charge lié au champ électrique présentés dans les paragraphes précédents ne sont pas indépendants. Nous considérons ici un centre coulombien pour tenir compte des deux effets. L'effet Poole-Frenkel va affecter le mécanisme PAT en réduisant la hauteur de la barrière à traverser, l'effet tunnel peut donc se produire plus facilement (Figure 3.12). Dans ce cas précis, il faut considérer que la barrière de potentiel à franchir est hyperbolique. *Hill* [60] et *Vincent et al.* [48] ont tenu compte de ces paramètres pour ajuster l'expression de la transparence de la barrière de potentiel.

Par conséquent, le taux d'émission d'électrons et de trous des pièges s'exprime ainsi [48] :

$$e_n' = e_n exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{(E_C-E_t)/k_B T} e_n \, exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_n^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1-\left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T}\right)^{5/3}\right)\right) dz \quad \text{(III.35)}$$

$$e_p' = e_p exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{E_t/k_B T} e_p \, exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_p^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1-\left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T}\right)^{5/3}\right)\right) dz \quad \text{(III.36)}$$

Le facteur d'augmentation de porteurs de charge lorsque l'effet Poole-Frenkel est combiné à l'effet tunnel assisté par phonon s'écrit :

$$\lambda_{n,PF\&PAT} = \frac{e_n'}{e_n} = exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{(E_C-E_t)/k_B T} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_n^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1-\left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T}\right)^{5/3}\right)\right) dz \quad \text{(III.37)}$$

$$\lambda_{p,PF\&PAT} = \frac{e_p'}{e_p} = exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{E_t/k_B T} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_p^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1-\left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T}\right)^{5/3}\right)\right) dz \quad \text{(III.38)}$$

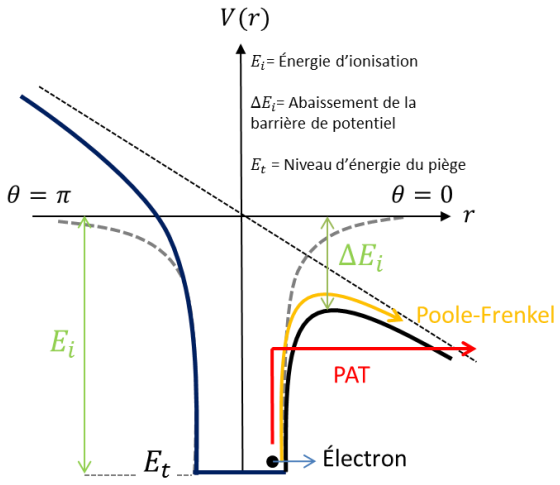


Figure III.13 : Illustration des effets du champ électrique sur la génération de charges. Les effets Poole-Frenkel et PAT sont combinés : l'effet Poole-Frenkel amplifie l'effet PAT.

L'effet Poole-Frenkel n'agit que sur des centres coulombiens, c'est-à-dire lorsqu'il existe une attraction coulombienne entre la particule émise et le piège. Pour résumé, si le piège est accepteur, les facteurs d'amplification des taux d'émission d'électrons et de trous s'exprimeront :

$$\lambda_n = 1 + \int_0^{(E_C - E_t)/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \qquad \text{(III.39)}$$

$$\lambda_p = exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{E_t/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \left(1 - \left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T} \right)^{5/3} \right) \right) dz \qquad \text{(III.40)}$$

En revanche si le piège est donneur les facteurs d'amplification d'émission seront :

$$\lambda_n = exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) + \int_{\Delta E_i/k_B T}^{(E_C - E_t)/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \left(1 - \left(\frac{\Delta E_i}{z k_B T} \right)^{5/3} \right) \right) dz \qquad \text{(III.41)}$$

$$\lambda_p = 1 + \int_0^{E_t/k_B T} exp\left(z - z^{3/2} \left(\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{q\hbar F} \right) \right) dz \qquad \text{(III.42)}$$

On notera que les conditions aux limites de ces équations permettent de retrouver les expressions individuelles des effets Poole-Frenkel et Tunnel Assisté par Phonons. En effet, si $\Delta E_i = 0$, alors on obtient le calcul de l'effet Tunnel Assisté par Phonons. A l'inverse, si l'intégrale est nulle, on retrouve l'expression de l'effet Poole-Frenkel. Les facteurs λ_n et λ_p correspondent à $\lambda_{n,PF\&PAT}$ et $\lambda_{p,PF\&PAT}$ respectivement, mais la notation et raccourcie pour des raisons de simplicité. Ces facteurs expriment l'amplification de l'émission d'électrons ou de trous d'un piège mais pour connaître l'effet d'amplification du champ électrique sur le courant d'obscurité, il est nécessaire de connaître le facteur d'amplification de paires électron-trou. Le facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou d'un piège est défini comme le rapport entre le taux de génération de paires électron-trou d'un piège amplifié par effet de champ électrique g'et de ce même taux de génération pour le piège considéré sans effet de champ électrique g. Il est également possible d'exprimer l'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g en fonction de λ_n et λ_p :

$$\lambda_g = \frac{g'}{g} = \frac{\lambda_n \lambda_p (e_n + e_p)}{\lambda_n e_n + \lambda_p e_p} \qquad \text{(III.43)}$$

Nous pouvons introduire le taux de génération volumique de paires électrons-trous U_G ($e^-/h^+.s^{-1}.cm^{-3}$) en fonction du facteur d'amplification λ_g et de la densité de pièges N_T ($pièges.cm^{-3}$) :

$$U_G = N_T g' = N_T \lambda_g g = N_T \frac{e_n' e_p'}{e_n' + e_p'} = N_T \frac{\lambda_n e_n \lambda_p e_p}{\lambda_n e_n + \lambda_p e_p} \qquad \text{(III.44)}$$

Prise en compte des effets de champ électrique dans *DAAN*

Dans *DAAN*, l'impact du champ électrique sur l'évaluation du courant d'obscurité est pris en compte à chaque interaction nucléaire qui se produit dans le pixel. Lorsque le tirage aléatoire du nombre de déplacements engendrés par une interaction nucléaire est terminé, *DAAN* procède au tirage aléatoire d'une coordonnée Z (profondeur) dans le profil de champ électrique du composant dans une loi uniforme (chaque profondeur a une probabilité égale d'être tirée) [39]. Cette carte en une dimension permet de connaître la distribution du champ électrique dans le volume du pixel. Cette carte est fournie par le constructeur de l'imageur et se présente sous la forme d'un fichier lu en entrée par *DAAN*. On associe de cette manière une interaction nucléaire à une profondeur dans le pixel : on parle de profondeur d'interaction. Grâce à la carte de champ électrique, on peut déterminer l'intensité du champ électrique associée à la profondeur de l'interaction nucléaire. On fait l'hypothèse que tous les déplacements atomiques générés par cette interaction vont servir à produire la même espèce de défauts avec les mêmes propriétés électriques. Cette hypothèse constitue une approximation qui nous permet d'obtenir un temps d'exécution plus rapide. Si l'on soumet plusieurs espèces de défauts en entrée de *DAAN*, un tirage aléatoire est réalisé pour choisir le défaut selon leur probabilité de présence respective. Connaissant l'intensité du champ électrique et l'espèce de défaut (avec ses propriétés électriques) mises en jeu dans l'interaction, on peut calculer l'effet du champ électrique sur ce piège. Il en découle ainsi un facteur d'amplification λ_g pour une interaction i dans le pixel, noté λ_{g_i}.

Dans certains modes de fonctionnement de *DAAN*, ce facteur d'amplification de champ électrique peut être couplé avec l'utilisation du facteur de dommage universel K_{dark}. Pour être en accord avec la définition du facteur universel de dommage, qui correspond à un facteur moyen de dégradation, il est nécessaire de normaliser le facteur d'amplification de l'interaction par le facteur d'amplification moyen de la simulation $\langle\lambda_g\rangle$. Ce dernier est calculé en effectuant 10000 tirages aléatoires de facteur de champ électrique. Le profil de champ et la population de défauts mis en entrée de *DAAN* vont influencer la valeur du facteur moyen d'amplification. Pour une interaction i, l'augmentation du courant d'obscurité ΔI_i est proportionnelle à [35] :

$$\Delta I_i \propto N_{d_i} \times K_{dark} \times \left(\frac{\lambda_{g_i}}{\langle\lambda_g\rangle}\right) \tag{III.45}$$

Avec N_{d_i} le nombre de déplacements atomiques générés au cours de la $i^{ème}$ interaction, λ_{g_i} le facteur d'amplification du taux de génération thermique de paires électron-trou obtenu par tirage aléatoire pour la $i^{ème}$ interaction et $\langle\lambda_g\rangle$ le facteur d'amplification moyen. Cette opération est valable puisque nous considérons dans *DAAN* que le courant d'obscurité est lié au nombre d'atomes déplacés par un facteur de proportionnalité. De cette manière, on ajoute un effet dispersif à l'estimation du courant d'obscurité tout en conservant le facteur de dommage universel : si $\lambda_{g_i} > \langle\lambda_g\rangle$ alors le ratio est supérieur à 1 et l'intensité du courant d'obscurité est amplifiée, et inversement si $\lambda_{g_i} < \langle\lambda_g\rangle$. L'opération est répétée autant de fois qu'il y a d'interactions dans le pixel, et les courants sont sommés au fur et à mesure. La normalisation par le facteur d'amplification moyen $\langle\lambda_g\rangle$ possède une seconde utilité qui sera détaillée dans le chapitre IV, dans le cas où l'on traite plusieurs défauts dans la même simulation. Le paragraphe suivant permet de comparer le modèle *DAAN* à des données expérimentales dans le cadre d'une simulation classique (seulement le facteur de dommage universel) et en tenant compte des effets de champ électrique en 1D.

III.3.4 Comparaison du modèle DAAN avec des mesures expérimentales

Depuis sa création, *DAAN* a connu de nombreuses évolutions. Le moyen le plus efficace de vérifier si les ajouts apportés à un modèle physique sont réalistes est de comparer les résultats de la modélisation avec des données expérimentales. En conséquence, les paramètres expérimentaux deviennent les paramètres d'entrée de l'outil numérique de simulation. Dans notre cas, les dimensions des pixels, le nombre de pixels de l'imageur, la température de mesure, le temps de mesure après irradiation ainsi que la fluence, le type et l'énergie de la particule sont les paramètres d'entrée de *DAAN*. Si l'utilisateur souhaite tenir compte des effets de champ électrique, la carte de champ 1D du composant ainsi qu'une population de défauts cristallins avec ses propriétés électriques doivent également être fournies.

III.3.4.1 Capteurs d'image utilisés pendant la thèse

Comme indiqué dans le chapitre I, les capteurs d'image utilisés au cours des travaux de thèse sont des capteurs de type CMOS. Ces capteurs font partie de la gamme de produits JADE [61] et SAPPHIRE [62] fabriqués par Teledyne E2V [63] (Figure III.14), des produits commerciaux destinés à divers secteurs de l'industrie. Plusieurs lots de ces capteurs ont été irradiés à des énergies et des fluences variées afin de couvrir un large spectre de dégradation. Au cours de cette thèse, l'analyse et la prédiction du courant d'obscurité se sont concentrées sur le cas d'une irradiation aux protons énergétiques. Pour des raisons de confidentialité, la carte de champ électrique, la géométrie exacte des pixels ainsi que leur architecture détaillée et composition ne seront pas fournies dans ce manuscrit.

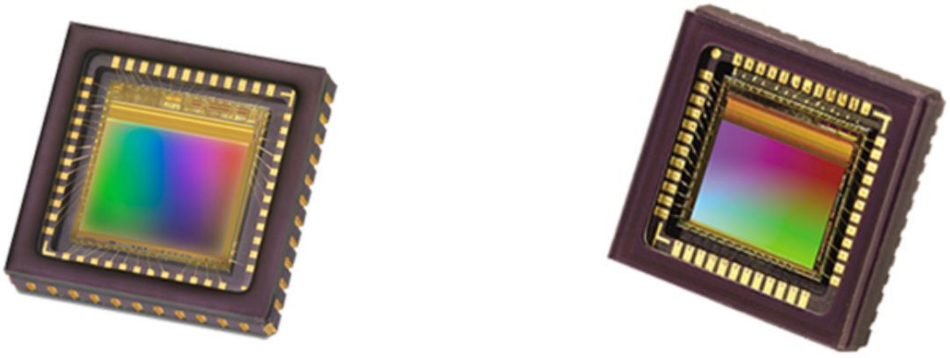


Figure III.14 : A gauche, le capteur d'image SAPPHIRE, à droite le capteur d'image JADE, tous les deux fabriqués par E2V Teledyne.

Les caractéristiques des capteurs JADE et SAPPHIRE ainsi que leurs conditions d'irradiation sont résumés dans le Tableau III.1. Les composants SAPPHIRE ont été irradiés aux installations de Synergy Health à Harwell au Royaume-Uni ainsi qu'au Paul Scherrer Institut (PSI) en Suisse, tandis que les composants JADE ont été bombardés aux protons aux installations du Kernfysisch Versneller Instituut (KVI), dans la province de Groningue aux Pays-Bas. Il est important de noter que dans le cadre de nos simulations, nous nous intéressons exclusivement à des irradiations mono-énergétiques. Cela signifie que le capteur est bombardé avec un seul type de particules avec une seule énergie, à l'inverse d'un spectre en énergie. Même s'il est vrai que dans l'espace le capteur est bombardé avec des flux de particules de natures et d'énergies différentes, il est difficile en laboratoire de reproduire l'environnement radiatif spatial complet de manière précise. De plus, il serait compliqué d'identifier les contributions de chaque type de particule dans la distribution de courant d'obscurité. Pour parfaire nos connaissances et notre compréhension des mécanismes de dégradation des composants électroniques, les capteurs sont irradiés en laboratoire avec un type de particule précis avec une énergie et une fluence connues. Ces conditions d'irradiation sont ensuite reproduites en simulation,

permettant une comparaison directe entre les résultats de mesure et de simulation. Les mesures expérimentales constituent le point de référence pour estimer la fiabilité de nos simulations.

	SAPPHIRE		JADE	
Année de commercialisation	2011		2009	
Nombre de pixels / Format	1310720 / 1280 (H) x 1024 (V)		550400 / 860 (H) x 640 (V)	
Pixel pitch[1]	5,3 µm		5,8 µm	
Forme / Position de la photodiode	Carrée / Centrée		Carrée / Centrée	
Format de sortie du signal (ADC)[2]	10 bits		8 bits	
Architecture	Photodiode pincée 5T (PPD 5T)		Photodiode pincée 5T (PPD 5T)	
Mode d'acquisition	Global et Rolling Shutter		Global Shutter	
Conditions d'irradiation	Energie (MeV) 6,5 72,8 200	Fluence (p^+/cm^2) $3{,}89 \times 10^9$ $2{,}52 \times 10^{10}$ $5{,}16 \times 10^{10}$	Energie (MeV) 30 60 120 180	Fluence (p^+/cm^2) $1{,}38 \times 10^{10}$ $7{,}28 \times 10^{10}$ $1{,}20 \times 10^{11}$ $1{,}66 \times 10^{11}$
	Température de mesure (K) 294,15 ($21°C$)		Température de mesure (K) 296,15 ($23°C$)	

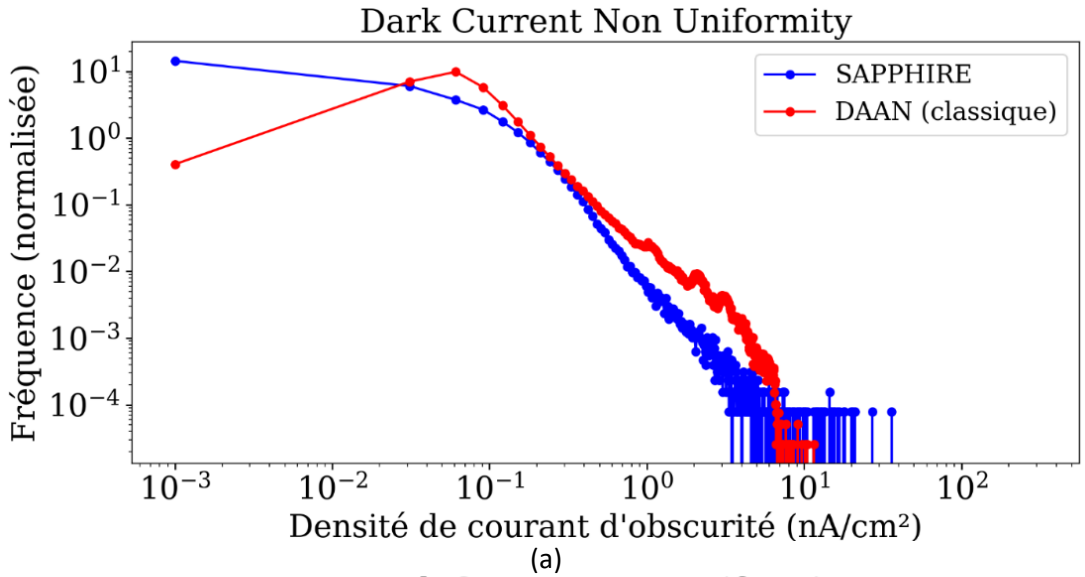
Tableau III.1 : Récapitulatif des caractéristiques des imageurs utilisés au cours de la thèse ainsi que des conditions d'irradiation de ces capteurs d'image.

III.3.4.2 Comparaison du modèle DAAN « classique » avec les données expérimentales

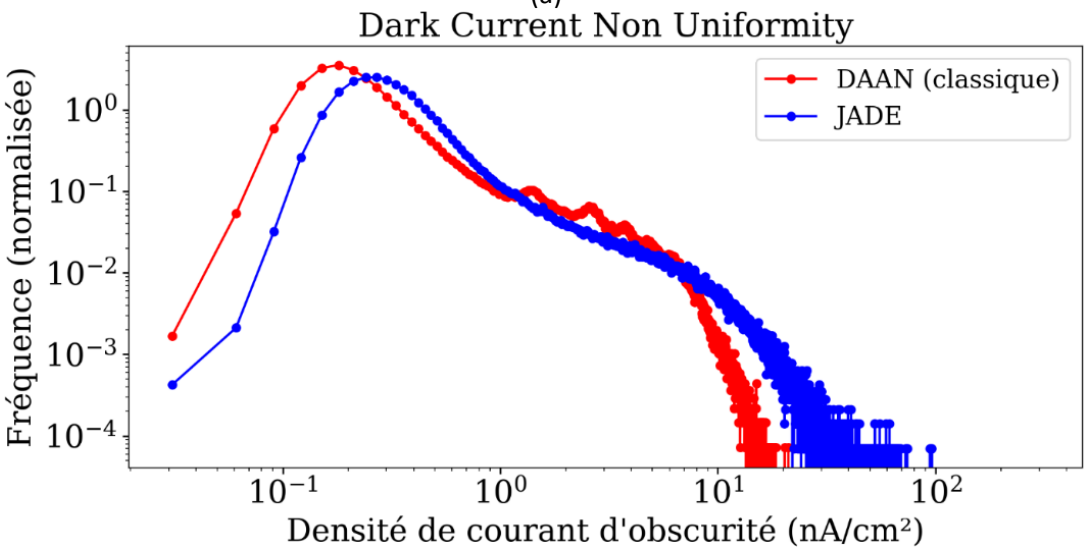
Nous appelons le modèle *DAAN* « classique » le cas où l'on ne considère pas les effets du champ électrique sur l'augmentation du courant d'obscurité. On considère seulement que l'augmentation du courant d'obscurité est proportionnelle au nombre de déplacements atomiques dans un pixel via le facteur de dommage universel. Les Figure III.15 représentent la DCNU (Dark Current Non Uniformity) dans les cas d'un capteur JADE irradié avec des protons de $60\ MeV$ à une fluence de $7{,}28 \times 10^{10}\ p^+/cm^2$ et d'un imageur SAPPHIRE irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$ à une fluence de $3{,}89 \times 10^9\ p^+/cm^2$. La DCNU est en fait un histogramme de la densité de courant d'obscurité, normalisé par la largeur du pas d'échantillonnage. On parle également de distribution différentielle $\frac{\partial N}{\partial \Delta J_{dark}}$. Ces distributions sont aussi normalisées par le nombre de pixels de la matrice testée, ce qui facilite les comparaisons de composant à composant. Le terme de fréquence fait référence à la proportion de pixels présentant une valeur d'augmentation du courant d'obscurité comprise dans un canal spécifique de l'histogramme. Les figures sont ici tracées en échelle logarithmique pour les axes X et Y.

[1] Pixel pitch : distance entre le centre d'un pixel et le centre d'un pixel adjacent. Plus cette valeur est petite, plus la résolution est grande.

[2] ADC : Analog to Digital Converter : Traduction anglaise de Convertisseur Analogique-Numérique (CAN). C'est un dispositif électronique permettant de convertir la tension mesurée (signal analogique) dans un pixel en signal numérique (un nombre). Le signal numérique est codé sur un nombre de bits propre à l'ADC. Plus la valeur est grande, plus le pas de quantification est petit, plus la sensibilité de l'ADC est élevée.



(a)



(b)

Figure III.15 : Comparaisons entre les distributions de courant d'obscurité (DCNU) expérimentale (en bleue) et simulée avec le modèle classique de DAAN (en bleue) pour : (a) le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^9\ p^+/cm^2$ *à 294,15 K, (b) le composant JADE irradié avec des protons de 60 MeV à une fluence de* $7{,}28 \times 10^{10}\ p^+/cm^2$ *à 296,15 K.*

On peut constater que le modèle classique (courbe rouge) permet de reproduire l'allure de la DCNU expérimentale (courbe bleue) de manière proche. Cependant, on remarque deux limitations à ce modèle. La première est que le modèle classique présente une dispersion faible sur les forts courants d'obscurité, appelés pixels chauds. Par conséquent, l'intensité des forts courants d'obscurité n'est pas correctement estimée. Deuxièmement, le nombre de pixels chauds (leur fréquence dans l'histogramme) est sous-estimé. Pour résumé, l'intensité du courant d'obscurité des pixels fortement dégradés ainsi que leur nombre ne sont pas correctement estimés.

III.3.4.3 Comparaison du modèle DAAN en tenant compte des effets de champ électrique avec une modélisation 1D

Pour remédier à cela, les effets d'amplification liés au champ électrique ont été incorporés dans la simulation (modèle 1D, voir paragraphe III.3.3). Le but de cette opération est d'ajouter une étape de simulation supplémentaire pour obtenir une modélisation plus réaliste comparée à

l'expérimental. Les Figure III.16 montrent le modèle *DAAN* classique, les données expérimentales et le modèle *DAAN* avec les effets de champ électrique 1D (en noire).

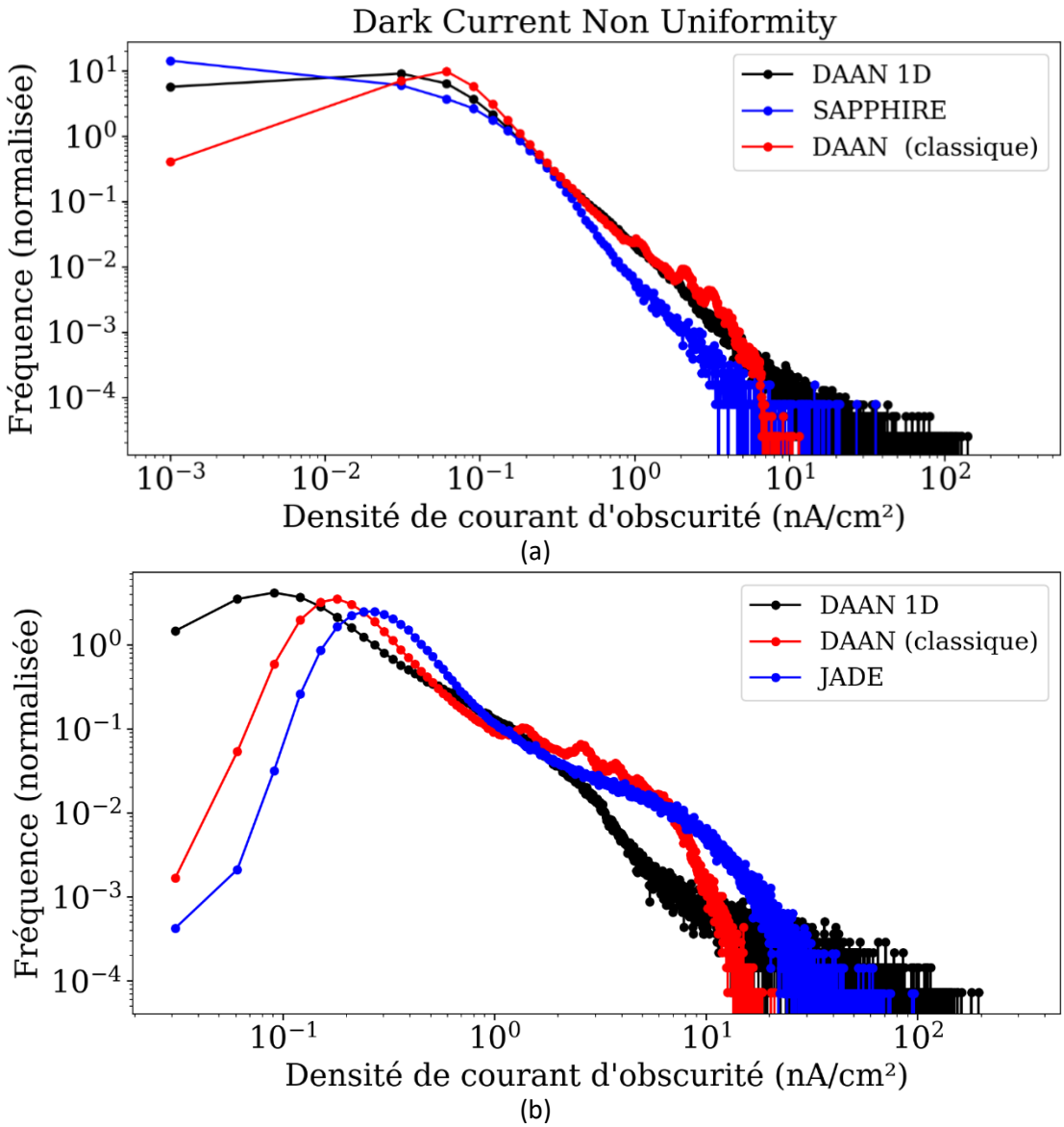


Figure III.16 : Comparaisons entre les distributions de courant d'obscurité (DCNU) expérimentale (en bleue), simulée avec le modèle classique de DAAN (en bleue) et simulée avec le modèle de DAAN tenant compte des effets de champ électrique 1D (en noire) pour : (a) le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de $6.5\ MeV$ *à une fluence de* $3{,}89 \times 10^{9}\ p^{+}/cm^{2}$ *à 294,15 K, (b) le composant JADE irradié avec des protons de* $60\ MeV$ *à une fluence de* $7{,}28 \times 10^{10}\ p^{+}/cm^{2}$ *à* $296{,}15\ K$.

On peut voir que les effets de champ électrique ajoutent un effet dispersif à la DCNU simulée, ce qui était l'objectif recherché. De cette manière, l'intensité du courant d'obscurité des pixels chauds est augmentée et l'allure de la queue de distribution est améliorée. Malgré tout, force est de constater que le modèle d'effets de champ électrique 1D surestime l'intensité et le nombre de pixels chauds par rapport aux données expérimentales. Mais au regard de la littérature cette conclusion pouvait être attendue, puisque une modélisation en une dimension des mécanismes physiques liés à la présence d'un champ électrique est connue pour surestimer les effets d'amplification du champ électrique sur le taux de génération thermique de paires électron-trou d'un défaut. Par conséquent, l'augmentation du courant d'obscurité liée aux effets de champ électrique est surestimée lorsqu'une modélisation 1D

est utilisée. Pour rappel (cf paragraphe III.3.3 de ce chapitre), cette surestimation est liée au fait qu'un modèle 1D implique une direction unique d'émission du porteur de charge depuis le piège. Cette direction unique est caractérisée par un angle $\theta = 0$, qui dans ce cas engendre la plus forte augmentation du taux de génération comparé à n'importe quel autre angle d'émission.

De plus, dans les simulations présentées ci-dessus, un seul type de piège a été utilisé : la bilacune chargée négativement une fois $V_2^{-/0}$. Le choix de ce piège relève du fait qu'il est souvent identifié dans la littérature comme un défaut électriquement actif et stable à température ambiante [13], [33], [64]. De plus, ses propriétés électriques sont relativement connues. Le niveau d'énergie est fixé à $E_v + 0.71\ eV$ au-dessus de la bande de valence, avec des sections efficaces de capture d'électron et de trou fixées à valeurs égales à $5 \times 10^{-19}\ m^2$. Le choix de ces paramètres a été effectué en fonction de la valeur des paramètres d'énergie de piège et de sections efficaces de capture trouvées dans la littérature. Ces valeurs nous semblent les plus représentatives par rapport aux données disponibles dans la littérature [31], [33], [64]–[66]. Cependant, nous avons vu au cours du chapitre II (paragraphe II.5.5) qu'une grande variété de pièges existe, avec des propriétés électriques différentes. L'influence de la population de pièges et de ses paramètres entre également en ligne de compte dans l'estimation de l'augmentation du courant d'obscurité lorsque des effets de champ électrique sont considérés. Le point important à retenir de ce modèle 1D est qu'il permet d'améliorer la tendance de la DCNU pour les forts courants d'obscurité.

Le chapitre IV de ce manuscrit présente le modèle d'effets de champ électrique en 3D développé au cours de la thèse. Ce modèle original a pour objectif d'améliorer la prédiction du courant d'obscurité lorsque des effets de champ électrique sont considérés. L'influence des paramètres de pièges sur l'estimation du courant d'obscurité avec le modèle d'effets de champ électrique 3D, et le cas d'une population hétérogène de défauts seront également étudiés dans le chapitre suivant.

III.4 Conclusions du chapitre

Ce chapitre a permis de définir les différentes composantes du courant d'obscurité dans un imageur. On compte tout d'abord le courant de génération, lui-même divisé en deux contributions, le courant surfacique et le courant volumique. Le courant de diffusion est la seconde composante du courant d'obscurité. Le dénominateur commun à toutes ces contributions est le mécanisme de génération de charge par un défaut, qu'il soit en volume ou en surface.

Depuis la création des capteurs d'images tels qu'on les connaît aujourd'hui (années 1950), les scientifiques n'ont cessé d'étudier le comportement de ces dispositifs face aux particules énergétiques. Ces recherches ont notamment permis de proposer des méthodes d'estimation du courant d'obscurité après irradiation. La prédiction du courant d'obscurité est un enjeu pour l'industrie aérospatiale car le courant d'obscurité est un paramètre dimensionnant pour certains systèmes. Les méthodes d'estimation les plus classiques reposent sur l'utilisation de coefficients de proportionnalité, appelés facteurs de dommage. D'autres méthodes utilisent des outils numériques pour refléter le caractère non uniforme des dégradations engendrées par une irradiation aux particules énergétiques. L'outil de prédiction développé par l'ONERA, basé sur la méthode de Monte Carlo, tire parti des avantages de ces outils d'estimation. Le fonctionnement de cet outil de prédiction a été décrit dans ce chapitre. Cette méthode de calcul permet d'estimer la distribution du courant d'obscurité dans un imageur après irradiation. La comparaison des simulations avec les résultats de mesures expérimentales a permis de valider le modèle.

Toutefois, même si ce modèle permet de reproduire la distribution de courant d'obscurité mesuré expérimentalement au premier ordre, les forts courants d'obscurité sont néanmoins sous-

estimés. Un modèle d'effets de champ électrique en une dimension a été proposé pour obtenir une distribution plus réaliste. L'ajout de ce modèle a eu pour conséquence d'améliorer l'allure de la distribution, mais de surestimer l'intensité et le nombre de pixels chauds. En effet, une modélisation en une dimension des mécanismes liés aux effets de champ électrique est connue dans la littérature pour surestimer leurs effets sur le taux de génération thermique de paires électron-trou, et donc par conséquent sur le courant d'obscurité.

Dans le but d'apporter des améliorations à l'estimation du courant d'obscurité, la modélisation en trois dimensions des effets de champ électrique développée au cours des travaux de thèse est proposée dans le chapitre suivant, ainsi qu'une étude approfondie de l'influence d'une population hétérogène de défauts sur l'estimation du courant d'obscurité après irradiation.

Bibliographie du chapitre

[1] C. Poivey, « TNID Total Non Ionizing Dose or DD Displacement Damage - ppt download », présenté à SCC Workshop, CERN, mai 09, 2017, Consulté le: nov. 19, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://slideplayer.com/slide/13154892/.

[2] R. Ecoffet, « In-flight Anomalies on Electronic Devices », in *Radiation Effects on Embedded Systems*, R. VELAZCO, P. FOUILLAT, et R. REIS, Éd. Dordrecht: Springer Netherlands, 2007, p. 31-68.

[3] V. L. Pisacane, *Fundamentals of Space Systems*. Oxford University Press, 2005.

[4] R. Widenhorn, M. M. Blouke, A. Weber, A. Rest, et E. Bodegom, « Temperature dependence of dark current in a CCD », 2002.

[5] V. Goiffon *et al.*, « Identification of Radiation Induced Dark Current Sources in Pinned Photodiode CMOS Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 59, n° 4, p. 918-926, août 2012, doi: 10.1109/TNS.2012.2190422.

[6] A. S. Grove et D. J. Fitzgerald, « Surface effects on p-n junctions: Characteristics of surface space-charge regions under non-equilibrium conditions », *Solid-State Electron.*, vol. 9, n° 8, p. 783-806, août 1966, doi: 10.1016/0038-1101(66)90118-3.

[7] O. Gilard, M. Boutillier, G. Quadri, G. Rolland, et R. Germanicus, « New Approach for the Prediction of CCD Dark Current Distribution in a Space Radiation Environment », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 6, p. 3626-3632, déc. 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.2004875.

[8] E. Martin, « Etude physique de la dégradation et modèles pour l'assurance durcissement des capteurs d'image en environnement spatial », PhD Thesis, Toulouse, ISAE, 2012.

[9] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: Wiley, 1981.

[10] F. Domengie, « Etude des défauts électriquement actifs dans les matériaux des capteurs d'image CMOS », févr. 2011, Consulté le: déc. 05, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01249517.

[11] « Comment SpaceX s'est fait une place dans l'aérospatiale », *Le Monde.fr*, févr. 07, 2018.

[12] S. Kim et D.-H. Hwang, « Dark Current Detection of the Star Tracker Image Sensor to Improve the Accuracy of Satellite Attitudes », *J. Inst. Control Robot. Syst.*, vol. 23, p. 597-605, juill. 2017, doi: 10.5302/J.ICROS.2017.17.0062.

[13] J. R. Srour et J. W. Palko, « Displacement Damage Effects in Irradiated Semiconductor Devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 60, n° 3, p. 1740-1766, juin 2013, doi: 10.1109/TNS.2013.2261316.

[14] J. R. Srour, C. J. Marshall, et P. W. Marshall, « Review of displacement damage effects in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 50, n° 3, p. 653-670, juin 2003, doi: 10.1109/TNS.2003.813197.

[15] J. R. Srour, S. C. Chen, S. Othmer, et R. A. Hartmann, « Neutron Damage Mechanisms in Charge Transfer Devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 25, n° 6, p. 1251-1260, déc. 1978, doi: 10.1109/TNS.1978.4329521.

[16] H. W. Kraner, Z. Li, et K. U. Posnecker, « Fast neutron damage in silicon detectors », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.*, vol. 279, nº 1, p. 266-271, juill. 1989, doi: 10.1016/0168-9002(89)91091-7.
[17] C. J. Dale, P. W. Marshall, E. A. Burke, G. P. Summers, et G. E. Bender, « The generation lifetime damage factor and its variance in silicon », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 36, nº 6, p. 1872-1881, déc. 1989, doi: 10.1109/23.45381.
[18] P. W. Marshall, C. J. Dale, E. A. Burke, G. P. Summers, et G. E. Bender, « Displacement damage extremes in silicon depletion regions », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 36, nº 6, p. 1831-1839, déc. 1989, doi: 10.1109/23.45376.
[19] P. W. Marshall, C. J. Dale, et E. A. Burke, « Proton-induced displacement damage distributions and extremes in silicon microvolumes charge injection device », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 37, nº 6, p. 1776-1783, déc. 1990, doi: 10.1109/23.101191.
[20] J. R. Srour et D. H. Lo, « Universal damage factor for radiation-induced dark current in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, nº 6, p. 2451–2459, 2000.
[21] J.-M. Belloir *et al.*, « Dark Current Spectroscopy in Neutron, Proton and Ion Irradiated CMOS Image Sensors: From Point Defects to Clusters », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, nº 1, p. 27-37, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2641479.
[22] C. Virmontois, « Analyse des effets des déplacements atomiques induits par l'environnement radiatif spatial sur la conception des imageurs CMOS », Toulouse, ISAE, 2012.
[23] R. Germanicus *et al.*, « Evaluation and prediction of the degradation of a COTS CCD induced by displacement damage », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, nº 6, p. 2830-2835, déc. 2002, doi: 10.1109/TNS.2002.805554.
[24] G. F. D. Betta *et al.*, « Proton-induced damage in JFET transistors and charge preamplifiers on high-resistivity silicon », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 51, nº 5, p. 2880-2886, oct. 2004, doi: 10.1109/TNS.2004.835063.
[25] C. Inguimbert, T. Nuns, E. Martin, D. Falguère, et O. Gilard, « Monte Carlo based dcnu modeling », présenté à 2012 13th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems (RADECS), Biarritz, France, sept. 2012.
[26] J. Bogaerts, B. Dierickx, et R. Mertens, « Enhanced dark current generation in proton-irradiated CMOS active pixel sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, nº 3, p. 1513–1521, 2002.
[27] H. E. Kern et J. M. McKenzie, « Noise from Neutron Induced Defects in Junction Field Effect Transistors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 17, nº 6, p. 256-261, déc. 1970, doi: 10.1109/TNS.1970.4325802.
[28] G. R. Hopkinson, « Cobalt60 and proton radiation effects on large format, 2-D, CCD arrays for an Earth imaging application », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 39, nº 6, p. 2018-2025, déc. 1992, doi: 10.1109/23.211399.
[29] G. R. Hopkinson, C. J. Dale, et P. W. Marshall, « Proton effects in charge-coupled devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 43, nº 2, p. 614-627, avr. 1996, doi: 10.1109/23.490905.
[30] J. C. Dunlap, M. M. Blouke, E. Bodegom, et R. Widenhorn, « Interpreting Activation Energies in Digital Image Sensors », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 63, nº 1, p. 26-31, janv. 2016, doi: 10.1109/TED.2015.2451661.
[31] A. O. Evwaraye et E. Sun, « Electron-irradiation-induced divacancy in lightly doped silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 47, nº 9, p. 3776-3780, sept. 1976, doi: 10.1063/1.323260.
[32] Space Technology Course, Association RADECS, et Frankreich, Éd., *Space radiation environment and its effects on spacecraft and systems: SREC 04 ; Space Technology Course ; 14 - 18 June 2004, Toulouse*. Toulouse: CEPADUES-Ed, 2004.
[33] G. D. Watkins, « Intrinsic defects in silicon », *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 3, nº 4, p. 227-235, août 2000, doi: 10.1016/S1369-8001(00)00037-8.
[34] A. M. Kellerer, « 2 - Fundamentals of Microdosimetry », in *The Dosimetry of Ionizing Radiation*, K. R. Kase, B. E. Bjärngard, et F. H. Attix, Éd. Academic Press, 1985, p. 77-162.
[35] M. C. Ursule, « Compréhension des mécanismes physiques à l'origine des dégradations électriques extrêmes des pixels dans les capteurs d'images irradiés », Toulouse, ISAE, 2017.

[36] M. C. Ursule, C. Inguimbert, et T. Nuns, « Impact of the Border Crossing Effects on the DCNU for Pixel Arrays Irradiated With High Energy Protons », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 63, n° 4, p. 2159-2167, août 2016, doi: 10.1109/TNS.2016.2550619.
[37] M. S. Robbins, « High-energy proton-induced dark signal in silicon charge coupled devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, n° 6, p. 2473-2479, déc. 2000, doi: 10.1109/23.903795.
[38] C. Inguimbert *et al.*, « Modeling the Dark Current Non-Uniformity of Image Sensors With GEANT4 », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 61, n° 6, p. 3323-3330, déc. 2014, doi: 10.1109/TNS.2014.2364332.
[39] M. C. Ursule, T. Nuns, C. Inguimbert, H. Bugnet, F. Mayer, et J. Pratlong, « Impact of the Electric Field in the Modelling of the Dark Current Non Uniformity in Pixel Arrays », in *2017 17th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems (RADECS)*, Geneva, Switzerland, oct. 2017, p. 1-7, doi: 10.1109/RADECS.2017.8696167.
[40] M. C. Ursule, C. Inguimbert, T. Nuns, et J. Morio, « Comparison of Methods to Calculate the Dark Current Nonuniformity », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 7, p. 1345-1354, juill. 2018, doi: 10.1109/TNS.2018.2847343.
[41] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, et P. V. Thomsen, « INTEGRAL EQUATIONS GOVERNING RADIATION EFFECTS. (NOTES ON ATOMIC COLLISIONS, III) », *Kgl Dan. Vidensk. Selsk. Mat Fys Medd*, vol. Vol: 33: No. 10, janv. 1963, Consulté le: févr. 15, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://www.osti.gov/biblio/4701226-integral-equations-governing-radiation-effects-notes-atomic-collisions-iii.
[42] « Overview | geant4.web.cern.ch ». https://geant4.web.cern.ch/ (consulté le déc. 05, 2018).
[43] H. Bethe, W. Heitler, et P. A. M. Dirac, « On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons », *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*, vol. 146, n° 856, p. 83-112, août 1934, doi: 10.1098/rspa.1934.0140.
[44] J. R. Srour et R. A. Hartmann, « Enhanced displacement damage effectiveness in irradiated silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 36, n° 6, p. 1825-1830, déc. 1989, doi: 10.1109/23.45375.
[45] C. J. Dale, P. W. Marshall, et E. A. Burke, « Particle-induced spatial dark current fluctuations in focal plane arrays », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 37, n° 6, p. 1784-1791, déc. 1990, doi: 10.1109/23.101192.
[46] E. Martin *et al.*, « Gamma and Proton-Induced Dark Current Degradation of 5T CMOS Pinned Photodiode 0.18µm CMOS Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 61, n° 1, p. 636–645, 2014.
[47] E. Martin, T. Nuns, C. Virmontois, J.-P. David, et O. Gilard, « Proton and gamma -Rays Irradiation-Induced Dark Current Random Telegraph Signal in a 0.18µm CMOS Image Sensor », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 60, n° 4, p. 2503-2510, août 2013, doi: 10.1109/TNS.2013.2251662.
[48] G. Vincent, A. Chantre, et D. Bois, « Electric field effect on the thermal emission of traps in semiconductor junctions », *J. Appl. Phys.*, vol. 50, n° 8, p. 5484-5487, août 1979, doi: 10.1063/1.326601.
[49] O. K. B. Lui et P. Migliorato, « A new generation-recombination model for device simulation including the Poole-Frenkel effect and phonon-assisted tunnelling », *Solid-State Electron.*, vol. 41, n° 4, p. 575-583, avr. 1997, doi: 10.1016/S0038-1101(96)00148-7.
[50] J. Frenkel, « On Pre-Breakdown Phenomena in Insulators and Electronic Semi-Conductors », *Phys. Rev.*, vol. 54, n° 8, p. 647-648, oct. 1938, doi: 10.1103/PhysRev.54.647.
[51] A. K. Jonscher, « Electronic properties of amorphous dielectric films », *Thin Solid Films*, vol. 1, n° 3, p. 213-234, nov. 1967, doi: 10.1016/0040-6090(67)90004-1.
[52] P. A. Martin, B. G. Streetman, et K. Hess, « Electric field enhanced emission from non-Coulombic traps in semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 52, n° 12, p. 7409-7415, déc. 1981, doi: 10.1063/1.328731.
[53] L. Kleinman, « Theory of Phonon-Assisted Tunneling in Semiconductors », *Phys Rev 140 A637*, 1965, Consulté le: déc. 05, 2018. [En ligne]. Disponible sur: https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.140.A637.

[54] D. Pons et S. Makram-Ebeid, « Phonon assisted tunnel emission of electrons from deep levels in GaAs », *J. Phys.*, vol. 40, n° 12, p. 1161-1172, 1979, doi: 10.1051/jphys:0197900400120116100.
[55] P. A. M. Dirac et R. H. Fowler, « On the theory of quantum mechanics », *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*, vol. 112, n° 762, p. 661-677, oct. 1926, doi: 10.1098/rspa.1926.0133.
[56] E. Schrödinger, « An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules », *Phys. Rev.*, vol. 28, n° 6, p. 1049-1070, déc. 1926, doi: 10.1103/PhysRev.28.1049.
[57] L. Brillouin, « La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale de resolution par approximations successives », *ComptRendHebdSeances AcadSci*, vol. 183, n° 1, p. 24-26, juill. 1926.
[58] G. A. M. Hurkx, D. B. M. Klaassen, et M. P. G. Knuvers, « A new recombination model for device simulation including tunneling », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 39, n° 2, p. 331-338, févr. 1992, doi: 10.1109/16.121690.
[59] D. Fiore, M. Campajola, C. Nappi, E. Sarnelli, et F. D. Capua, « Random Telegraph Signal Investigation in Different CMOS SPAD Layouts », in *2018 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Proceedings (NSS/MIC)*, nov. 2018, p. 1-4, doi: 10.1109/NSSMIC.2018.8824585.
[60] R. M. Hill, « Poole-Frenkel conduction in amorphous solids », *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.*, vol. 23, n° 181, p. 59-86, janv. 1971, doi: 10.1080/14786437108216365.
[61] « Jade », *Teledyne e2v Imaging*. https://imaging.teledyne-e2v.com/products/2d-cmos-image-sensors/jade/ (consulté le juill. 03, 2020).
[62] « Sapphire 1.3M - EV76C560 - CMOS Image Sensor - Teledyne e2v », *e2v*. https://www.teledyne-e2v.com/products/imaging/cmos-image-sensors/ev76c560/ (consulté le déc. 05, 2018).
[63] « Industrial/Machine Vision », *Teledyne e2v Imaging*. https://imaging.teledyne-e2v.com/products/applications/industrial-machine-vision/ (consulté le févr. 25, 2020).
[64] J. C. Bourgoin et N. de Angelis, « Radiation-induced defects in solar cell materials », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 66, n° 1, p. 467-477, févr. 2001, doi: 10.1016/S0927-0248(00)00208-7.
[65] C. Tivarus et W. C. McColgin, « Dark Current Spectroscopy of Irradiated CCD Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 3, p. 1719-1724, juin 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.919263.
[66] G. D. Watkins et J. W. Corbett, « Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of the Divacancy », *Phys. Rev.*, vol. 138, n° 2A, p. A543-A555, avr. 1965, doi: 10.1103/PhysRev.138.A543.

Chapitre IV: Etude d'un modèle original d'effets de champ électrique en trois dimensions sur l'amplification du courant d'obscurité

L'outil numérique basé sur la méthode de Monte Carlo développée à l'ONERA permet d'estimer la distribution du courant d'obscurité dans un imageur après irradiation. L'Effet du Champ Electrique (abrégé ECE) sur le courant d'obscurité peut également être pris en compte dans les simulations. En première approximation, un modèle en une dimension (1D) des mécanismes liés au champ électrique a été inclus à *DAAN*. Cependant, un tel modèle a pour conséquence de surestimer le nombre de pixels chauds ainsi que l'intensité du courant d'obscurité qui les traverse. Ce résultat est plutôt problématique puisque la quantité de pixels chauds est justement ce que l'on veut prédire. Il est donc nécessaire d'affiner les simulations afin d'obtenir une distribution du courant d'obscurité plus réaliste.

Nous proposons donc de prendre en compte des effets de champ électrique en trois dimensions (3D) et non plus en une dimension (1D). Le modèle 3D et sa validation par comparaison à des simulations TCAD [1] sont présentés dans ce chapitre. Des études paramétriques entre le modèle 1D et 3D seront aussi présentées, avant d'analyser l'influence du modèle 3D sur l'estimation du courant d'obscurité dans les imageurs. Jusqu'ici le modèle d'effets de champ électrique n'était utilisé qu'avec une population homogène de défauts, c'est-à-dire avec une population composée de pièges de nature unique avec des propriétés électriques identiques. La thèse a permis de considérer le cas d'une population hétérogène de défauts, possédant une nature et des propriétés différentes. L'ensemble de ces résultats de simulation sera comparé aux mesures expérimentales réalisées sur les composants décrits à la fin du chapitre précédent.

IV.1 Développement d'un modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions

Pour rappel (cf chapitre III), une modélisation en une dimension des mécanismes liés à la présence d'un champ électrique repose sur l'hypothèse que le porteur de charge est émis depuis le piège vers une des bandes énergétiques (bande de conduction pour un électron, bande de valence pour un trou) selon une seule et unique direction. Si l'on prend le cas d'un électron émis depuis un niveau de piège vers la bande de conduction, le modèle 1D considère que l'émission sera parallèle au champ électrique et dans le sens opposé à la direction du champ électrique, en d'autres termes un modèle 1D suppose que $\theta = 0$. Par conséquent, l'électron est aisément libéré du piège et rejoint la bande de conduction pour participer à l'augmentation du courant d'obscurité. Cette situation particulière constitue le pire cas de génération du courant d'obscurité. C'est pour cette raison qu'un modèle 1D surestime l'impact du champ électrique sur l'augmentation du taux de génération thermique de paires électron-trou.

Jonscher [2] et *Martin et al.* [3] font partie des premiers auteurs à rapporter que la modélisation de l'effet Poole-Frenkel en 1D surestime son impact sur le taux de génération de paires électron-trou car il est calculé à son maximum. *Hartke et al.* [4] et *Jonscher* [2] ont introduit une dépendance en θ dans l'expression de l'abaissement de la barrière de potentiel par effet Poole-Frenkel.

IV.1.1 Formulation analytique du modèle 3D

Si le porteur n'est pas émis selon la direction du champ électrique, la force qui s'exercera sur celui-ci pour le faire sortir du piège sera pondérée d'un facteur $cos(\theta)$, θ représentant l'angle entre la direction du champ électrique et la direction d'émission du porteur. Au niveau énergétique, on peut tenir compte de cet angle simplement en introduisant ce facteur comme suit :

$$\Delta E_i(\theta) = \left(\frac{q^3 F cos(\theta)}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{(IV.1)}$$

Cette expression ne s'applique que si $0 \leq \theta \leq \pi/2$. Dans l'autre hémisphère ($\pi/2 \leq \theta \leq \pi$), le champ électrique s'opposera à la sortie du piège. Cet effet d'atténuation peut être négligé. C'est l'hypothèse que nous avons choisie. Nous suivons en cela l'hypothèse émise par *Hartke et al.* [4] et *Martin et al.* [3]. L'émission d'un porteur de charge est isotrope, en revanche l'amplification associée à cette émission ne l'est pas. C'est pourquoi il est nécessaire d'intégrer le facteur d'amplification dans toutes directions contenues dans la demi-sphère située entre le piège et la bande d'énergie vers laquelle le porteur de charge tente d'accéder. On intègre donc l'expression du facteur d'amplification lié à l'effet Poole-Frenkel λ_{PF} :

$$\lambda_{PF} = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\pi} exp\left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{k_B T}\right) sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \quad \text{(IV.2)}$$

De cette manière, le facteur d'amplification est moyenné selon toutes les directions possibles d'émission du porteur de charge caractérisées par θ et ϕ. En suivant les hypothèses effectuées par *Martin et al.* et *Hartke et al.*, on suppose que le taux d'émission est indépendant du champ électrique pour toutes les directions θ comprises entre $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$, on décompose l'équation (IV.2) en la somme de deux termes :

$$\lambda_{PF} = \frac{1}{4\pi}\left[\int_0^{\pi/2} exp\left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{k_B T}\right) sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi + \int_{\pi/2}^{\pi} sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\right] \quad \text{(IV.3)}$$

En introduisant le changement de variable $t = cos\theta$ et en résolvant l'intégrale, on obtient :

$$\lambda_{PF} = \frac{1}{2} + \frac{1 + \left(\frac{\Delta E_i}{k_B T} - 1\right) exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right)}{\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right)^2} \quad \text{(IV.4)}$$

Avec ΔE_i l'expression de l'abaissement de la barrière de potentiel sans dépendance de l'angle d'émission θ ($\Delta E_i = \left(\frac{q^3 F}{\pi\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}$, cf chapitre III).

La modélisation des effets de champ électrique en 3D nécessite une description complète de chacun de ses mécanismes en 3D. Pour cela, il faut introduire une dépendance de l'effet Tunnel Assisté par Phonon selon la direction d'émission du porteur de charge. *Bogaerts et al.* [5] ont proposé une formulation « hybride » des mécanismes liés à la présence d'un champ électrique. Les auteurs ont tenu compte dans leur méthode d'estimation du courant d'obscurité des effets de champ électrique. Leur modèle consiste en la somme de l'effet Poole-Frenkel 3D décrit ci-dessus et de l'effet Tunnel Assisté

par Phonon en 1D, comme présenté précédemment dans le chapitre III. Afin d'obtenir une description entièrement en 3D des mécanismes liés au champ électrique, nous proposons de prendre en compte la direction de l'émission du porteur de charge dans l'effet Tunnel Assisté par Phonon. Pour introduire cette dépendance selon l'angle d'émission, il est nécessaire de réécrire l'expression de la combinaison de l'effet Poole-Frenkel et de l'effet Tunnel Assisté par Phonons en fonction des angles θ et ϕ. La dépendance en θ est masquée dans l'expression de l'abaissement de la barrière de potentiel par effet Poole-Frenkel qui augmente la probabilité de l'effet tunnel :

$$\lambda_{n,PF\&PAT} = \lambda_{PF} + \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2}\left[\int_{\Delta E_i(\theta)/k_BT}^{(E_C-E_t)/k_BT} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_n^*)^{1/2}(k_BT)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1 - \left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{zk_BT}\right)^{5/3}\right)\right)dz\right] sin\theta d\theta \quad \text{(IV.5)}$$

$$\lambda_{p,PF\&PAT} = \lambda_{PF} + \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2}\left[\int_{\Delta E_i(\theta)/k_BT}^{E_t/k_BT} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_p^*)^{1/2}(k_BT)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1 - \left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{zk_BT}\right)^{5/3}\right)\right)dz\right] sin\theta d\theta \quad \text{(IV.6)}$$

Cette dépendance en θ se retrouve également aux bornes des intégrales de l'effet PAT. Ce nouveau formalisme nécessite de prendre quelques précautions lors de sa résolution numérique. Lorsque l'on parcourt l'intégrale selon θ, il faut calculer à chaque itération le terme $\Delta E_i(\theta)$. L'influence de l'abaissement de la barrière de potentiel sur l'effet tunnel est donc différent à chaque θ, mais il ne faut pas oublier de mettre à jour la borne inférieure (ou supérieure suivant le cas) de l'intégrale sur l'énergie de transition z (il faut recalculer le terme $\Delta E_i(\theta)/k_BT$ à chaque itération). Par conséquent l'intégration numérique de ces expressions ne se réalise pas de manière classique.

Dans le cas de la modélisation des effets de champ électrique en 3D selon le formalisme développé ci-dessus, si le piège est accepteur les facteurs d'amplification des taux d'émission d'électrons et de trous s'écrivent :

$$\lambda_n = 1 + \int_0^{(E_C-E_t)/k_BT} exp\left(z\ -\ z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_n^*)^{1/2}(k_BT)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\right)dz \quad \text{(IV.7)}$$

$$\lambda_p = \frac{1}{2} + \frac{1+\left(\frac{\Delta E_i}{k_BT}-1\right)exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_BT}\right)}{\left(\frac{\Delta E_i}{k_BT}\right)^2} + \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2}\left[\int_{\Delta E_i(\theta)/k_BT}^{E_t/k_BT} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_p^*)^{1/2}(k_BT)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1 - \left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{zk_BT}\right)^{5/3}\right)\right)dz\right] sin\theta d\theta \quad \text{(IV.8)}$$

Dans le cas d'un piège donneur, les facteurs d'amplification des taux d'émission d'électrons et de trous s'expriment :

$$\lambda_n = \frac{1}{2} + \frac{1+\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}-1\right)exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right)}{\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right)^2} + \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2}\left[\int_{\Delta E_i(\theta)/k_B T}^{(E_C-E_t)/k_B T} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m_n^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\left(1-\left(\frac{\Delta E_i(\theta)}{z k_B T}\right)^{5/3}\right)\right)dz\right] sin\theta d\theta \quad \text{(IV.9)}$$

$$\lambda_p = 1 + \int_0^{E_t/k_B T} exp\left(z - z^{3/2}\left(\frac{4}{3}\frac{(2m^*)^{1/2}(k_B T)^{3/2}}{q\hbar F}\right)\right)dz \quad \text{(IV.10)}$$

Pour résumé, nous avons vu dans l'expression analytique de la combinaison des effets Poole-Frenkel et Tunnel Assisté par Phonon (équations (IV.8) et (IV.9)) que l'une des bornes de l'intégrale dépendait de l'expression de l'abaissement de la barrière de potentiel. Un calcul en trois dimensions nécessite donc de tenir compte simultanément de la variation de l'abaissement de la barrière de potentiel avec l'angle θ dans le terme couplant l'effet PAT et PF et des bornes de l'intégrale. Tout comme dans le cas d'une modélisation 1D, ces équations n'ont pas de solutions analytiques et doivent être résolues numériquement. A notre connaissance, il n'existe pas de modèle analytique équivalent dans la littérature pour calculer l'impact du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou selon une description entièrement en trois dimensions. De ce fait, le paragraphe suivant présente le protocole numérique de validation du modèle original 3D par comparaison avec des simulations numériques TCAD.

IV.1.2 Validation du modèle 3D

Dans le but de valider ce modèle analytique, nous décidons d'entamer une démarche de validation par une approche TCAD (Technology Computer-Aided Design en anglais) [1], autrement dit de comparer les résultats de notre modèle analytique avec les résultats de simulation d'un logiciel de modélisation de dispositifs électroniques assisté par ordinateur (parfois appelé logiciel de Conception Assistée par Ordinateur en français, abrégé CAO). Ce type de logiciel permet de modéliser un système électronique composé de matériaux semi-conducteurs (diode, capteur, pixel, jonction PN, transistors…) et de choisir les modèles physiques que l'on souhaite prendre en compte dans notre simulation, avec les paramètres associés. La comparaison entre ce logiciel et notre modèle sera notre base de validation. Les logiciels TCAD sont des outils aujourd'hui répandus et reconnus aussi bien par les industriels que par diverses communautés scientifiques. Les logiciels TCAD sont utilisés pour simuler le processus de fabrication d'un composant électronique et ses propriétés électriques. Cela permet à un fabricant ou un industriel de tester le comportement et la réponse de ce composant à une tension, une excitation lumineuse ou magnétique et de tester plusieurs configurations ou géométries du composant sans le fabriquer. Ces logiciels permettent également aux scientifiques de tester l'influence de certains modèles physiques et de leurs paramètres sur le comportement d'un composant, comme par exemple l'influence d'un flux d'ions sur la réponse d'une cellule de stockage d'informations. Dans notre cas, le logiciel TCAD utilisé est *Synopsys Sentaurus* version J-2014.09 [6].

La simulation TCAD se compose de deux branches [6] :

- Simulation de procédé de fabrication : simulation des étapes de fabrication standard comme l'implantation ionique, diffusion, oxydation, gravure chimique, déposition (cf chapitre I)… Ce type de simulation est basé sur la méthode des éléments finis.

- Simulation de dispositif : simulation des caractéristiques électriques, optiques ou thermiques de composants électroniques. Ce type de simulation consiste en la résolution d'un ensemble complexe d'équations dans des structures discrétisées.

La démarche de validation de notre outil analytique s'inscrit dans le deuxième type de simulation numérique : nous utilisons les mêmes modèles physiques (ou équivalents) que dans *DAAN* avec des paramètres de simulation identiques pour voir si notre modèle analytique en trois dimensions des effets de champ électrique donne des résultats similaires au logiciel TCAD, qui ne procède pas de la même manière pour résoudre les simulations. Un logiciel TCAD a besoin d'un « maillage », c'est-à-dire d'une grille de simulation dans laquelle le logiciel va résoudre les équations de continuité et de Poisson à chaque « nœud » du maillage (voir Figure IV.1). Il est ensuite possible pour le logiciel de remonter aux propriétés électriques du composant et de répondre aux demandes de l'utilisateur.

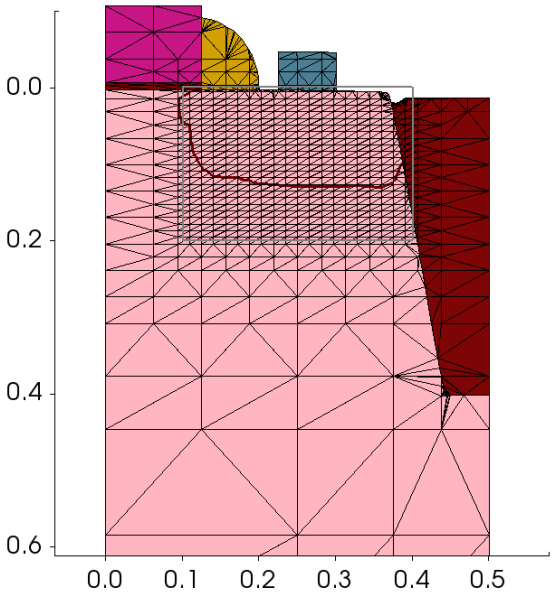


Figure IV.1 : Coupe d'un composant électronique modélisé dans le logiciel TCAD Synopsys Sentaurus [7]. Le maillage du composant est clairement visible. Les zones où les grandeurs physiques (comme le courant électrique ou le champ électrique par exemple) sont maillées de manière plus fine pour avoir une précision suffisante en tout point de l'espace.

Avant de débuter les simulations visant à valider notre outil analytique, il est nécessaire d'établir un modèle test dans lequel nous savons que les principes de base de la physique du semi-conducteur sont respectés. Le paragraphe suivant présente le modèle test, les choix de paramètres et les différentes validations effectuées.

Modélisation test d'une jonction PN

Dans le but d'étudier les effets de champ électrique sur la génération des porteurs de charge, le cœur d'un pixel, c'est-à-dire une jonction PN, est modélisé de manière simplifiée. En effet, nous n'avons besoin pour le moment que d'étudier et de quantifier l'amplification qu'apporte le champ électrique sur le taux de génération de charges des pièges. Notre modèle test consiste donc en la juxtaposition de deux barreaux de silicium dopés N et P respectivement. Les deux barreaux sont de tailles équivalentes, et le rapport de dopage peut être contrôlé en entrée de simulation : on peut choisir par exemple entre une jonction P+N (côté P beaucoup plus dopé que le côté N), une jonction N+P (côté N beaucoup plus dopé que le côté P) ou encore une jonction dite « symétrique », c'est-à-dire une jonction où les deux blocs de silicium ont la même concentration de dopage. L'ajout d'implants supplémentaires dans la géométrie viendrait influencer les propriétés électriques de la jonction. Les dimensions des barreaux sont également choisies suffisamment grandes de sorte que la limite de ZCE ne subisse pas d'effets de bords. La modélisation d'une jonction proche d'une jonction « idéale » théorique est donc suffisante pour un travail de validation.

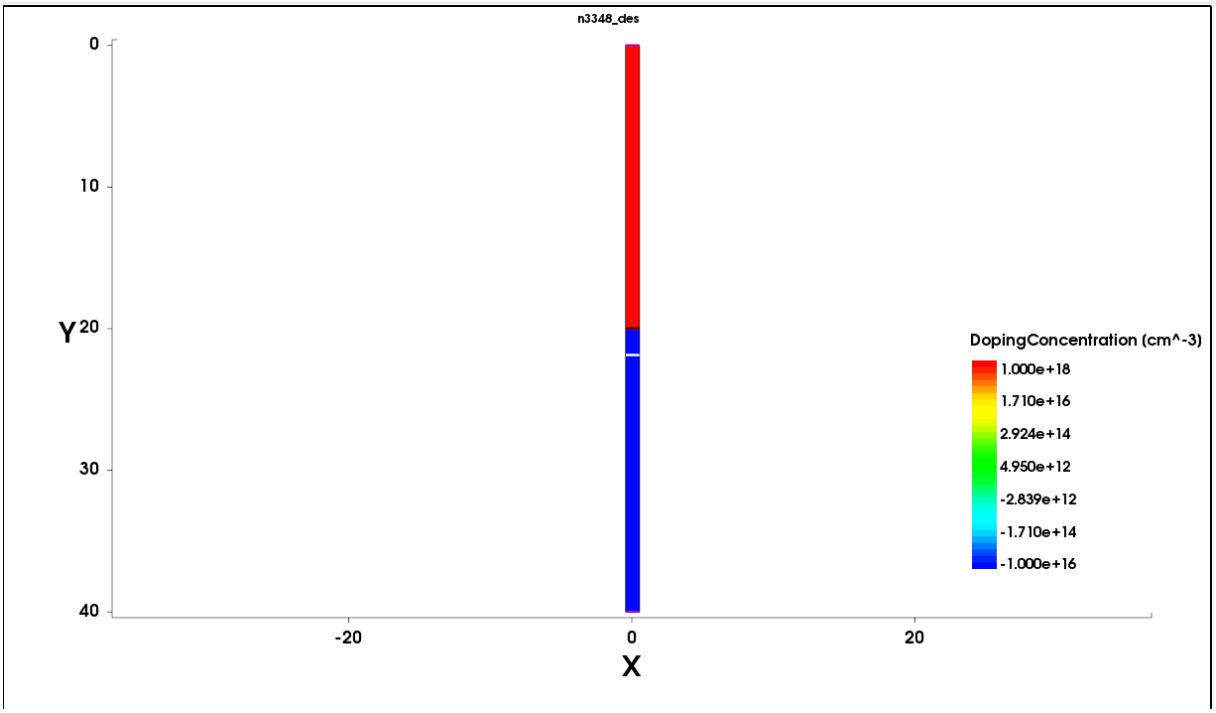


Figure IV.2 : Modèle test de jonction PN utilisée dans nos simulations TCAD. Dans cet exemple, le barreau supérieur est un barreau dopé N à l'arsenic d'une concentration $1e18\ cm^{-3}$*, le barreau inférieur est dopé P au bore d'une concentration* $1e16\ cm^{-3}$*.*

Nous utilisons le modèle présenté en Figure IV.2 pour valider les principes de base de la physique des semi-conducteurs, mais avec un dopage équivalent pour les barreaux supérieur et inférieur de $1 \times 10^{15}\ cm^{-3}$. Nous avons par exemple examiné les caractéristiques suivantes : diagramme de bande d'énergie (le niveau d'énergie de la bande de conduction et de valence ainsi que le niveau intrinsèque de Fermi en fonction de la position dans la jonction), profil de champ électrique (intensité du champ électrique en fonction de la position dans la jonction), densité nette de charge (charge nette par unité de volume en fonction de la position dans la jonction) ou encore le potentiel intrinsèque (différence de potentiel électrostatique dans la ZCE). Ce modèle de jonction PN a été testé

avec et sans polarisation. Dans tous les cas, notre modèle de test montre des caractéristiques proches des valeurs théoriques. Les détails de cette validation sont disponibles en Annexe D.

Enfin, nous avons également étudié la valeur du potentiel intrinsèque électrostatique V_{bi} (ou built-in voltage en anglais) qui règne dans la ZCE de deux jonctions différentes à l'équilibre, l'une dopée N+P et l'autre symétrique. Le potentiel intrinsèque électrostatique s'exprime [8] :

$$V_{bi} = \frac{k_B T}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \tag{IV.11}$$

Avec N_A le dopage côté P (cm^{-3}), N_D le dopage côté N (cm^{-3}) et n_i la densité de porteurs intrinsèque (cm^{-3}), qui est pour rappel la densité de porteurs libres si le semi-conducteur n'était pas dopé (cf chapitre II). Les résultats de la comparaison entre l'estimation de TCAD et la théorie sont répertoriés dans le Tableau IV.1 (l'erreur relative est exprimée par rapport à la valeur théorique) :

Conditions	*Théorie*	*TCAD*	*Erreur relative*
N+P ($1 \times 10^{18}\ cm^{-3}/1 \times 10^{16} cm^{-3}$)	$0{,}7661\ V$	$0{,}7327\ V$	4,4 %
Symétrique ($1 \times 10^{15}\ cm^{-3}/1 \times 10^{15}\ cm^{-3}$)	$0{,}5876 V$	$0{,}5720\ V$	2,1 %

Tableau IV.1 : Comparaison de la valeur du potentiel intrinsèque électrostatique du potentiel intrinsèque électrostatique V_{bi} entre le calcul théorique et le résultat de notre modèle de test de jonction PN, dans le cas d'une jonction symétrique et asymétrique (N+P).

Nous pouvons donc confirmer la validation du modèle de test de jonction PN. Son utilisation permet de tester les effets de champ électrique sur la génération de paires électron-trou et pouvoir ensuite comparer ces résultats avec ceux de notre modèle analytique.

Validation du modèle analytique d'effets de champ électrique 3D

Nous savons désormais que la jonction modélisée est conforme aux caractéristiques d'une jonction PN idéale, nous pouvons donc étudier les effets d'amplification du champ électrique sur le taux de génération de porteurs de charge. Nous considérons à la fois l'effet Poole-Frenkel et le modèle de *Hurkx* [9] dans nos simulations TCAD. Le modèle de *Hurkx* est un modèle équivalent au mécanisme PAT, mais tient compte également d'une émission par effet tunnel de bande à bande (band-to-band tunneling en anglais). Comme ce mécanisme n'apparaît que pour de très forts champs électriques que l'on rencontre rarement dans les imageurs (supérieurs à $7 \times 10^7\ V/m$), nous pouvons considérer l'effet tunnel bande à bande négligeable dans nos simulations TCAD.

Pour valider notre modèle analytique, nous fixons la nature du piège, son niveau d'énergie ainsi que ses sections efficaces de capture et d'émission d'électrons et de trous. Nous choisissons comme piège la bilacune dans son état de charge simple négatif, symbolisé $V_2^{-/0}$. La bilacune est l'association de deux lacunes qui ont diffusé dans le semi-conducteur et se sont associées avant qu'elles n'aient pu se recombiner avec des interstitiels (cf chapitre II). Nous avons choisi ce piège car il est très souvent rencontré dans les expériences de caractérisation de pièges, et celui-ci est souvent considéré comme un contributeur important du courant d'obscurité [10]. Son niveau d'énergie au sein de la bande interdite du semi-conducteur est estimé à $0{,}71\ eV$ au-dessus de la bande de valence

[10], [11]. Les paramètres de section efficace sont plus difficiles à déterminer expérimentalement et présentent une grande variation suivant les résultats des expériences (environ un facteur 100 sépare la plus faible estimation et la plus forte estimation des sections efficaces). Nous choisissons de fixer les sections efficaces pour les électrons et les trous à $5 \times 10^{-19}\, m^2$ car c'est le résultat le plus représentatif des recherches bibliographiques menées pendant la thèse.

Lors de notre étude des effets de champ électrique dans le logiciel TCAD, nous avons constaté une différence de comportement des pièges en fonction de la région de la jonction PN considérée; i.e. nous avons remarqué que les pièges ne généraient pas la même quantité de porteurs de charge en fonction du côté où ils se trouvent (côté le plus dopé ou le moins dopé), peu importe le type de dopage (N ou P). Cette différence est reportée sur la Figure IV.3.

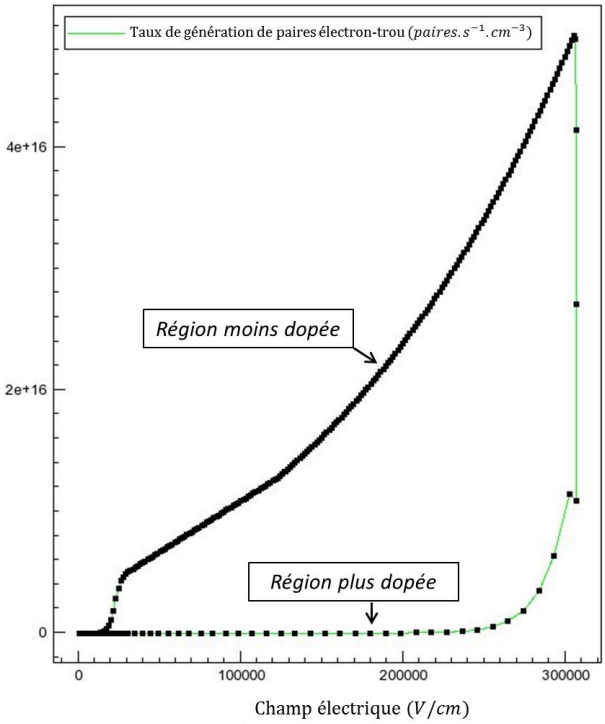


Figure IV.3 : Taux de génération volumique de paires électron-trou ($e^-/h^+.s^{-1}.cm^{-3}$) en fonction du champ électrique (V/cm). La jonction utilisée est une jonction N+P ($1 \times 10^{18}\, cm^{-3}/1 \times 10^{16}\, cm^{-3}$) polarisée à $-30\, V$ à $300\, K$. On observe deux tendances différentes pour l'évolution du taux de génération de paires électron-trou pour une même gamme de champ électrique. Pour connaître le taux de génération de paires électron-trou par piège, il faut normaliser ce taux par la concentration de pièges introduite dans nos simulations, ici de $1 \times 10^{15}\, cm^{-3}$.

La Figure IV.3 provient d'une coupe verticale de notre jonction PN, polarisée à $-30\, V$, à une température de $300\, K$. Seul l'effet Poole-Frenkel est considéré dans cette simulation. Cette coupe traverse donc les zones de fort et faible dopages. Nous distinguons deux régions différentes sur le graphe : la région dite moins dopée et l'autre plus dopée. On constate dans les deux cas que, pour un faible champ électrique, le taux de génération de paires électron-trou est quasiment nul. Lorsque le champ électrique augmente, le taux de génération de paires électron-trou augmente dans la zone moins dopée mais pas dans la zone la plus dopée. Ce plateau de quasi non-génération de porteurs de charge continue jusqu'à un champ électrique d'environ $2{,}5 \times 10^5\, V/cm$ dans la zone la plus dopée. A l'inverse, pour un même champ électrique, dans la zone la moins dopée, on atteint un taux de génération de paires électron-trou par piège d'environ $30\, e^-/h^+.s^{-1}$. Pour un très fort champ électrique, les deux tendances convergent vers la même valeur du taux de génération de paires électron-trou. Cette différence est expliquée par la présence de porteurs libres aux interfaces de la zone de charge d'espace. Une zone de charge d'espace

est dépourvue de porteurs libres, mais l'interface entre les régions neutres et la ZCE n'est pas abrupte. Dans le cas de la région la plus fortement dopée, le dopage apporte un grand nombre de charges supplémentaires sur une largeur non négligeable de ce côté de la ZCE. La présence de ces charges induit par conséquent une baisse du taux de génération de charges par les pièges.

Pour rappel, si les pièges génèrent des charges dans une zone de déplétion, c'est parce que le système tend toujours à revenir au nombre de charges présentes à l'équilibre : la génération de charges dans une zone dépourvue de porteurs libres permet de tendre vers cet équilibre (cf chapitre II). En revanche, si des pièges sont présents dans une zone où le nombre de charges est en excès, les pièges vont avoir tendance à supprimer les charges en nombre trop important. Ces pièges servent donc de centres de capture ou de recombinaison (voir chapitre II), phénomènes inverses aux mécanismes de génération. Le plateau de quasi non génération de charges témoigne de ce mécanisme : à l'interface entre zone neutre et zone déplétée, le champ électrique n'est pas assez intense pour séparer toutes les charges libres. En conséquence, les pièges servent de centres de recombinaison ou de capture et ne génèrent pas de charges puisque qu'il en existe déjà un nombre important. Ceci explique que près de cette frontière, le taux de génération est quasiment nul. En revanche, si l'on parcourt la jonction depuis l'interface entre les zones neutre et déplétée jusqu'au centre de la jonction, le champ électrique augmente et devient suffisamment intense pour séparer toutes les charges excédentaires. De cette manière, les pièges deviennent exclusivement des centres de génération et c'est pourquoi le taux de génération de paires électron-trou augmente avec le champ électrique.

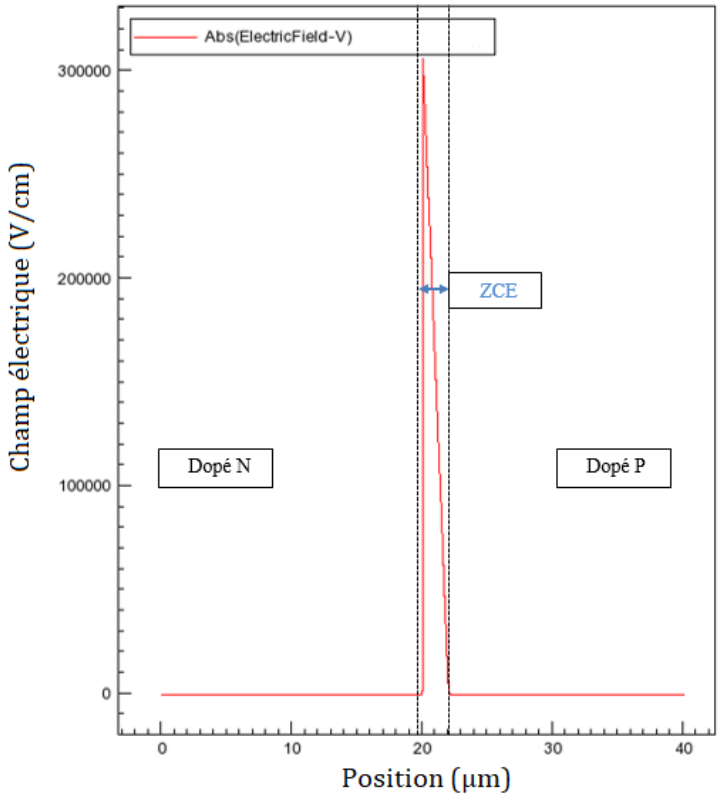


Figure IV.4 : Distribution spatiale de champ électrique dans la jonction PN. L'axe des ordonnées est l'intensité du champ électrique en V/cm, l'axe des abscisses est la profondeur de la jonction en microns. La jonction entre les deux blocs de silicium est située à 20 µm, le champ électrique maximal y est localisé.

Le même mécanisme opère à l'interface entre la région neutre la moins dopée et la ZCE, mais à une échelle moindre. Le nombre de porteurs libres apportés par le dopage étant moins important, les pièges peuvent générer plus facilement des paires électron-trou. Pour

un champ électrique équivalent, une même population de pièges ne va pas générer le même nombre de charges si la densité de porteurs libres est différente [8].

Le côté le plus dopé de la ZCE est donc « pollué » par la densité de porteurs libres, et pour cette raison nous n'utiliserons que le côté le moins dopé de la ZCE pour nos calculs. De plus, les jonctions PN simulées qui seront présentées dans la suite de ce manuscrit auront des rapports de dopage important (de l'ordre d'un facteur 100). Cela signifie que la ZCE s'étendra (dans le cas d'un rapport 100 par exemple) 100 fois plus du côté le moins dopé de la jonction que de l'autre côté. Par conséquent, en supposant une densité de pièges uniforme dans la jonction (ce qui est le cas dans nos simulations), le côté le moins dopé va générer 100 fois plus de charge que le côté plus dopé de la jonction. On peut ainsi négliger la contribution en apport de charges du côté le plus dopé de la jonction PN dans nos simulations. Dans la suite de ce manuscrit, seul le côté le moins dopé de la jonction sera considéré.

Dans une première étape de validation, nous ne considérons que le modèle Poole-Frenkel dans le logiciel TCAD et dans notre outil analytique. Nous fixons le niveau de piège à celui d'une bilacune simplement chargé négativement ($0{,}71\ eV$) pour des sections efficaces d'émission pour les électrons et les trous toutes les deux égales à $5 \times 10^{-19}\ m^2$. La jonction PN modélisée est une jonction de type N+P ($1 \times 10^{18}\ cm^{-3}/1 \times 10^{16}\ cm^{-3}$). La Figure IV.5 représente le taux de génération de paires électron-trou par piège en fonction du champ électrique, c'est-à-dire la quantité de paires électron-trou générées par seconde par un piège pour un champ électrique donné :

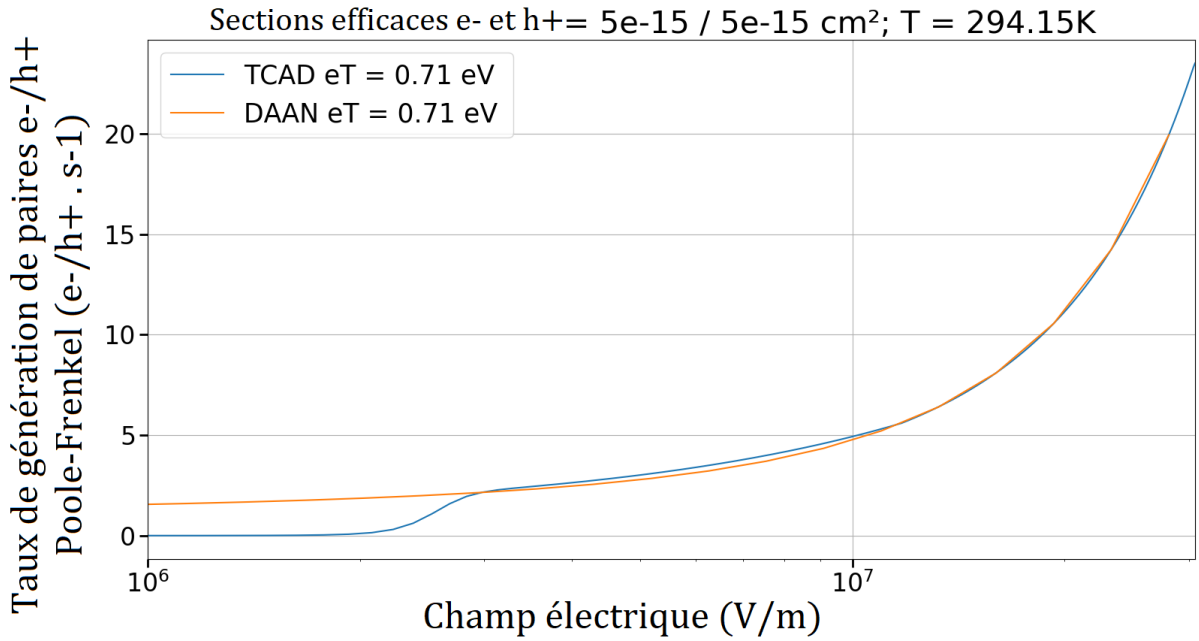


Figure IV.5 : Confrontation des courbes de taux de génération de paires électron-trou de la bilacune (0,71 eV) en fonction du champ électrique. La courbe orange est issue de notre outil numérique, la courbe bleue est issue du modèle TCAD. Seul l'effet Poole-Frenkel est considéré dans le logiciel TCAD et dans notre outil numérique. La jonction PN modélisée est une jonction de type N+P ($1 \times 10^{18}\ cm^{-3}/1 \times 10^{16}\ cm^{-3}$).

On constate d'après la Figure IV.5 que notre modèle analytique est cohérent avec le logiciel TCAD puisque pour une large gamme de champ électrique, le modèle analytique se superpose au modèle TCAD. Le modèle analytique montre une erreur d'environ 7 % pour des champs électriques compris entre $3 \times 10^6\ V/m$ et $1{,}5 \times 10^7\ V/m$, et de seulement

2 % au-delà de cette gamme de champ électrique. En revanche, en dessous de cette gamme de champ électrique, l'évolution du taux de génération donnée par le logiciel TCAD et notre modèle analytique ne coïncident plus. Cela provient de la densité de porteurs libres qui interfère avec le mécanisme de génération de porteurs de charges, comme expliqué lors de l'interprétation de la Figure IV.3. Notre modèle analytique ne tient pas compte de la densité de porteurs libres présents à la frontière avec la zone neutre dans le calcul du taux de génération, car nous nous plaçons dans le cadre d'une jonction PN idéale complètement dépeuplée, donc complètement dépourvue de porteurs libres. La soudaine évolution du taux de génération d'une valeur nulle à son taux idéal pour le modèle TCAD témoigne du passage d'une zone neutre à une zone qui devient progressivement dépeuplée jusqu'à déplétion complète. Notre outil numérique permet donc de modéliser l'évolution du taux de génération d'une jonction PN en déplétion complète lorsqu'un effet de champ électrique tel que Poole-Frenkel est pris en considération.

Nous ajoutons maintenant l'effet tunnel assisté par phonon aux effets de champ électrique considérés dans notre outil numérique. Pour rappel, dans le cas du logiciel TCAD, il n'existe pas de modèle simple équivalent au modèle PAT mais dans la gamme de champ électrique étudiée, le modèle de *Hurkx* est équivalent au modèle PAT. Nous gardons le même piège avec les mêmes paramètres pour les simulations et nous confrontons une nouvelle fois les deux modèles (Figure IV.6) :

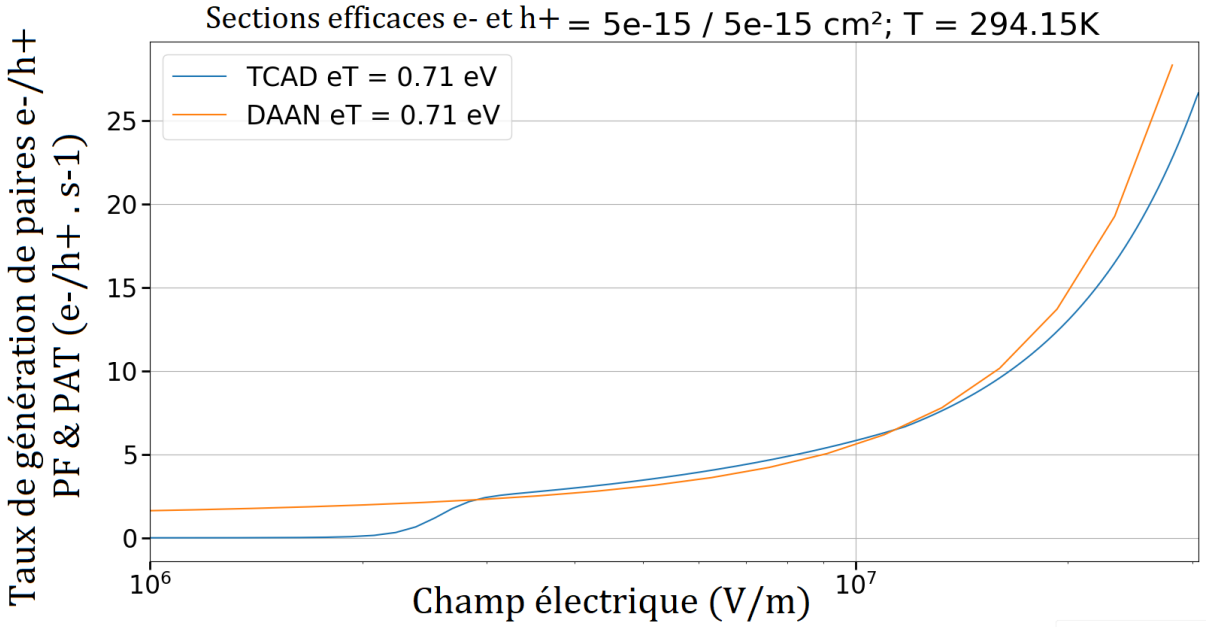


Figure IV.6 : Confrontation des courbes de taux de génération de paires électron-trou de la bilacune (0,71 eV) en fonction du champ électrique. La courbe orange est issue de notre outil numérique, la courbe bleue est issue du modèle TCAD. Dans notre outil numérique, les effets PF et PAT sont considérés ; dans le logiciel TCAD, les effets PF et Hurkx sont considérés.

Comme lors de la confrontation précédente, pour les faibles champs électriques, les deux modèles ne correspondent pas pour les raisons expliquées précédemment. Nous remarquons une différence notable avec la confrontation précédente des deux modèles : pour les champs électriques simulés les plus intenses, le modèle analytique ne coïncide plus avec le modèle TCAD. Cela vient simplement du fait que dans le logiciel TCAD, lorsque plusieurs effets de champ électrique sont considérés, leurs contributions sont simplement sommées de manière algébrique, alors que physiquement il existe un effet de synergie entre les différents mécanismes qu'il est possible de modéliser analytiquement. Comme

présenté dans la section IV.1, l'effet Poole-Frenkel va amplifier l'effet tunnel assisté par phonon, la somme simple des deux effets seront donc moindre que la combinaison des deux effets.

Nous considérons, malgré les écarts observés, qu'avec un logiciel dédié à ce type de calcul que notre modèle d'effet de champ électrique en trois dimensions est cohérent avec la modélisation 3D proposée par le logiciel TCAD. Notre modèle test de jonction PN et notre modélisation des ECE en trois dimensions étant validés, il est possible de procéder à des études paramétriques pour analyser l'apport de notre modèle 3D par rapport au modèle 1D précédemment utilisé dans *DAAN*.

IV.2 Comparaison du modèle 3D avec le modèle 1D par études paramétriques

Il s'agit ici d'étudier la variation du facteur d'effets de champ électrique λ_g en fonction des paramètres de pièges et de la température, c'est-à-dire en fonction des sections efficaces de capture d'électrons et de trous $\sigma_{n,p}$, du niveau d'énergie du piège dans la bande interdite du silicium E_t et de la température T. Ces études sont réalisées à la fois en utilisant le modèle d'effets de champ électrique 1D précédemment utilisé dans *DAAN* et le modèle 3D proposé dans ce manuscrit. Cette comparaison permet d'évaluer la contribution du passage d'un modèle 1D à 3D. Par conséquent, il sera possible d'anticiper l'impact du modèle 3D dans les simulations de la DCNU fournies par *DAAN*.

Avant de commencer, nous rappelons que nous étudions ici la variation paramétrique du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g et non de la variation de λ_n ou λ_p, les facteurs d'amplification des taux d'émission d'électrons et de trous respectivement. Cette distinction est importante car certains auteurs ont parfois proposé des études paramétriques de λ_g, λ_n ou λ_p sans indiquer explicitement la différence entre ces différents coefficients. Pourtant, ils ne représentent pas les mêmes échanges, et ne sont pas toujours du même ordre de grandeur. En effet, les coefficients λ_n et λ_p correspondent aux facteurs d'amplification des taux d'émission d'électrons et de trous, qui représentent de manière théorique l'augmentation d'émission d'électrons vers la bande de conduction (λ_n) et l'augmentation des échanges de trous vers la bande de valence (λ_p). Cependant, ces coefficients ne tiennent pas compte des sections efficaces de capture d'électrons et de trous, qui ne sont autres que des probabilités d'échange entre les bandes énergétiques et les porteurs de charge associés. Cela signifie que ces coefficients n'incluent pas le fait que l'émission de trous et d'électrons au cours du processus de génération de paires électron-trou sont pondérées par les sections efficaces de captures des électrons et des trous des pièges. Pour rappel, la génération d'une paire électron-trou repose sur l'émission d'un trou dans la bande de valence et de l'émission d'un électron vers la bande de conduction. Les sections efficaces de capture quant à elle représentent la probabilité que ces émissions se produisent. Par exemple si la section efficace de capture d'électrons est faible par rapport à la section efficace de capture de trous, l'émission d'électrons deviendra une réaction limitante pour la génération de paires électron-trou par le piège. On pourrait comparer cela à une réaction chimique dont la cinétique est ralentie en raison d'un réactif limitant. Le facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g est un coefficient plus représentatif de l'augmentation des courants de génération car il inclue les sections efficaces de capture d'électrons et de trous. Par ce biais, on peut accéder aux charges réellement générées par

un défaut cristallin. On comprend donc que ce manque de précision sur les notions de λ_n, λ_p et λ_g peut prêter à confusion et mener à des interprétations inadéquates.

IV.2.1 Etudes paramétriques sur le niveau d'énergie des pièges

Dans un premier temps, l'influence de la valeur du niveau d'énergie de piège sur l'amplitude du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g est étudiée. Pour cela, une gamme de niveaux d'énergie couvrant l'ensemble de la bande interdite du silicium est considérée. Les sections efficaces de capture d'électrons et de trous sont fixées à $5 \times 10^{-19}\ m^2$ pour reprendre les valeurs utilisées dans le paragraphe précédent. La température est également fixée à $294{,}15\ K$. Systématiquement, le modèle 1D précédemment utilisé dans *DAAN* (décrit dans le chapitre III de ce manuscrit) est comparé avec le modèle original 3D détaillé au début de ce chapitre. Dans le but de proposer une étude complète, le cas de pièges accepteurs et donneurs seront analysés séparément. La première étude a consisté à évaluer λ_g pour les niveaux d'énergie $[0{,}10\ eV; 0{,}30\ eV; 0{,}50\ eV; 0{,}70\ eV; 0{,}90\ eV]$ dans le cas de pièges accepteurs sur une large gamme de champs électriques.

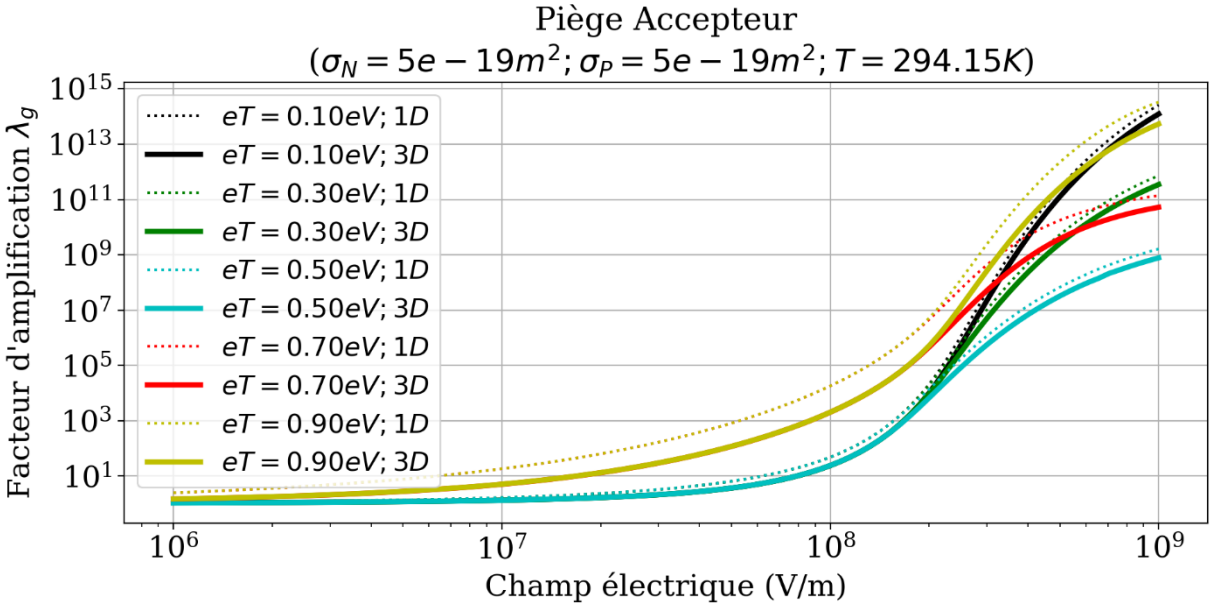


Figure IV.7 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de niveau d'énergie de piège dans le cas d'un défaut accepteur. Les sections efficaces de capture d'électrons et de trous sont fixées à $5 \times 10^{-19}\ m^2$ et la température à $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé.

D'après la Figure IV.7, on observe deux régimes distincts dans le phénomène d'amplification du taux de génération par effets de champ électrique. Le premier régime est celui où le piège est accepteur et possède une énergie inférieure à la moitié du gap ($E_t < 0{,}56\ eV$) et le second est le cas d'un piège accepteur possédant une énergie supérieure à la moitié du gap ($E_t > 0{,}56\ eV$). Pour des valeurs de champ électrique inférieures à $2 \times 10^8\ V/m$ et pour les paramètres de piège et de température considérés, l'amplitude de λ_g pour un piège situé au-dessus du milieu du gap est toujours supérieure par rapport à un piège situé en-dessous du milieu du gap. Pour chaque régime, peu de différences sont observées d'un piège à l'autre jusqu'à cette valeur de champ électrique. Au-delà de cette valeur, l'évolution de λ_g dépend du niveau d'énergie du piège. On remarque que le passage du modèle 1D au modèle 3D contribue à la diminution du facteur λ_g pour n'importe quelles valeurs de champ électrique et de niveaux d'énergie. Cependant, on remarque que la réduction de λ_g n'est pas uniforme sur toute

la gamme de champ électrique. En d'autres termes, le passage du modèle 1D à 3D ne s'effectue pas de manière linéaire.

Il faut rappeler cependant que pour d'autres valeurs de sections efficaces de capture d'électrons et de trous, la variation de λ_g peut différer. Par conséquent les deux régimes observés en fonction du niveau d'énergie, qui sont ici bien distincts, peuvent devenir quasiment égaux. Pour ce cas d'étude, l'écart entre les deux régimes varie d'un facteur 2 pour des faibles champs électriques, environ 300 autour de $10^8\ V/m$. En ce qui concerne les écarts entre 1D et 3D, l'amplitude de λ_g prédite par le modèle 3D est 1,2 à 6 fois moins élevée que pour le cas 1D pour des champs électriques typiquement rencontrés dans des imageurs CMOS modernes (entre $10^5\ V/m$ et $3 \times 10^7\ V/m$), voire au-delà de 8 pour des forts champs électriques (autour de $10^8\ V/m$).

La même étude est ensuite reproduite dans le cas de pièges donneurs et reportée sur la Figure IV.8.

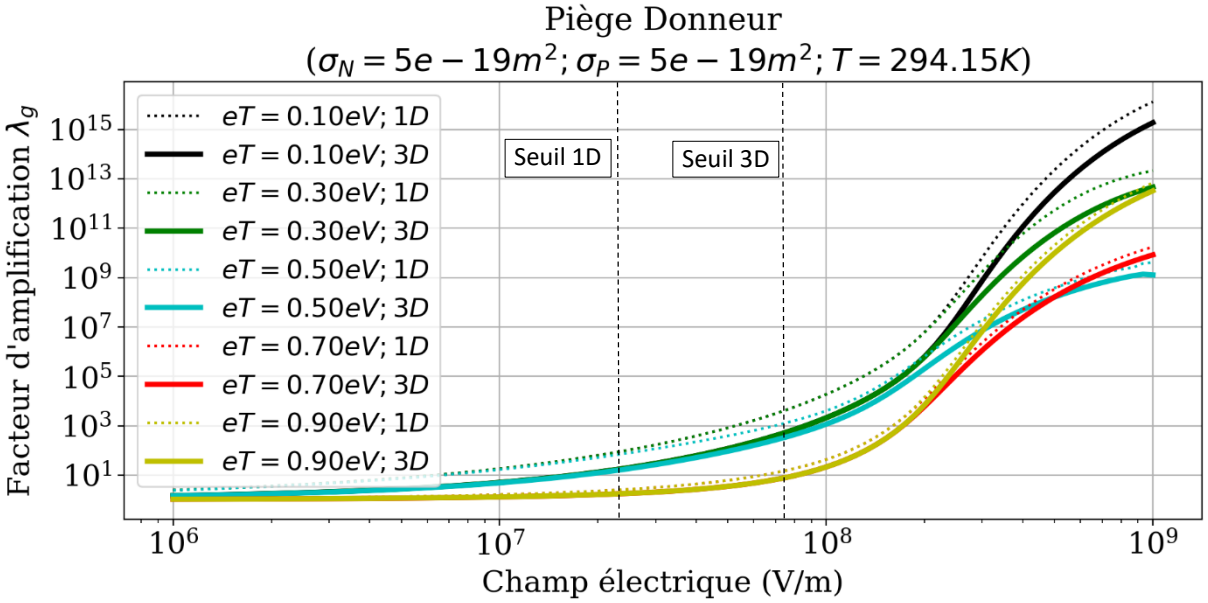


Figure IV.8 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de niveau d'énergie de piège dans le cas d'un défaut donneur. Les sections efficaces de capture d'électrons et de trous sont fixées à $5 \times 10^{-19}\ m^2$ et la température à $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé.

Les deux régimes distincts sont également observés dans le cas de pièges donneurs, à l'exception que les tendances sont inversées : dans ce cas les valeurs de λ_g pour des pièges situés en-dessous du milieu du gap ($E_t < 0{,}56\ eV$) sont supérieures aux pièges situés au-dessus du milieu du gap ($E_t > 0{,}56\ eV$). Les écarts entre les différents régimes et les modèles 1D et 3D sont très semblables à ce qui a été observé dans le cas de pièges accepteurs.

On notera que dans tous les cas, plus le niveau d'énergie du piège est proche du milieu du gap, moins le facteur λ_g est élevé. Cela vient du fait que l'effet Poole-Frenkel a moins d'influence sur la génération de charges à cause de la distance entre le niveau de piège et le sommet de la barrière de potentiel. Par extension, le mécanisme d'effet tunnel assisté par phonon est moins impacté par l'effet Poole-Frenkel. Il ne faut pas oublier cependant que le taux de génération de paires électron-trou augmente à mesure que le niveau d'énergie se rapproche du milieu du gap selon la théorie de Shockley-Read-Hall (cf chapitre II). De cette manière, même si un piège situé loin du milieu du gap présente un λ_g plus grand comparé à un piège localisé près du milieu de la bande interdite, ce dernier générera toujours plus de paires électron-trou que son concurrent pour des valeurs de champ électriques équivalentes. Ceci

s'explique par la dépendance exponentielle du taux de génération en fonction du niveau d'énergie du piège.

De manière analogue à ce qui a été observé dans le cas où l'on considère un modèle 1D, si un niveau donneur et un niveau accepteur sont tous deux situés à une distance égale du milieu de la bande interdite (par exemple, un piège accepteur $+0{,}3\ eV$ et piège donneur à $-0{,}3\ eV$), alors ces défauts présenteront pratiquement le même facteur d'amplification pour n'importe quel champ électrique à une température donnée, si et seulement si leurs sections efficaces de capture sont égales. Cet effet « miroir » est causé par l'abaissement de la barrière Poole-Frenkel qui sera identique dans les deux cas [12].

En revanche, ce raisonnement ne s'applique pas à deux défauts du même type (donneur ou accepteur) localisés à égale distance du milieu de la bande interdite du semi-conducteur. Par exemple, un défaut donneur placé à $+0{,}3\ eV$ et un autre défaut donneur situé à $-0{,}3\ eV$ du milieu de la bande interdite ne présenteront pas le même λ_g, et il en va de même pour le cas d'un piège accepteur. Ceci s'explique aisément en interprétant les équations (IV.8) et (IV.9) : dans le cas d'un piège donneur, l'effet Poole-Frenkel ne s'applique qu'à l'émission d'électrons. Si le niveau d'énergie varie pour un même type de défaut, l'effet d'amplification du champ électrique sera forcément différent. Le raisonnement est identique pour un piège de type accepteur [12].

La dernière information que l'on peut extraire de cette étude est la légère baisse de sensibilité du facteur λ_g par rapport au niveau d'énergie lors du passage au modèle 3D. En d'autres termes, la différence de λ_g entre deux niveaux d'énergie pour le même champ électrique est observable à une intensité de champ électrique plus élevée par rapport au modèle d'effets de champ électrique 1D décrit dans le chapitre III. Il est ainsi possible de définir un seuil de sensibilité paramétrique, qui correspond à la valeur de champ électrique pour laquelle nous pouvons distinguer deux courbes différentes. Prenons le cas des courbes 1D et 3D correspondant aux niveaux d'énergie $0{,}30\ eV$ et $0{,}50\ eV$ sur la Figure IV.8. Fixons le seuil de sensibilité à la valeur du champ électrique où l'écart relatif entre les courbes à $0{,}30\ eV$ et $0{,}50\ eV$ est supérieur à approximativement 20 %. Dans le cas du modèle 1D, ce seuil est atteint pour une valeur d'environ $2{,}4 \times 10^7\ V/m$ alors que pour le modèle 3D, ce seuil est atteint pour un champ électrique environ égal à $7{,}5 \times 10^7\ V/m$. Ces seuils sont reportés sur la Figure IV.8. Pour ce jeu de paramètres, le modèle 3D implique qu'il faut donc un champ électrique 3 fois plus élevé pour distinguer les courbes correspondant à $0{,}30\ eV$ et $0{,}50\ eV$. Le seuil de sensibilité paramétrique a donc tendance à augmenter lors de l'utilisation du modèle 3D par rapport au modèle 1D. Il ne faut pas oublier cependant que la position de ces seuils varie selon les paramètres de pièges choisis.

En conséquence, il est possible d'anticiper le fait que le choix du niveau d'énergie dans la simulation du courant d'obscurité sera surtout visible si des interactions nucléaires se produisent dans des zones de forts champs électriques ou si le spectre en niveau d'énergie est grand (de l'ordre de la moitié du gap).

IV.2.2 Etudes paramétriques sur les sections efficaces de capture des défauts

La méthode pour réaliser cette étude est identique à celle utilisée dans le paragraphe précédent. Un niveau d'énergie est fixé, la température est quant à elle toujours fixée à température ambiante ($294{,}15\ K$). Les valeurs des sections efficaces de capture d'électrons σ_n et de trous σ_p sont quant à elles étudiées sur une gamme de plusieurs ordres de grandeur, représentative des incertitudes rencontrées sur la mesure de la section efficace dans la littérature (cf chapitre II). Nous allons étudier deux cas de figure possibles : le cas où un taux d'émission est du même ordre de grandeur que l'autre

($\lambda_n e_n \approx \lambda_p e_p$) et le cas un taux d'émission domine l'autre ($\lambda_n e_n \gg \lambda_p e_p$ ou $\lambda_p e_p \gg \lambda_n e_n$). Ces différents cas déterminent la sensibilité de λ_g à la variation de σ_n et de σ_p.

Dans un premier temps, nous considérons le cas d'un piège accepteur situé à $+0{,}71\ eV$ au-dessus de la bande de valence, où la section efficace de capture de trous est fixée à une valeur de $1 \times 10^{-17}\ m^2$. Comme dans l'étude précédente, le facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou est évalué selon les modèles d'effets de champ électrique 1D et 3D (Figure IV.9).

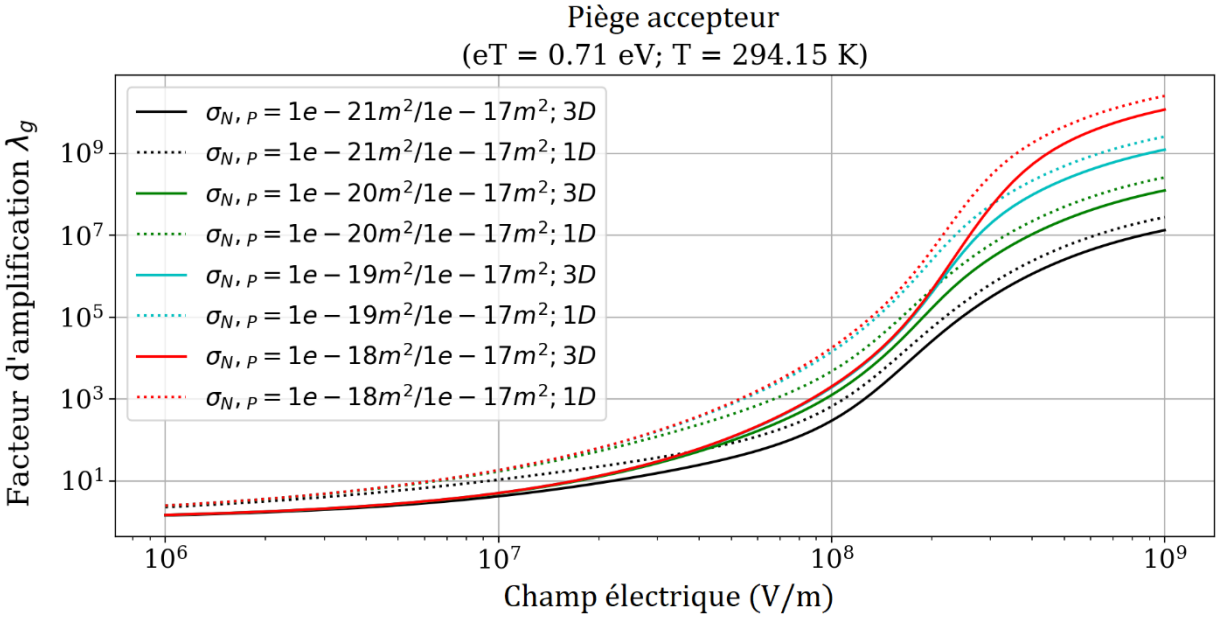


Figure IV.9 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de sections efficaces de capture d'électrons dans le cas d'un défaut accepteur. La section efficace de capture de trous est fixée à $1 \times 10^{-17}\ m^2$, le niveau d'énergie du piège à $+0{,}71\ eV$ et la température à $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé.

A l'image de l'étude paramétrique sur les niveaux d'énergie, on constate que l'évolution de λ_g est différente en fonction du couple $[\sigma_n; \sigma_p]$. Dans le cas présent, la section efficace de capture de trous σ_p est au moins 10 fois plus élevée que la section efficace de capture d'électrons σ_n. Par conséquent, pour le niveau de piège considéré, nous sommes dans la situation où $\lambda_n e_n \approx \lambda_p e_p$. Cette situation est rendue possible grâce à la valeur élevée de la section efficace de capture de trous et à l'effet Poole-Frenkel qui s'applique à l'émission de trous. En reprenant l'expression du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou décrite dans le chapitre III $\left(\lambda_g = \frac{\lambda_n \lambda_p (e_n + e_p)}{\lambda_n e_n + \lambda_p e_p}\right)$, il est possible d'anticiper ce comportement. Le coefficient λ_g est une combinaison des termes e_n et e_p. La croissance de la section efficace de capture d'électrons σ_n entraîne une augmentation du taux d'émission d'électrons e_n et donc par extension une augmentation du facteur λ_g. On observe un comportement similaire lorsque le problème est inversé, comme par exemple lorsque l'on considère un piège donneur situé à $0{,}35\ eV$ de la bande de valence, avec la section efficace de capture d'électrons fixée à $1 \times 10^{-15}\ m^2$ (Figure IV.10). La section efficace de capture d'électrons a volontairement été fixée à cette valeur pour pouvoir être dans le cas où $\lambda_n e_n \approx \lambda_p e_p$ pour ce niveau d'énergie de piège.

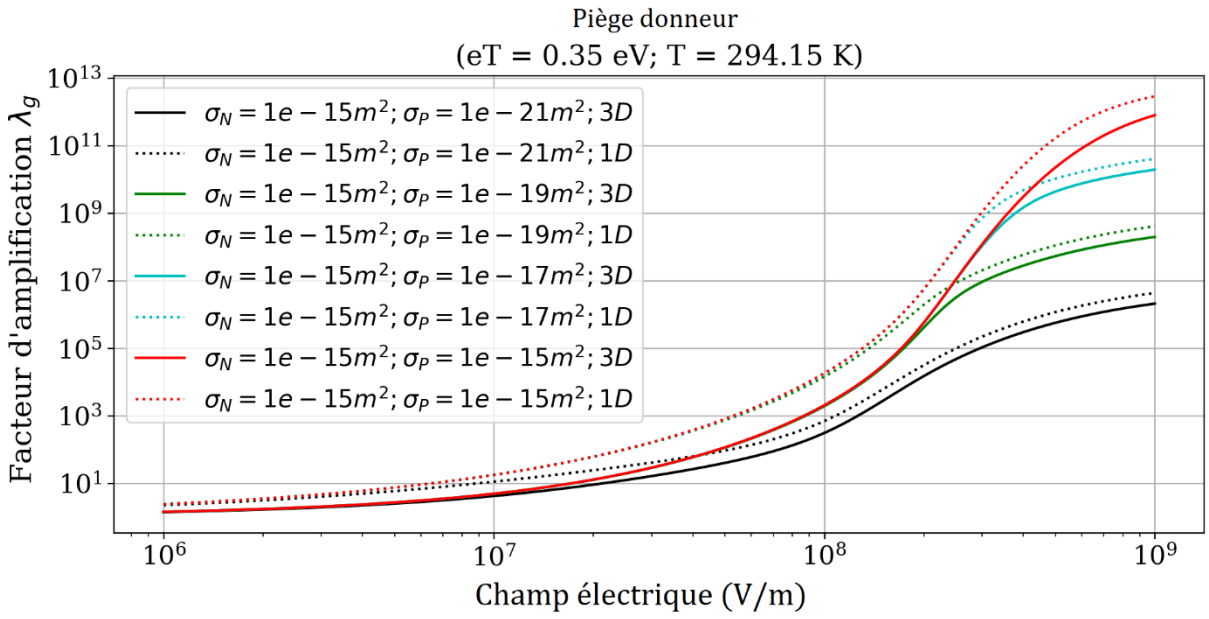


Figure IV.10 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de sections efficaces de capture de trous dans le cas d'un défaut donneur. La section efficace de capture d'électrons est fixée à $1 \times 10^{-15}\ m^2$, le niveau d'énergie du piège à $+0{,}35\ eV$ et la température à $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé.

Tout comme pour l'étude sur les niveaux d'énergie de piège, une diminution du facteur d'amplification λ_g est observée lors du passage du modèle d'effets de champ électrique 1D à 3D. En fonction du couple $[\sigma_n; \sigma_p]$ considéré, cette diminution varie d'un facteur 1,2 à 8 pour des champs électriques raisonnables (inférieurs à $10^8\ V/m$), que ce soit pour un piège accepteur ou donneur. Cette diminution peut évidemment être différente en fonction du type de piège, de son niveau d'énergie ainsi que de ses sections efficaces de capture d'électrons et de trous.

A présent, nous considérons le cas où l'un des taux d'émission domine l'autre ($\lambda_n e_n \gg \lambda_p e_p$ ou $\lambda_p e_p \gg \lambda_n e_n$). Pour réaliser l'étude, nous nous plaçons dans le cas d'un piège accepteur situé à $+0{,}71\ eV$ de la bande de valence où la section efficace de capture d'électrons est fixée à $\sigma_n = 1 \times 10^{-17}\ m^2$ et on joue sur la valeur de σ_p.

Nous constatons que l'évolution du coefficient λ_g est beaucoup moins sensible à la variation de la section efficace de capture de trous. Cette sensibilité plus faible s'explique par le fait que dans le cas où $\lambda_n e_n \gg \lambda_p e_p$, le facteur d'amplification λ_g tend vers λ_p, c'est-à-dire vers une constante indépendante de σ_p. En suivant le même principe, si $\lambda_n e_n \ll \lambda_p e_p$, le coefficient λ_g va tendre vers λ_n. L'écart entre le modèle 1D et 3D est d'environ 1,2 à 8 suivant la valeur du champ électrique considérée, ce qui correspond à l'écart typiquement observé dans les études précédentes.

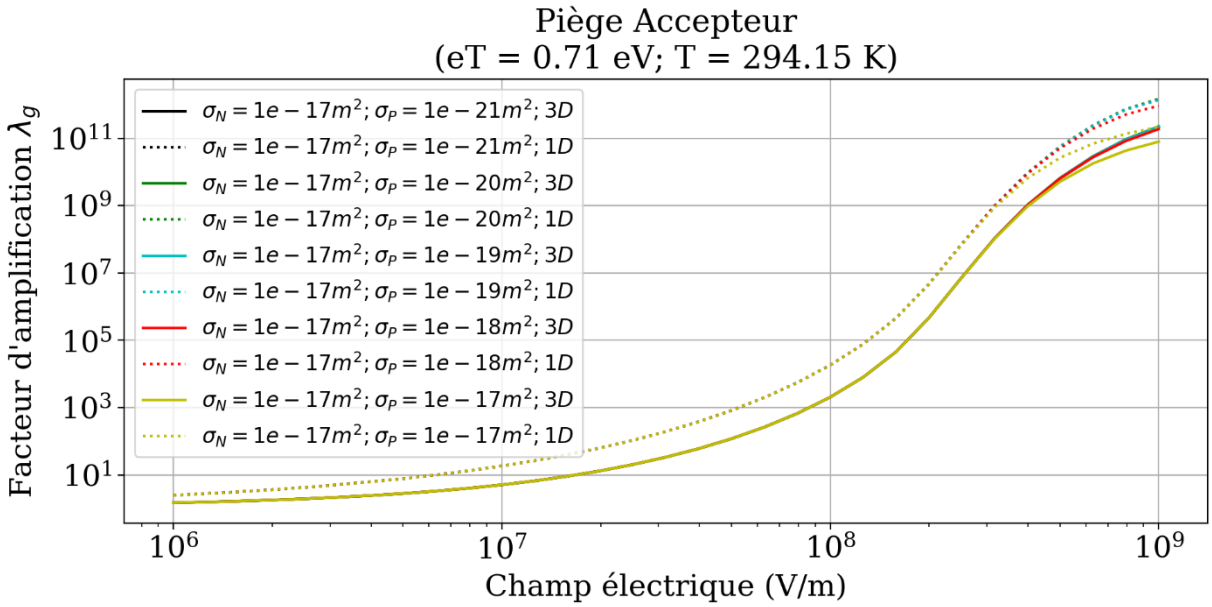


Figure IV.11 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de sections efficaces de capture de trous dans le cas d'un défaut accepteur. La section efficace de capture d'électrons est fixée à $1 \times 10^{-17}\ m^2$, le niveau d'énergie du piège à $+0{,}70\ eV$ et la température à $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé. Cette étude correspond à la situation inverse de la Figure IV.9.

IV.2.3 Influence de la température

Dans cette dernière étude paramétrique, nous testons l'influence de la variation de la température T sur l'évaluation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g en fonction du champ électrique. Pour réaliser cette étude, nous avons choisi arbitrairement un niveau d'énergie situé à $+0{,}71\ eV$ au-dessus de la bande de valence, avec des sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées arbitrairement à $10^{-19}\ m^2$. La température varie sur la gamme $[260\ K\ ;340\ K]$. Comme pour les études paramétriques précédentes, le modèle original d'ECE 3D est comparé avec celui en 1D précédemment utilisé dans *DAAN (*Figure IV.12*)*. Une nouvelle fois, la transition du modèle 1D vers le 3D contribue à diminuer l'amplitude de λ_g pour n'importe quelle valeur de champ électrique. De manière similaire aux études paramétriques précédentes, une diminution non constante du facteur λ_g est observée sur la gamme de champ électrique étudiée. Concernant la variation de λ_g en fonction de la température, pour un écart de $20\ K$, le modèle 3D estime un rapport excédant rarement 2, sauf pour les très fortes valeurs de champ électrique ($> 10^8\ V/m$). La transition du modèle 1D au 3D réduit environ d'un facteur 1,2 à 8, gamme déjà observée dans les études réalisées précédemment dans ce manuscrit.

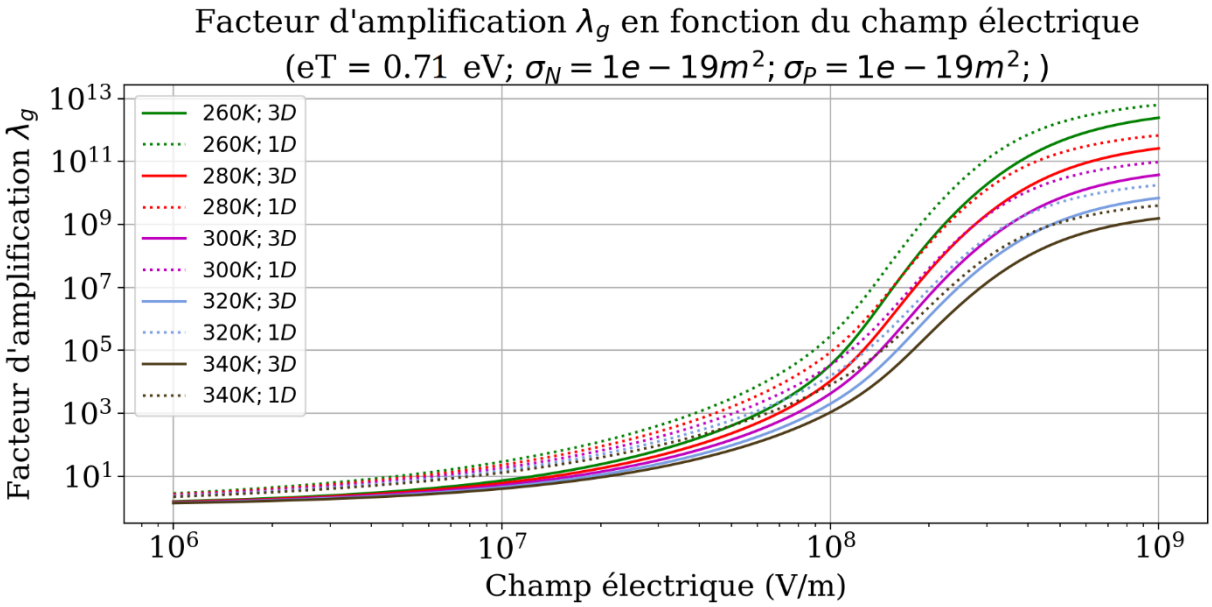


Figure IV.12 : Variation du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de température dans le cas d'un défaut accepteur. Les sections efficaces de capture d'électrons et de trous sont fixées à $1 \times 10^{-19}\ m^2$, le niveau d'énergie du piège à $+0{,}70\ eV$. Le modèle 3D est représenté en trait continu et le modèle 1D en trait pointillé.

En conclusions de cette série d'études paramétriques, nous constatons que la contribution principale du passage d'un modèle d'ECE 1D à 3D est la baisse d'amplitude maximale du facteur d'amplification λ_g d'un coefficient compris entre 1,2 et 6 pour des champs électriques compris entre $10^5\ V/m$ et $3 \times 10^7\ V/m$ (gamme typiquement rencontrée dans un imageur CMOS moderne). Pour des champs électriques supérieurs, la réduction de λ_g peut atteindre un facteur 8 voire plus. Puisque l'amplitude maximale de λ_g est réduite, la gamme de valeurs possibles de λ_g est réduite. Cette baisse entraîne une légère diminution de la sensibilité du coefficient λ_g à la variation des paramètres de pièges E_t, σ_n, σ_p ainsi qu'à la température T.

IV.2.4 Comparaison avec l'état de l'art précédent

Dans la littérature, l'état de l'art le plus avancé était le formalisme proposé par *Bogaerts et al.* [5]. Ces auteurs ont proposé un modèle pour calculer le facteur d'amplification du taux d'émission d'électrons λ_n et de trous λ_p, mélangeant l'effet Poole-Frenkel en 3D et l'effet Tunnel Assisté par Phonons en 1D. Ce modèle « hybride » ne tient pas compte de la direction d'émission du porteur de charge dans le calcul de l'effet Tunnel Assisté par Phonons, contrairement au modèle proposé ici. Afin d'évaluer l'apport de notre modèle par rapport à l'état de l'art de la littérature, les équations proposées par *Bogaerts et al.* ont été reprises pour calculer le facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g. Le modèle 1D utilisé précédemment dans *DAAN*, le modèle hybride développé par *Bogaerts et al.* et le modèle original 3D proposé dans ce manuscrit ont été comparés simultanément (voir Figure IV.13). Pour cette étude, le niveau de piège est fixé à $+0{,}71\ eV$, avec des sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées respectivement à $10^{-21}\ m^2$ et $10^{-17}\ m^2$, pour une température de $294{,}15\ K$.

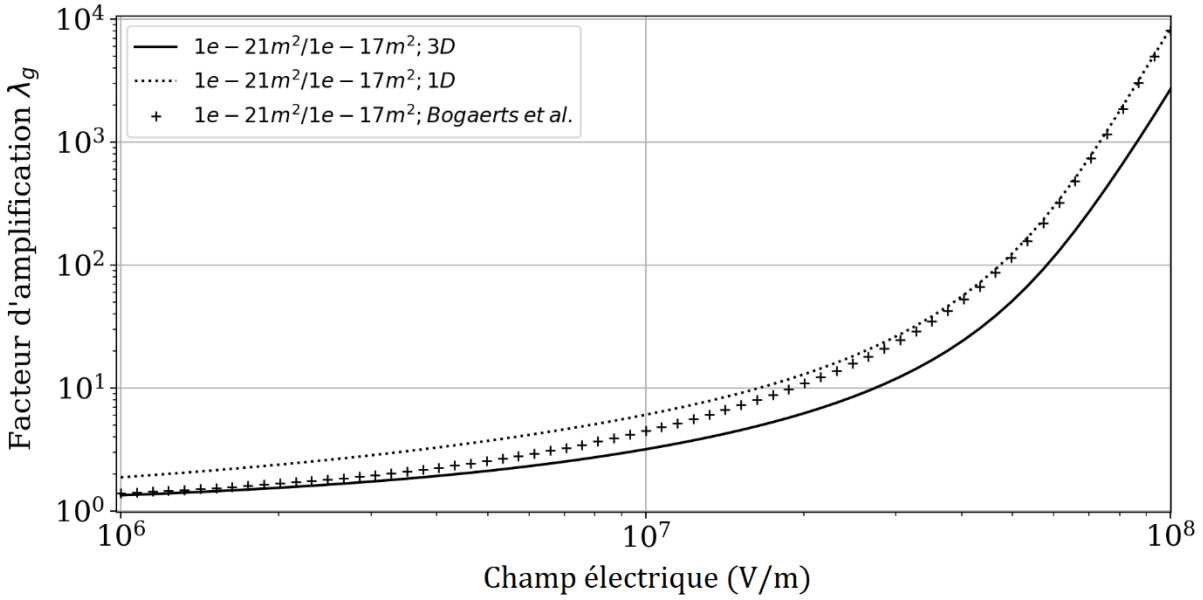


Figure IV.13 : Evolution du facteur d'amplification λ_g en fonction du champ électrique. Le niveau de piège est fixé à $+0{,}71\ eV$, avec des sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées respectivement à $10^{-21}\ m^2$ et $10^{-17}\ m^2$, pour une température de $294{,}15\ K$. Le modèle 3D est représenté en trait continu, le modèle 1D en trait pointillé et le modèle « hybride » inspiré des équations proposées Bogaerts et al. [5] avec les croix noires. Le modèle hybride est une transition entre les modèles 1D et 3D.

D'après l'analyse des courbes de la Figure IV.13, nous constatons que le modèle hybride est une transition entre le modèle complètement 1D et le modèle entièrement 3D. En effet, pour les faibles champs électriques ($< 10^6\ V/m$), c'est l'effet Poole-Frenkel qui domine. Ce mécanisme étant écrit en 3D dans le modèle hybride, ce dernier tend vers notre modèle entièrement 3D. En revanche, plus le champ électrique augmente, plus l'effet PAT devient prépondérant, jusqu'à devenir dominant. Cet effet étant écrit en 1D dans le modèle hybride, la courbe associée tend vers le modèle entièrement 1D. Cette étude est également un point de validation supplémentaire pour ce modèle original d'ECE 3D.

IV.3 Intégration du modèle 3D dans l'outil de prédiction du courant d'obscurité

Pour incorporer le modèle 3D dans *DAAN*, le code a dû subir quelques modifications. Il a fallu notamment procéder à une intégrale numérique selon l'angle d'émission du porteur de charge θ dans le calcul de l'effet tunnel assisté par phonons. Cela implique qu'à chaque direction d'émission θ, il faut calculer l'abaissement de la barrière de potentiel associé $\Delta E_i(\theta)$, puis calculer l'intégrale associée à l'effet tunnel assisté par phonon. Cette étape supplémentaire est très coûteuse en temps de calcul, surtout si l'on souhaite obtenir une précision suffisante sur le calcul de l'intégrale. Auparavant, la méthode dite « des rectangles » était utilisée pour résoudre numériquement l'intégrale. Dans le but d'accélérer la résolution de l'intégrale, j'ai réécrit la résolution numérique selon la méthode de Simpson [13], afin de diminuer le coût tout en gardant une précision correcte sur le calcul. Contrairement à la méthode des rectangles, qui décomposent l'intégrale comme la somme des aires des rectangles qui approximent la courbe, la méthode de Simpson consiste à décomposer la courbe selon des lois polynomiales. Cette première optimisation a permis dans un premier temps de gagner en temps de calcul.

Cependant, cette amélioration de la méthode de résolution de l'intégrale n'étant pas suffisante pour compenser la charge de calcul supplémentaire apportée par le calcul en trois

dimensions. Face à ce problème, une réorganisation du code fut nécessaire pour optimiser le temps de calcul. Cette réécriture a consisté à diminuer le nombre d'appels dans *DAAN* de la fonction dédiée au calcul du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g. Initialement, cette fonction était appelée à chaque interaction nucléaire se produisant dans un pixel. Les différentes boucles permettant de résoudre numériquement les intégrales étaient donc parcourues entièrement pour calculer λ_g. Cette section du code a été identifiée comme étant un goulot d'étranglement pour le temps de calcul. C'est pourquoi cette partie a été entièrement revue. A la place, un tableau multidimensionnel contenant le coefficient λ_g pour chaque piège et pour chaque champ électrique est construit une unique fois dès le début de la simulation. En pratique, lors d'une interaction nucléaire, une profondeur d'interaction est tirée aléatoirement, puis un champ électrique est déterminé par interpolation dans la distribution de champ électrique, comme dans la version initiale du code. En revanche dans la nouvelle version, un piège est choisi aléatoirement dans la base de données construite avant la simulation et le facteur d'amplification associé λ_g est déterminé par interpolation dans ce tableau contenant tous les coefficients λ_g. La charge de calcul est donc limitée et le temps de calcul diminué. Grâce à cette optimisation, le gain de temps est estimé à un facteur 5 (une simulation qui durait un peu plus de cinq jours ne dure plus qu'une journée par exemple).

IV.4 Comparaison avec des données expérimentales

L'outil de prédiction du courant d'obscurité incluant désormais le modèle d'effets de champ électrique en 3D, il est maintenant possible d'évaluer l'impact d'un tel modèle sur l'estimation du courant d'obscurité. Pour commencer, nous avons choisi de considérer comme défaut de test la bilacune chargée négativement une fois $V_2^{-/0}$, située à $+0{,}71\ eV$ au-dessus de la bande de valence, avec les sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées à $5 \times 10^{-19}\ m^2$. Pour rappel, ce choix est justifié par le fait que ce défaut est couramment rencontré expérimentalement après irradiation, et ses paramètres ont été choisis pour être représentatifs de ce qui a été proposé dans la littérature. D'autres défauts, présentés dans le Tableau II.2 du chapitre II, seront également étudiés individuellement. Le cas d'une population mixte (ou hétérogène) de défauts sera étudié dans le paragraphe suivant, car il nécessite une attention particulière sur l'utilisation du facteur λ_g. Dans un premier temps, nous considérons le cas du composant JADE irradié avec des protons de $60\ MeV$ avec une fluence de $7{,}28 \times 10^{10}\ p^+/cm^2$. Le courant d'obscurité est mesuré à $296{,}15\ K$, 1 mois après irradiation. Sur la Figure IV.14, nous superposons la distribution de courant d'obscurité expérimentale (bleue), la simulation *DAAN* avec le modèle d'effets de champ électrique 1D (noire) et la simulation *DAAN* avec le modèle d'effets de champ électrique 3D (rouge). Les paramètres de simulation sont identiques dans les deux cas, et correspondent aux conditions de mesure expérimentale. La DCNU est un histogramme normalisé par unité de courant d'obscurité : le nombre d'évènements contenus dans un canal est divisé par le nombre total d'évènements dans l'histogramme (autrement dit le nombre de pixels simulés), et également divisé par la largeur du canal, aussi appelé le « pas » de l'histogramme, exprimé en unité de de densité de courant d'obscurité. On obtient ainsi une distribution différentielle, et n'importe quelle distribution différentielle est directement comparable à une autre. L'axe Y représente donc le nombre d'évènements normalisé et l'axe X l'échantillonnage en courant d'obscurité. Toutes les DCNU présentées dans ce manuscrit sont tracées en échelle logarithmique pour les axes X et Y, sauf indication contraire. Cela permet à la fois de distinguer correctement la queue de distribution et les faibles courants d'obscurité.

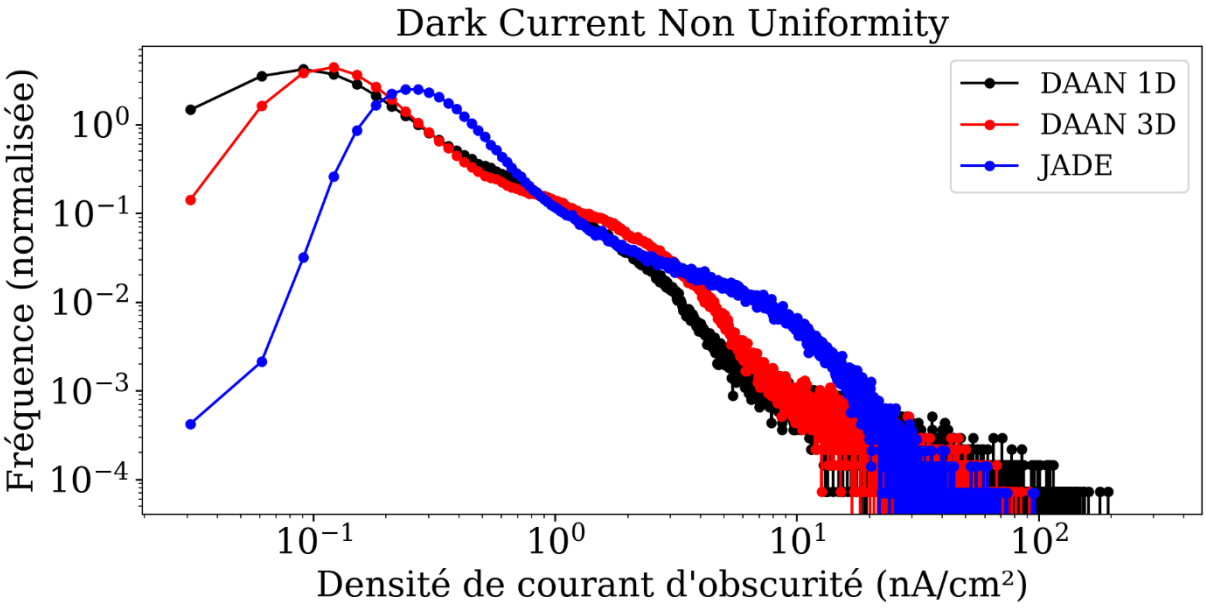


Figure IV.14 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant JADE. Ce composant a été irradié avec des protons de 60 MeV à une fluence de $7{,}28 \times 10^{10}\ p+/cm^2$. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de 296,15 K.

D'après la Figure IV.14, le passage du modèle d'effets de champ électrique 1D au 3D dans *DAAN* permet de réduire l'intensité maximale prédite pour les pixels chauds d'un facteur 2 à 3, conduisant à un rapprochement de la distribution simulée vers la distribution expérimentale. Ceci s'explique par le fait que pour la carte de champ électrique de ce composant et pour les propriétés de piège considérées, le facteur moyen d'amplification $\langle \lambda_g \rangle$ passe d'une valeur d'environ 7 dans le cas 1D à environ 2,25 dans le cas 3D. Cette réduction du facteur moyen d'amplification (environ d'un facteur 3,1) est d'ailleurs en accord avec les études paramétriques réalisées dans les paragraphes précédents, puisque nous avions observé une diminution de $\langle \lambda_g \rangle$ d'un facteur compris entre 1,2 et 6 sur une gamme de champ électrique typique d'un imageur.

Si l'on reprend l'étude paramétrique réalisée sur les paramètres de pièges, nous avions observé que le modèle 3D réduisait de manière non constante la dispersion des valeurs de λ_g par rapport au modèle 1D. Cet effet se fait ressentir sur la prédiction de la DCNU car la dispersion sur la queue de distribution de la DCNU est moins élevée pour le cas du modèle 3D que le modèle 1D. La variation de λ_g avec le champ électrique a donc un impact direct sur le calcul du courant d'obscurité.

Le modèle d'ECE 3D semble avoir également une incidence sur la forme globale de la DCNU simulée. En effet, la valeur où se situe le pic de la distribution de courant d'obscurité tend légèrement vers une plus forte valeur de courant. Dans le cas de cette simulation, le pic se situe autour de $10^{-1}\ nA/cm^2$ pour la simulation 1D, alors que le pic est plutôt localisé à de $2 \times 10^{-1}\ nA/cm^2$ pour la simulation 3D. Pour comprendre ce décalage du pic de la distribution, il faut se rappeler comment est calculée l'augmentation du courant d'obscurité à chaque interaction nucléaire (voir chapitre III, équation (III.44)). A chaque interaction, nous ne multiplions pas simplement le courant d'obscurité par le facteur d'amplification lié aux ECE $\lambda_{g,i}$ mais par le ratio $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle \lambda_g \rangle}$, où $\langle \lambda_g \rangle$ est le facteur moyen d'amplification de la simulation (cf chapitre III). Cette légère augmentation de la position du pic de la DCNU est donc expliquée par le fait qu'en moyenne le ratio $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle \lambda_g \rangle}$ augmente pour les faibles valeurs de

$\lambda_{g,i}$. C'est une autre conséquence de la diminution de $\langle\lambda_g\rangle$ lors du passage du modèle 1D au 3D : quel que soit le modèle choisi (1D ou 3D), le minimum du facteur d'amplification $\lambda_{g,i}$ est toujours égal à 1 par définition. Sauf que lorsque l'on passe du modèle 1D au 3D, le facteur d'amplification moyen $\langle\lambda_g\rangle$ diminue. Par conséquent, le ratio $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ augmente seulement pour les faibles valeurs de $\lambda_{g,i}$ (voir Figure IV.15).

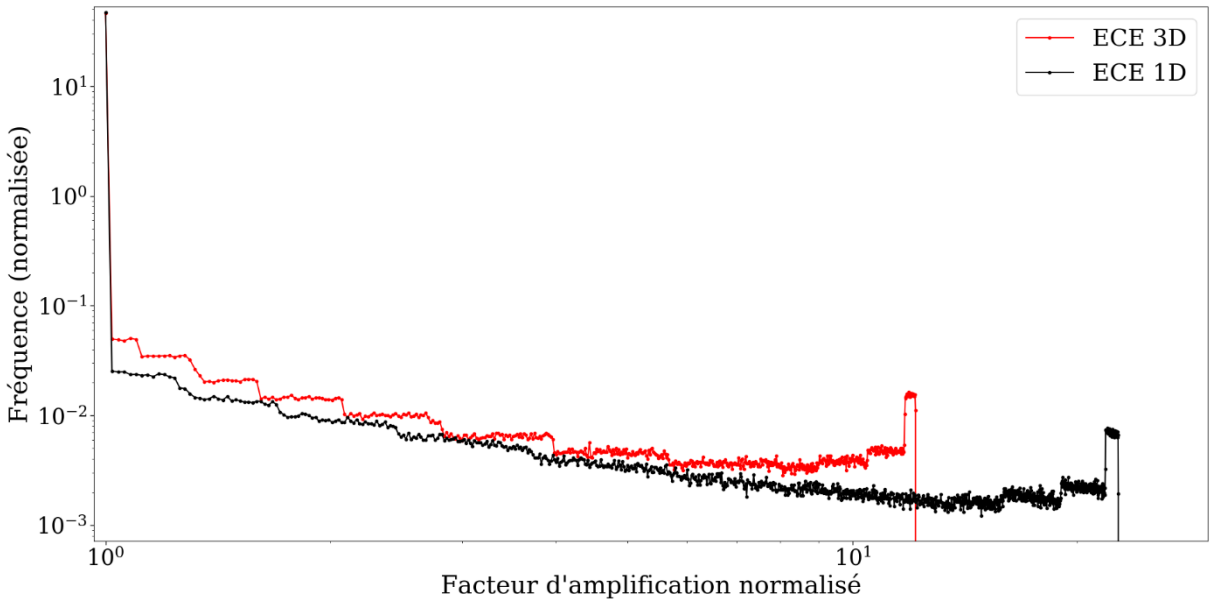


Figure IV.15 : Histogramme du facteur d'amplification normalisé dans le cas d'une simulation réalisé avec le modèle d'ECE 3D (en rouge) et 1D (en noir). Ce composant a été irradié avec des protons de $60\ MeV$ *à une fluence de* $7{,}28 \times 10^{10}\ p+/cm^2$. *Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $296{,}15\ K$. *Les paramètres de pièges sont ceux de la bilacune chargée négativement* $V_2^{-/0}$, *située à* $+0{,}71\ eV$ *au-dessus de la bande de valence, avec les sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées à* $5 \times 10^{-19}\ m^2$.

En conclusion, le passage d'un modèle 1D à 3D affecte non seulement la queue de distribution, là où se trouvent les pixels chauds, mais aussi la forme globale de la DCNU. Dans le cas du composant JADE dans ces conditions d'irradiation, l'apport du modèle d'ECE 3D est bénéfique par rapport au 1D puisque globalement la DCNU simulée en 3D est plus proche de la distribution expérimentale que la DCNU simulée en 1D.

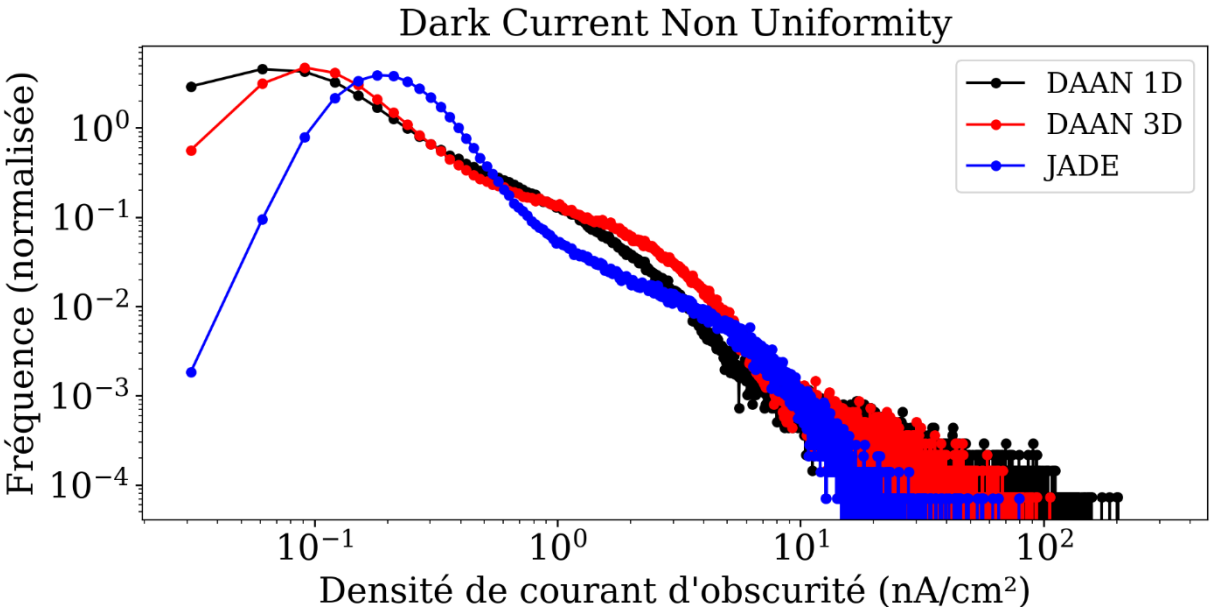


Figure IV.16 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant JADE. Ce composant a été irradié avec des protons de 120 MeV à une fluence de $1{,}20 \times 10^{11}\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $296{,}15\ K$*.*

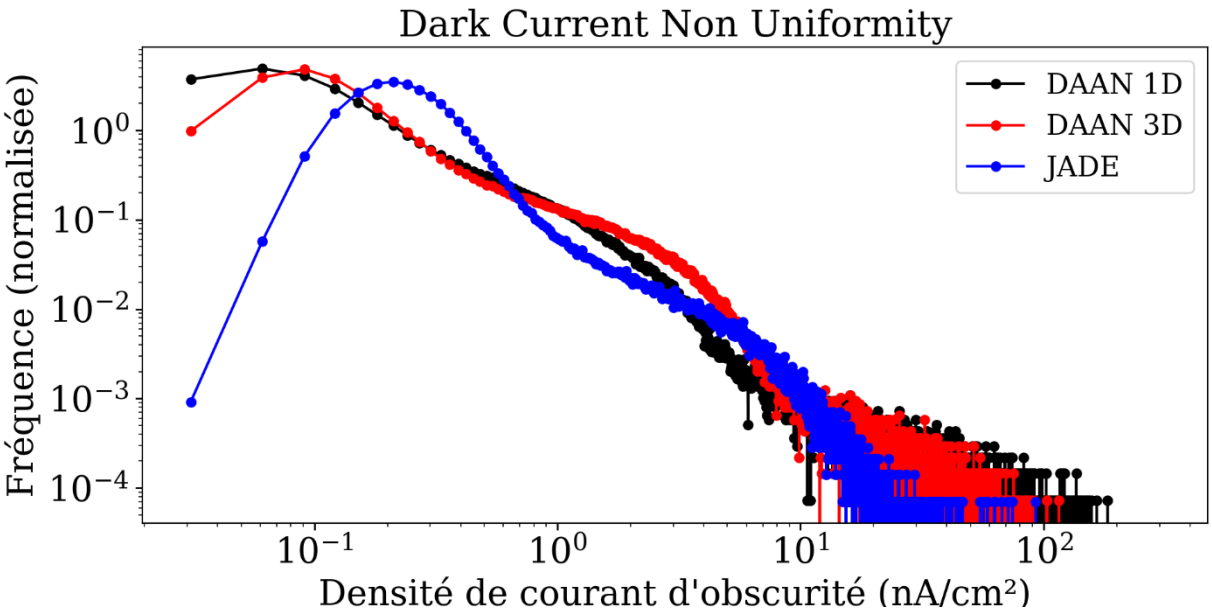


Figure IV.17 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant JADE. Ce composant a été irradié avec des protons de 185 MeV à une fluence de $1{,}66 \times 10^{11}\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $296{,}15\ K$*.*

Nous passons maintenant au cas du composant SAPPHIRE. Nous considérons dans un premier temps l'expérience où le SAPPHIRE a été irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$ à une fluence de $3{,}89 \times 10^9\ p^+/cm^2$. Le courant d'obscurité a été mesuré 1 mois après irradiation à une température de $294{,}15\ K$. Les paramètres de pièges utilisés dans la simulation précédente sont conservés (Figure IV.18).

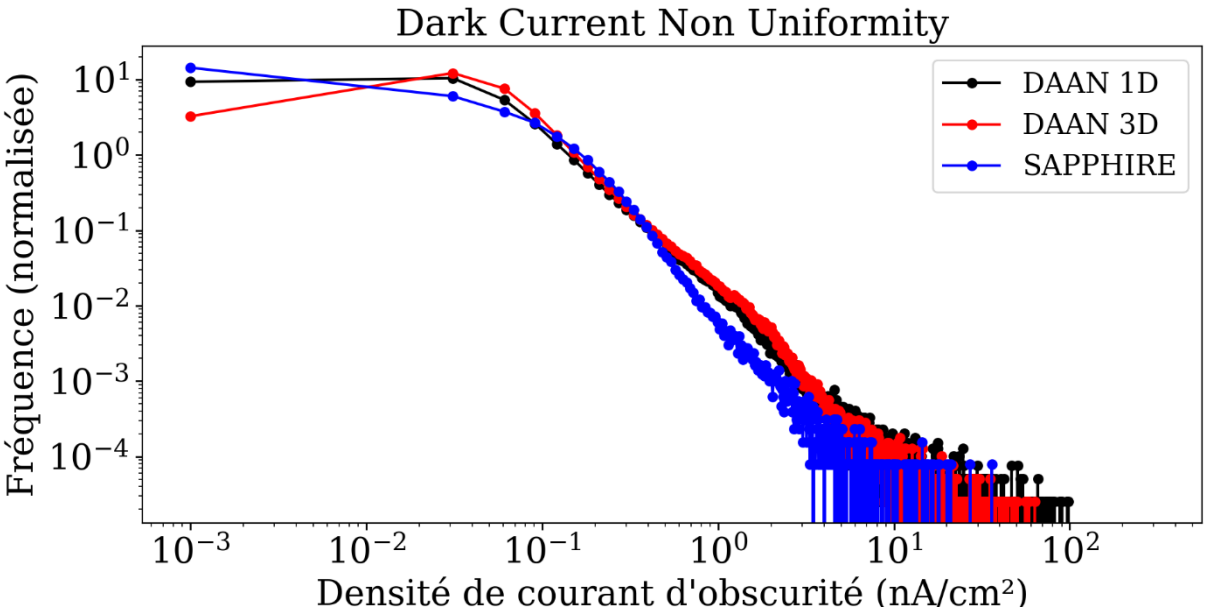


Figure IV.18 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant SAPPHIRE. Ce composant a été irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$ *à une fluence de* $3{,}89 \times 10^9\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $294{,}15\ K$*.*

Nous constatons que par rapport au composant JADE irradié à $60\ MeV$, la prédiction de la DCNU est surtout améliorée pour la queue de distribution, où l'intensité du courant d'obscurité et le nombre de pixels chauds sont mieux estimés dans le cas du modèle 3D que dans le cas 1D. Nous observons également que le modèle d'ECE 3D agit de la même manière sur cette DCNU que sur la précédente : la dispersion de la queue de distribution est réduite et la position du pic de la distribution est légèrement augmentée vers une plus forte valeur du courant d'obscurité, car nous normalisons le facteur d'amplification par le facteur moyen d'amplification.

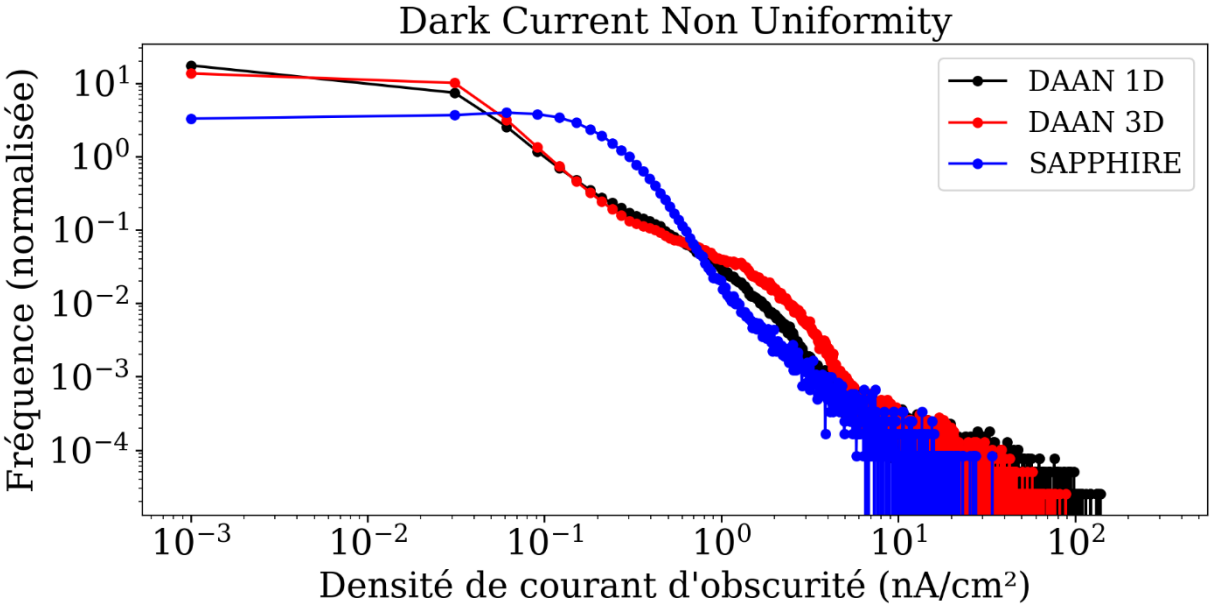


Figure IV.19 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant SAPPHIRE. Ce composant a été irradié avec des protons de $72{,}8\ MeV$ *à une fluence de* $2{,}52 \times 10^{10}\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $294{,}15\ K$*.*

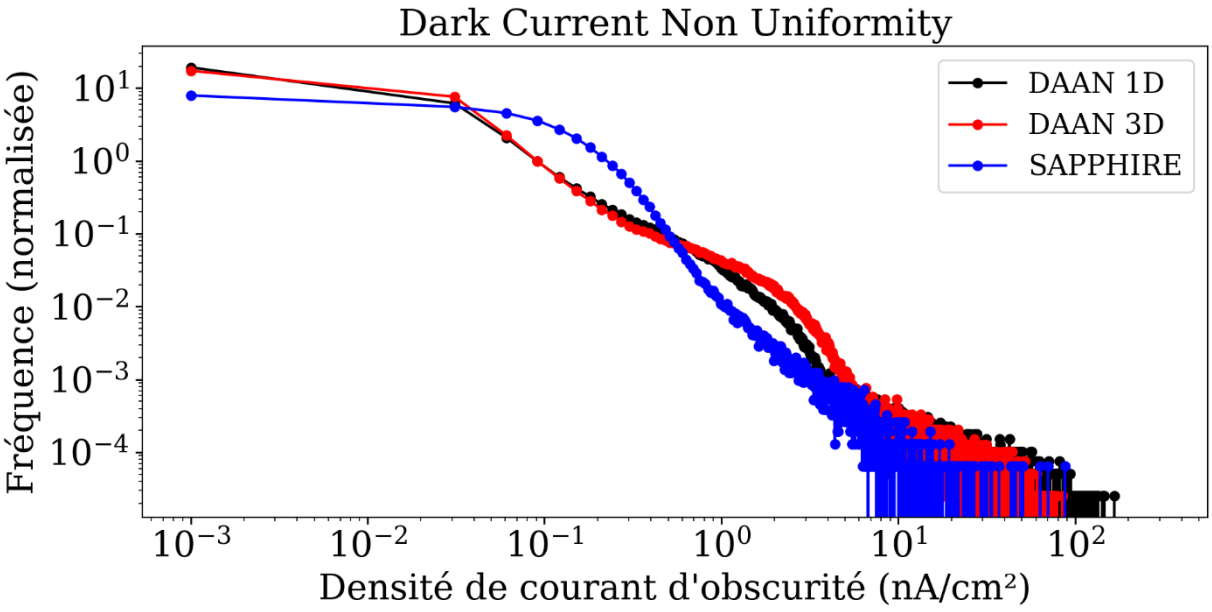


Figure IV.20 : Distributions de l'augmentation de la densité de courant d'obscurité (DCNU) simulées par DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique 3D (en rouge), du modèle d'effets de champ électrique en 1D (en noire) et mesurée expérimentalement (en bleue) pour le composant SAPPHIRE. Ce composant a été irradié avec des protons de $200\ MeV$ *à une fluence de* $5{,}16 \times 10^{10}\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $294{,}15\ K$*.*

Ces observations sont également valables pour les autres conditions d'irradiation du JADE (Figure IV.16 et Figure IV.17) et du SAPPHIRE (Figure IV.19 et Figure IV.20). De manière générale, le modèle d'ECE 3D permet de mieux prédire le nombre et l'intensité du courant d'obscurité des pixels chauds par rapport au modèle 1D mais dans les conditions de simulations actuelles, l'outil numérique *DAAN* surestime toujours la queue de distribution du courant d'obscurité par rapport aux données expérimentales. Cette tendance est clairement visible lorsque la DCNU est représentée sous forme d'histogramme cumulatif :

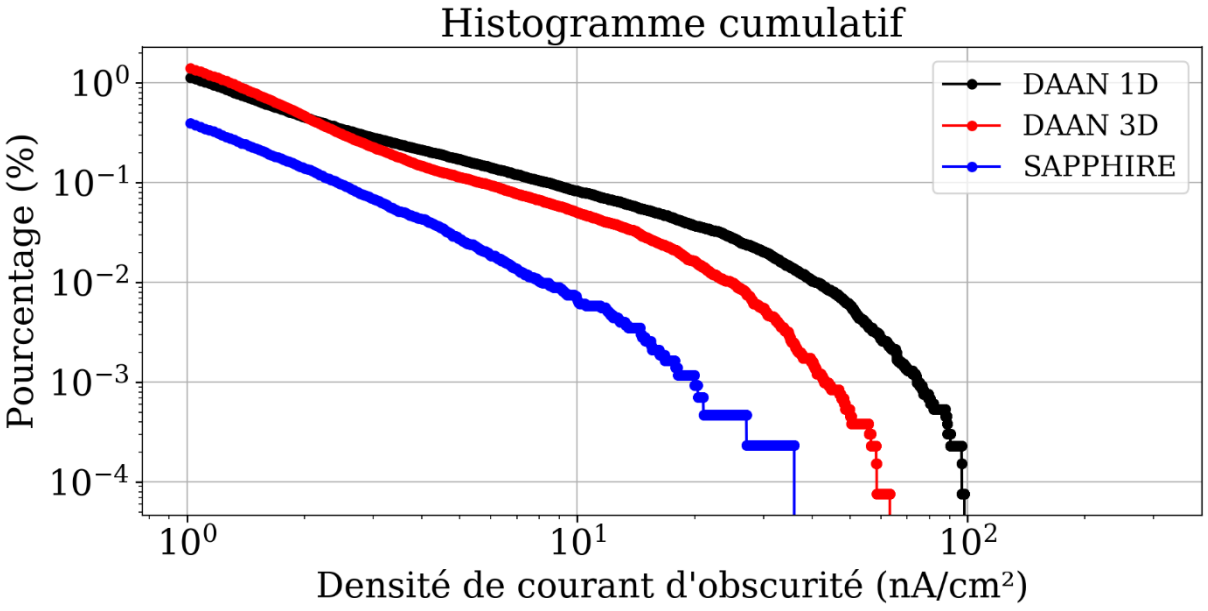


Figure IV.21 : Histogrammes cumulatifs de la DCNU expérimentale (en bleue), simulée avec le modèle d'effets de champ électrique en 3D (en rouge) et 1D (en noire). Ce composant SAPPHIRE a été irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$ *à une fluence de* $3{,}89 \times 10^9\ p+/cm^2$*. Les mesures du courant d'obscurité ont été réalisées 1 mois après irradiation à une température de* $294{,}15\ K$*.*

Un histogramme cumulatif consiste à sommer (ou soustraire, tout dépend du sens dans lequel on parcourt l'histogramme) le nombre d'évènements contenus dans un canal à tous les autres évènements comptabilisés dans les canaux précédents (ou suivant). Dans notre cas, le premier canal de l'histogramme cumulatif contient tous les pixels testés. Pour le canal suivant, nous soustrayons le nombre de pixels qui sont contenus dans le même canal de l'histogramme classique au nombre de pixels contenus dans le canal précédent de l'histogramme cumulatif. L'opération est ensuite répétée de manière récursive pour les canaux suivants.

Nous choisissons de ne représenter que les courants d'obscurité supérieurs à $1\ nA/cm^2$ (valeur arbitraire) car nous souhaitons nous concentrer sur la queue de distribution. La Figure IV.21 souligne bien le fait que le modèle 3D réduit le nombre d'évènements pour les forts courants par rapport au 1D, permettant de se rapprocher des données expérimentales. Cependant pour les jeux de paramètres considérés, le nombre de pixels avec un courant d'obscurité un peu plus faible (entre 1 et $2\ nA/cm^2$) est augmenté comparé au modèle d'ECE 1D.

Nous suspectons plusieurs facteurs qui peuvent expliquer que l'apport du modèle d'ECE 3D ne soit pas entièrement satisfaisant. Tout d'abord, la distribution expérimentale peut être entachée d'incertitudes sur la mesure dans la région des plus faibles courants, car leurs intensités sont de l'ordre du pA/cm^2 dans ce cas, ce qui est très faible. De plus, la contribution de la dose ionisante (TID, cf chapitre II) n'est pas prise en compte dans nos simulations, mais cet aspect est moins critique que la prédiction des forts courants d'obscurité. On peut également ajouter le fait que dans le cadre des simulations tenant compte des effets de champ électrique, c'est une distribution spatiale du champ électrique en une dimension (amplitude du champ électrique selon l'axe Z de la profondeur du pixel) qui est utilisée. Or dans le pixel réellement testé le champ électrique n'est pas identique en tout point X et Y à une profondeur donnée Z. Le risque est donc de surestimer ou sous-estimer les effets du champ électrique dans certaines régions du pixel. De même, nous considérons que les défauts issus des déplacements atomiques créés au cours d'une interaction nucléaire vont tous subir l'influence du même champ électrique, sauf qu'en réalité une cascade de dommage peut s'étendre de plusieurs nanomètres jusqu'à une centaine de nanomètres.

D'ailleurs, cette hypothèse peut également expliquer le fait que dans le cas du SAPPHIRE, la prédiction des courants semble meilleure pour une faible énergie de proton, comme le montre la comparaison entre les irradiations effectuées à $6{,}5\ MeV$ et $72{,}8\ MeV$. En effet nous savons que pour une faible énergie de protons (inférieure à $10\ MeV$ environ), une interaction nucléaire va plutôt avoir tendance à générer des défauts isolés. Les paires lacune-interstitiel ont donc peu de chance de créer des défauts très complexes ou de natures variées. Dans *DAAN*, nous faisons l'hypothèse que tous les déplacements atomiques créés lors d'une interaction nucléaire vont servir à créer la même espèce de défauts cristallins. On peut considérer au premier ordre que pour de telles énergies de protons, cette hypothèse est représentative des processus de réorganisation qui ont lieu. En revanche pour des protons plus énergétiques, une interaction nucléaire va engendrer des cascades de dommage, avec des topologies complexes et impliquant de nombreux déplacements atomiques. Puisque de nombreuses paires lacune-interstitiel sont créées, la réorganisation cristalline qui suit peut mener à la création d'espèces de défauts diverses. Notre hypothèse de création de défauts de nature unique n'est peut-être donc plus suffisamment représentative de l'endommagement réel du composant pour des protons de hautes énergies. D'autres éléments de discussion à ce sujet seront apportés au cours du chapitre VI, notamment par le biais d'une nouvelle hypothèse de calcul.

La principale hypothèse pour expliquer ce désaccord entre simulation et mesure expérimentale est que les paramètres de pièges choisis pour cette simulation ne soient pas représentatifs des dommages réellement subis par le capteur. En effet, nous savons que le processus

de réorganisation de la matière engendre la création d'espèces diverses et variées de défauts (cf chapitre II), or nous ne considérons ici qu'un seul type de piège avec des propriétés électriques fixées. Si le cas d'une population hétérogène de défauts sera étudié dans le paragraphe suivant, nous proposons pour conclure ce paragraphe de montrer l'influence des paramètres de pièges sur la prédiction de la DCNU. Pour ce faire, l'histogramme cumulatif est calculé sur les courants de la queue de distribution (arbitrairement fixé au-delà de $1\ nA/cm^2$). La DCNU est calculée pour le modèle d'ECE 3D avec le même niveau de piège ($+0{,}71\ eV$) mais avec deux couples de sections efficaces de capture différents, toujours dans le cas du SAPPHIRE. Nous avons choisi les couples $[\sigma_n;\sigma_p]$ suivant : $[10^{-21}m^2;10^{-17}m^2]$ et $[10^{-17}m^2;10^{-17}m^2]$.

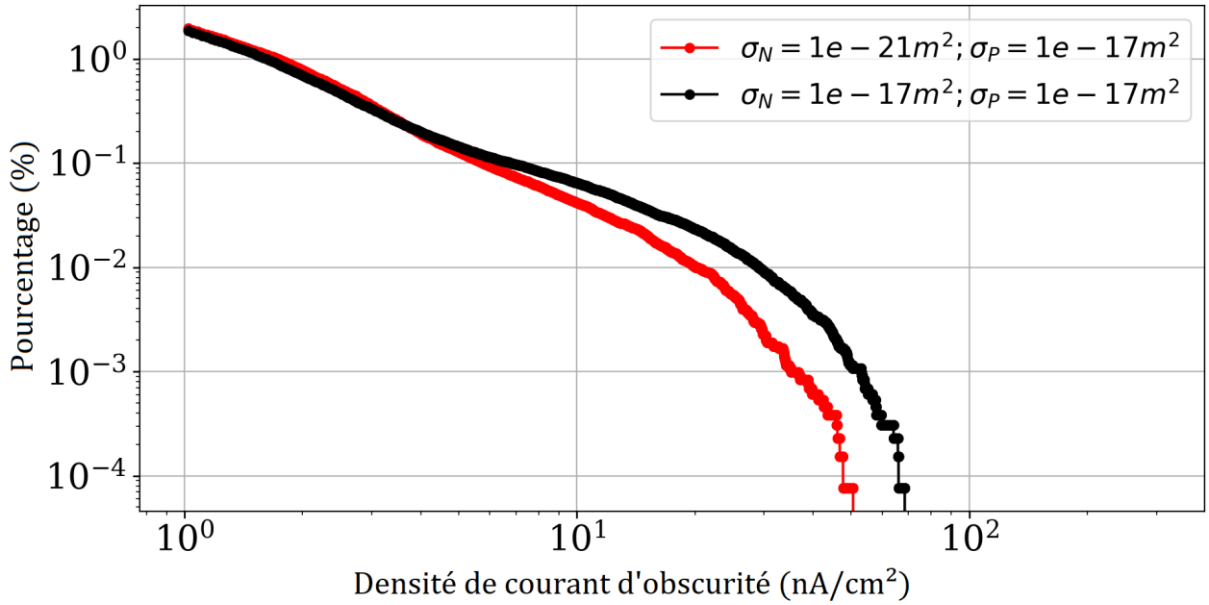


Figure IV.22 : Histogrammes cumulés des DCNU simulées avec DAAN en tenant compte du modèle d'effets de champ électrique en 3D. Pour ces histogrammes, seuls les courants d'obscurité plus grands ou égaux à $1\ nA/cm^2$ sont comptabilisés, afin de se concentrer sur la queue de distribution. Chaque histogramme cumulatif est calculé pour un couple de sections efficaces de capture d'électrons et de trous différents.

D'après la Figure IV.22, nous constatons que le fait de jouer sur les paramètres de sections efficaces influe sur l'estimation de la distribution de pixels. Lorsque nous prenons le pire cas de dégradation (le couple $[10^{-17}m^2;10^{-17}m^2]$), le courant d'obscurité maximum simulé est plus élevé que pour l'autre couple, ce qui induit également une plus forte dispersion de la queue de distribution. En contrepartie, le calcul estime qu'il y a plus de pixels présentant un courant d'obscurité plus faible, puisque la courbe du moindre cas (courbe rouge) est au-dessus du pire cas (courbe noire) entre 1 et $3\ nA/cm^2$. Nous pouvons interpréter cette observation à partir de la Figure IV.9. En effet d'après l'étude paramétrique réalisée sur les sections efficaces, nous savons qu'à σ_p fixé pour un piège accepteur, si σ_n diminue le facteur d'amplification diminue également.

D'après cette étude, nous avons la confirmation que les paramètres de pièges influencent la prédiction du courant d'obscurité. Jusqu'à maintenant, nous avions considéré le cas d'une population homogène de défauts, c'est-à-dire avec un niveau de piège unique et des sections efficaces de capture d'électrons et de trous fixées. Nous savons cependant que cette hypothèse n'est pas représentative de l'endommagement réel du composant. C'est pourquoi nous proposons dans le paragraphe suivant de considérer le cas d'une population hétérogène de défauts, autrement dit une population avec des pièges de natures différentes avec des propriétés électriques différentes.

IV.5 Cas d'une population mixte de défauts

Que ce soit dans la littérature ou dans les travaux réalisés précédemment avec *DAAN*, les auteurs effectuent toujours l'hypothèse d'une population de pièges homogène, c'est-à-dire que les effets de champ électrique ne sont estimés que pour un seul type de défauts, puis le résultat de cette estimation est appliqué au calcul du courant d'obscurité [5], [9], [14]–[16]. Dans plusieurs études, le seul défaut considéré est un piège situé au milieu de la bande interdite. Ce choix n'est pas justifié explicitement par les auteurs, mais on peut penser que ce niveau de piège est étudié car selon la théorie de Shockley-Read-Hall, un piège situé au centre du gap présente un fort taux de génération de paires électron-trou, et par extension est un fort contributeur au courant d'obscurité. Seul *Hurkx* indique explicitement que ce critère est une référence pour certaines publications scientifiques [9]. Cependant, nous avons vu au cours de l'étude paramétrique sur les niveaux d'énergie de piège (cf paragraphe IV.2.1) qu'un défaut placé au milieu de la bande interdite présente le plus faible facteur d'amplification λ_g par rapport à n'importe quel autre niveau d'énergie à un champ électrique donné. Dans le cas de nos simulations, nous avons souvent privilégié le niveau de piège correspondant à celui de la bilacune chargé négativement une fois ($+0{,}71\ eV$). Tous ces cas ne sont pas représentatifs des dommages réels subis par un pixel. Comme il a été montré dans le chapitre II de ce manuscrit, les processus de réorganisation qui suivent après irradiation mènent à la production de défauts de nature variée avec des propriétés électriques hétérogènes. En conséquence, il nous a semblé important au cours de cette thèse d'étudier l'influence d'une population hétérogène de défauts sur l'estimation de la DCNU. L'étude d'une population mixte de défauts implique que le facteur moyen d'amplification $\langle\lambda_g\rangle$ utilisé pour normaliser le facteur d'amplification associée à une interaction nucléaire λ_{g_i} va évoluer en fonction des propriétés électriques des défauts et de leur nombre. Du fait qu'un tel procédé est unique par rapport aux autres méthodes de prédiction disponibles dans la littérature, nous détaillons dans les paragraphes suivants l'importance de la normalisation par le facteur moyen $\langle\lambda_g\rangle$ dans le cadre de l'estimation de la DCNU avec le facteur de dommage universel.

IV.5.1 Le facteur moyen d'amplification

Dans *DAAN*, le nombre de déplacements atomiques générés par une interaction nucléaire est ensuite converti en courant d'obscurité grâce au facteur de dommage universel de *Srour*. Lorsque l'on souhaite tenir compte des effets de champ électrique, un facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou est calculé à chaque interaction nucléaire en tirant aléatoirement une profondeur d'interaction et un piège avec ses propriétés. Pour souligner l'importance de normaliser ce facteur d'amplification propre à une interaction nucléaire, nous allons étudier un cas sans normalisation et raisonner par l'absurde.

Pour commencer, comparons le facteur d'amplification d'un défaut accepteur situé près du centre de la bande interdite du semi-conducteur ($+0{,}50\ eV$) et un autre défaut accepteur placé près de la bande de conduction ($+0{,}90\ eV$). Dans ce cas d'étude, les sections efficaces de capture d'électrons et de trous des défauts sont toutes égales à une valeur arbitraire. D'après l'étude paramétrique sur les niveaux d'énergie (Figure IV.7), nous savons que dans ces conditions $\lambda_{g_{0{,}50\ eV}} < \lambda_{g_{0{,}90\ eV}}$. Dans le cadre de l'utilisation du facteur de *Srour* K_{dark} et sans normalisation, le courant d'obscurité associé à une interaction nucléaire s'écrirait comme suit :

$$\Delta I_{dark,i} = N_{d,i} \times K_{dark} \times \lambda_{g_i}$$

Sachant que dans les conditions de cet exemple $\lambda_{g_{0{,}50\ eV}} < \lambda_{g_{0{,}90\ eV}}$, cela signifierait que $\Delta I_{dark,i}(0{,}50\ eV) < \Delta I_{dark,i}(0{,}90\ eV)$ puisque K_{dark} est une constante et $N_{d,i}$ est défini pour

une interaction nucléaire donnée. Cette conclusion n'est pas en accord avec la théorie SRH, puisque le courant d'obscurité est proportionnel au taux de génération de paires électron-trou g. Ceci est la conséquence de l'utilisation du facteur de *Srour*, puisque cela nous contraint à estimer de manière relative l'effet du champ électrique sur le courant d'obscurité. Si nous estimions directement le courant d'obscurité à partir du taux de génération de paires électron-trou, nous serions dans une estimation absolue des effets du champ électrique sur le courant d'obscurité. Ne pas normaliser le calcul du courant d'obscurité avec le facteur d'amplification moyen lorsque que l'on utilise un facteur de dommage tel que le facteur de *Srour* revient à considérer que des pièges situés près du centre du gap génèrent moins de courant électrique qu'un défaut situé loin du milieu de la bande interdite, ce qui est absurde et n'est pas vérifié expérimentalement. Pourtant, cette méthode sans normalisation est utilisée dans la littérature, et les études réalisées avec ce genre de calcul servent de base pour estimer l'influence du champ électrique sur la génération du courant d'obscurité.

C'est pour cette raison que nous normalisons le calcul du courant d'obscurité par le facteur d'amplification moyen $\langle \lambda_g \rangle$ lorsque nous utilisons le facteur de dommage universel. Cette opération permet de respecter la théorie SRH par rapport à la distribution de champ électrique du pixel étudié. En effet, pour une même distribution de champ électrique, le facteur d'amplification moyen $\langle \lambda_g \rangle$ sera plus grand pour un piège loin de du milieu de la bande interdite par rapport à un défaut proche du centre du gap ($\langle \lambda_{g_{0,50\ eV}} \rangle < \langle \lambda_{g_{0,90\ eV}} \rangle$). Lors de la division du courant d'obscurité par un grand $\langle \lambda_g \rangle$, le courant d'obscurité final sera plus fortement diminué que pour un petit $\langle \lambda_g \rangle$, permettant de respecter l'inégalité $\Delta I_{dark,i}(0{,}50\ eV) > \Delta I_{dark,i}(0{,}90\ eV)$. La valeur de $\langle \lambda_g \rangle$ dépend directement de la concentration de chaque population de piège, des niveaux d'énergies et sections efficaces de capture d'électrons et de trous associés ainsi que de la distribution de champ électrique dans le pixel. Puisque les distributions de champ électrique sont pratiquement identiques dans les pixels des imageurs JADE et SAPPHIRE utilisés pendant cette thèse, l'influence du facteur moyen d'amplification est étudiée en considérant des concentrations variées de pièges avec des propriétés différentes.

IV.5.2 Variation du facteur moyen d'amplification en fonction de la population de défauts

Dans ce paragraphe, nous faisons varier la concentration de chaque population de défauts afin d'étudier son impact sur la valeur de $\langle \lambda_g \rangle$ et par extension sur l'estimation de la DCNU. Il est d'ailleurs plus exact de parler de notion de « proportions » que de concentrations, puisqu'aucune concentration absolue de pièges n'est rentrée dans *DAAN*. Nous faisons varier le pourcentage du nombre de pièges d'un type donné par rapport à un autre. Par exemple, si nous considérons une base de données de 10 pièges dans notre simulation, où 7 sont des bilacunes $V_2^{-/0}$ et 3 des atomes d'or Au, cela signifie que *DAAN* a 70 % de chance de tirer aléatoirement le piège $V_2^{-/0}$ et 30 % de chance de tirer le piège Au. Nous fixons le niveau d'énergie de la bilacune $V_2^{-/0}$ à $+0{,}71\ eV$ au-dessus de la bande de valence (piège accepteur), avec des sections efficaces de capture d'électrons et de trous égales à $5 \times 10^{-19}\ m^2$, tandis que le niveau du complexe Au est fixé à $+0{,}57\ eV$ au-dessus de la bande de valence (niveau accepteur), avec $\sigma_n = 2 \times 10^{-20}\ m^2$ et $\sigma_p = 7{,}6 \times 10^{-19}\ m^2$. Les paramètres de pièges de l'atome d'or Au ont été sélectionnés à partir des travaux de *Domengie et al.* [17].

Dans cette situation, c'est la bilacune $V_2^{-/0}$ qui est le plus faible contributeur de courant d'obscurité comparé à l'atome d'or Au car elle présente un plus faible taux de génération de paires électron-trou. Des simulations *DAAN* ont été réalisées avec des populations hétérogènes de $\left[V_2^{-/0};\ Au \right]$ correspondant aux proportions $[80\% - 20\%], [50\% - 50\%], [20\% - 80\%]$. A chaque simulation,

tous les facteurs d'amplification normalisés liés aux effets de champ électrique $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ calculés sont enregistrés à chaque interaction nucléaire. Ces facteurs d'amplification normalisés ont ensuite été échantillonnés dans un histogramme, présenté en Figure IV.23.

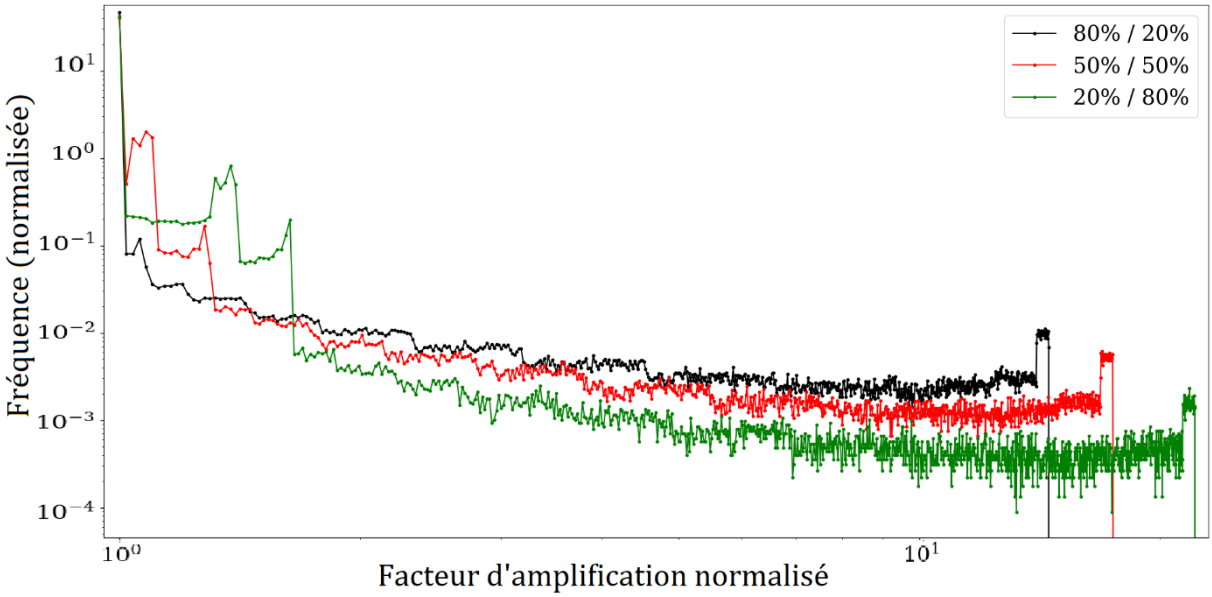


Figure IV.23 : Histogrammes des facteurs d'amplification normalisés $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ pour différentes proportions de pièges. La proportion de chaque espèce de défauts affecte l'intensité et la fréquence des facteurs d'amplification normalisés.

D'après la Figure IV.23, nous constatons que les histogrammes ne sont pas identiques en fonction des populations de défauts. Dans le cas où le plus faible contributeur de courant d'obscurité est présent en grande quantité dans la population de pièges, le facteur d'amplification normalisé atteint son maximum à une valeur plus faible que les deux autres populations étudiées. Cette réduction de l'amplitude maximale du ratio est directement liée au fait que le facteur moyen d'amplification $\langle\lambda_g\rangle$ est le plus grand des trois populations étudiées. Le facteur moyen d'amplification est indiqué pour chaque population dans le Tableau IV.2.

	Répartition de la population $\left[V_2^{-/0};\ Au\right]$		
	$[80\% - 20\%]$	$[50\% - 50\%]$	$[20\% - 80\%]$
$\langle\lambda_g\rangle$	2,08	1,73	1,37

Tableau IV.2 : Amplitude du facteur moyen d'amplification $\langle\lambda_g\rangle$ pour différentes populations de pièges.

Cela restreint par conséquent les valeurs possibles du rapport $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ (puisque $\lambda_{g,i}$ est au minimum égal à 1 et que le dénominateur $\langle\lambda_g\rangle$ augmente, les valeurs possibles sont limitées). De ce fait, un plus grand nombre de facteurs d'amplification normalisés avec une valeur intermédiaire (environ entre 1,5 et 12) est calculé comparé aux deux autres populations. Au fur et à mesure que la proportion de pièges avec un fort taux de génération augmente, l'amplitude maximale du facteur d'amplification normalisé augmente aussi. En contrepartie, le nombre d'évènements contenus dans les canaux intermédiaires s'affaiblit à mesure que le nombre de pièges hautement contributeurs au courant d'obscurité augmente. On remarque également que le nombre d'évènements contenus dans les canaux de faibles valeurs (en-dessous de 2) augmente, signe que le ratio $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ augmente à cause de la baisse du facteur d'amplification moyen $\langle\lambda_g\rangle$. Le raisonnement pour expliquer ceci est similaire à celui utilisé pour

comprendre pourquoi le nombre de plus faibles courants augmente légèrement lors du passage du modèle 1D au 3D (cf paragraphe IV.4). Puisque le minimum de $\lambda_{g,i}$ est toujours proche de 1 quelque soit la population de pièges considérée, si le facteur d'amplification moyen $\langle\lambda_g\rangle$ diminue, le ratio $\frac{\lambda_{g,i}}{\langle\lambda_g\rangle}$ augmente. Comme l'on pouvait s'y attendre, la population $[50\% - 50\%]$ est un compromis entre la population $[80\% - 20\%]$ et $[20\% - 80\%]$.

Cette analyse permet de souligner l'importance de normaliser le facteur d'amplification pour une interaction nucléaire $\lambda_{g,i}$ par le facteur d'amplification moyen $\langle\lambda_g\rangle$. Si cette opération n'avait pas été effectuée, l'analyse décrite dans le paragraphe précédent aurait été entièrement inversée. Autrement dit, on aurait considéré que la population de défauts faiblement contributeurs du courant d'obscurité amplifierait plus le courant d'obscurité qu'une population dans laquelle des défauts avec un fort taux de génération de paires électron-trou domine.

A partir de cette étude, nous sommes en mesure d'anticiper l'influence d'une population de pièges hétérogène sur la distribution du courant d'obscurité. Les DCNU associées à chaque population de défauts sont tracées sur la Figure IV.24.

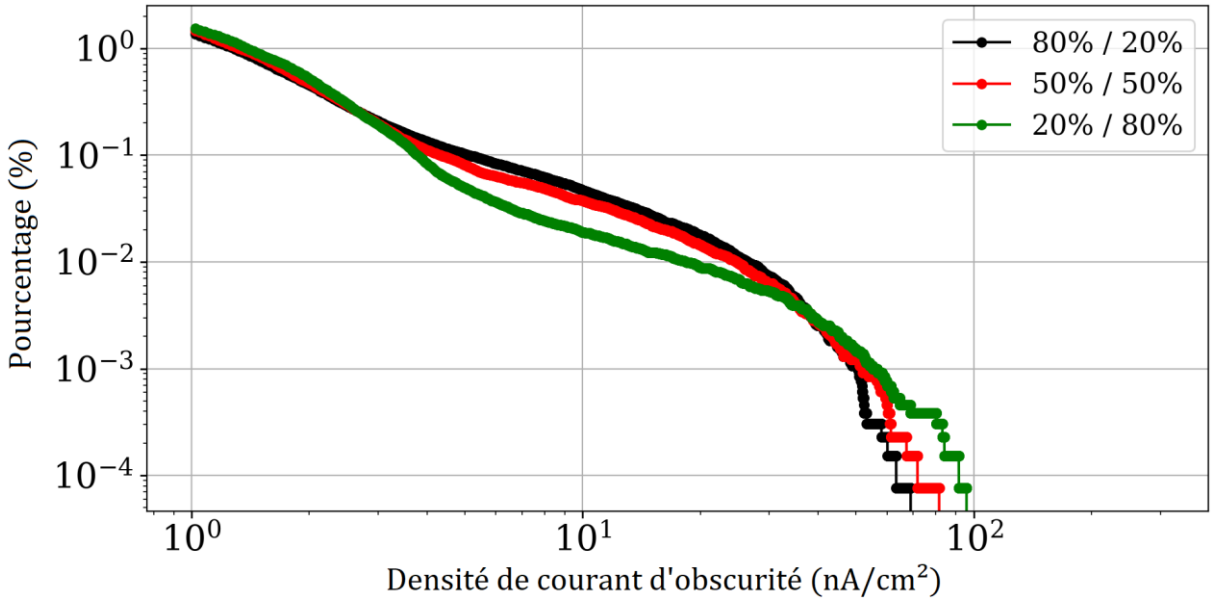


Figure IV.24 : Histogrammes cumulatifs pour les DCNU simulées à partir de DAAN en considérant plusieurs populations de pièges. Une corrélation directe est observée entre la forme de ces histogrammes et la Figure IV.23.

Pour distinguer plus facilement l'influence d'une population hétérogène de défauts sur la DCNU, cette dernière est représentée selon un histogramme cumulatif pour des courants supérieurs à $1\ nA/cm^2$. Nous remarquons une équivalence directe entre l'histogramme des facteurs d'amplification normalisés et l'histogramme cumulatif des courants d'obscurité. En effet, dans le cas de la population où le fort contributeur de courant est majoritaire, l'amplitude maximale du courant d'obscurité est la plus forte par rapport aux autres populations. De manière similaire à l'analyse de l'histogramme des facteurs d'amplification normalisés, le nombre de courants intermédiaires est réduit par rapport aux autres populations. En conséquence, la dispersion sur la queue de distribution de courant, l'intensité maximale et donc la forme de la distribution dépendent des proportions de pièges sélectionnées. Cette étude a souligné l'intérêt de considérer une population hétérogène de défauts.

Cependant, le choix des défauts et de leurs proportions pour constituer une population hétérogène sont réalisés de manière arbitraire. Cette sélection arbitraire constitue une première limite pour la simulation de la DCNU avec une population hétérogène de défauts. De plus, le facteur de

dommage universel utilisé pour convertir le nombre de déplacements atomiques calculés en courant d'obscurité constitue une deuxième limite à cette approche. En effet, ce coefficient permet de donner une estimation moyenne de la dégradation subie par un imageurs. Du fait qu'il soit issu de différentes mesures expérimentales, ce coefficient masque les contributions des différents phénomènes de réorganisation de la matière qui se mettent en place après irradiation. Dans le but de répondre à cette problématique, un modèle de réorganisation des défauts a été élaboré au cours des travaux de thèse présentés dans ce manuscrit.

IV.6 Conclusion du chapitre

L'outil de calcul numérique développé par l'ONERA, dédié à l'estimation de la distribution du courant d'obscurité après irradiation dans un imageur, prend en compte les effets du champ électrique sur l'augmentation du courant d'obscurité dans un pixel. Cependant les mécanismes associés à la présence d'un champ électrique, augmentant le taux de génération de paires électron-trou des défauts, étaient modélisés en une dimension. Cela signifie que le porteur de charge émis par le piège n'est émis que selon une seule direction, ce qui constitue le pire cas car parallèle à la direction du champ électrique. Par conséquent, une modélisation 1D des effets de champ électrique est connue pour surestimer l'influence du champ électrique sur le calcul du courant d'obscurité.

C'est pourquoi dans le cadre de cette thèse, un modèle original d'effets de champ électrique en 3D est proposé. Le but de ce modèle est de réduire l'impact du champ électrique sur le calcul du courant d'obscurité, afin d'obtenir une meilleure prédiction de la distribution du courant d'obscurité de l'imageur irradié. L'originalité de ce modèle repose sur l'hypothèse que l'effet Tunnel Assisté par Phonons dépend de la direction d'émission du porteur de charge. Ce modèle se présente sous la forme de la somme de l'abaissement de la barrière de potentiel par effet Poole-Frenkel en 3D et de l'effet Tunnel Assisté par Phonons. L'originalité de ce modèle repose sur l'hypothèse que l'effet Tunnel Assisté par Phonons tient également compte de l'abaissement de la barrière de potentiel, différent selon l'angle d'émission du porteur de charge.

Ce modèle analytique original a été validé par le biais de la comparaison avec un outil numérique TCAD. Dans le but d'étudier la contribution du passage d'un modèle 1D à 3D, et d'analyser l'influence des paramètres de pièges (niveau d'énergie et sections efficaces de capture d'électrons et de trous) sur les effets de champ électrique, plusieurs études paramétriques ont été réalisées pour lesquelles le modèle 1D et 3D étaient systématiquement confrontés. Ces études ont consisté à tracer l'évolution du facteur d'amplification du taux de génération de paires électron-trou λ_g en fonction du champ électrique pour différents jeux de paramètres de pièges. Dans l'ensemble, ces études ont montré que la modélisation en trois dimensions conduit à une diminution du facteur λ_g par rapport au cas 1D. Pour des champs électriques réalistes typiquement rencontrés dans un imageur, la réduction varie d'un facteur 1,25 à 6 en fonction du champ électrique et des paramètres de pièges considérés (entre $1 \times 10^5\ V/m$ et $3 \times 10^7\ V/m$). Pour des champs électriques plus élevés (entre $3 \times 10^7\ V/m$ et $10^8\ V/m$), cette réduction peut dépasser un facteur 8. Cette diminution réduit non seulement l'amplitude maximale de λ_g, mais réduit également le facteur moyen d'amplification $\langle\lambda_g\rangle$. Les études paramétriques ont aussi mis en avant une légère baisse de sensibilité du facteur d'amplification $\langle\lambda_g\rangle$ à la variation des paramètres de pièges lorsque l'on considère le modèle 3D. Il reste cependant nécessaire de tenir compte de la variation de $\langle\lambda_g\rangle$ suivant la valeur des paramètres de pièges pour les régions où règnent un fort champ électrique, qui sont en partie responsables d'une forte augmentation du courant d'obscurité.

Toutes ces observations impactent directement le calcul de la distribution du courant d'obscurité. Des simulations du courant d'obscurité tenant compte des effets de champ électrique

modélisés en 3D ont été effectuées et comparées aux données expérimentales. Leur analyse a montré que d'une part l'amplitude maximale des courants d'obscurité simulés était réduite, et que l'effet dispersif du champ électrique sur la distribution du courant était aussi diminué. Dans certains cas, l'apport du modèle 3D est bénéfique sur la distribution du courant d'obscurité globale. Dans les autres cas, le modèle 3D permet d'améliorer essentiellement la prédiction de la distribution de pixels par rapport au modèle 1D. Cette amélioration est jugée selon les critères d'intensité maximale calculée du courant d'obscurité et la fréquence de pixels chauds par rapport aux données expérimentales. Pour expliquer le fait que cette amélioration n'est pas aussi nette dans tous les cas, nous suspectons le fait que l'hypothèse d'une population de pièges homogène ne correspond pas suffisamment à l'endommagement réel du composant. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à l'étude de l'influence d'une population hétérogène de défauts sur le facteur $\langle \lambda_g \rangle$ et par extension sur le calcul de la distribution du courant d'obscurité. Des populations comportant deux pièges avec des propriétés électriques différentes sont introduites en différentes proportions, l'un possédant un fort taux de génération, l'autre plus faible. Le fait de jouer sur les proportions de pièges a démontré que la distribution du courant d'obscurité, et particulièrement la queue de distribution, était modulée en fonction de la population de défauts considérée.

Cependant, le choix de la nature des pièges et de leurs proportions sont effectués de manière arbitraire. De plus, le courant d'obscurité est calculé à partir du facteur de dommage universel, reliant la dose de dommage de déplacements avec l'augmentation du courant d'obscurité. De par sa nature, ce facteur est un coefficient de dégradation moyenne qui masque plusieurs phénomènes physiques contribuant à l'augmentation du courant d'obscurité, notamment le mécanisme de réorganisation des défauts. Afin d'affiner l'estimation de la distribution du courant d'obscurité, les travaux de thèse se sont focalisés sur un moyen de modéliser ce réarrangement des défauts. Le modèle de réorganisation de la matière à base d'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo développé pendant la thèse est présenté dans le chapitre V de ce manuscrit.

Bibliographie du chapitre

[1] « TCAD ». https://www.synopsys.com/silicon/tcad.html (consulté le déc. 19, 2018).

[2] A. K. Jonscher, « Electronic properties of amorphous dielectric films », *Thin Solid Films*, vol. 1, n° 3, p. 213-234, nov. 1967, doi: 10.1016/0040-6090(67)90004-1.

[3] P. A. Martin, B. G. Streetman, et K. Hess, « Electric field enhanced emission from non-Coulombic traps in semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 52, n° 12, p. 7409-7415, déc. 1981, doi: 10.1063/1.328731.

[4] J. L. Hartke, « The Three-Dimensional Poole-Frenkel Effect », *J. Appl. Phys.*, vol. 39, n° 10, p. 4871-4873, sept. 1968, doi: 10.1063/1.1655871.

[5] J. Bogaerts, B. Dierickx, et R. Mertens, « Enhanced dark current generation in proton-irradiated CMOS active pixel sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, n° 3, p. 1513–1521, 2002.

[6] STFC Rutherford Appleton Laboratory, « Introduction to Technology CAD using Synopsys Sentaurus TCAD Tools - Lecture Notes & Workbook ». Microelectronics Support Centre, 2017.

[7] « TCAD Sentaurus Tutorial ». http://www.sentaurus.dsod.pl/sp/sp_j.html (consulté le juill. 30, 2020).

[8] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: Wiley, 1981.

[9] G. A. M. Hurkx, D. B. M. Klaassen, et M. P. G. Knuvers, « A new recombination model for device simulation including tunneling », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 39, n° 2, p. 331-338, févr. 1992, doi: 10.1109/16.121690.

[10] G. D. Watkins, « Intrinsic defects in silicon », *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 3, n° 4, p. 227-235, août 2000, doi: 10.1016/S1369-8001(00)00037-8.

[11] J. C. Bourgoin et N. de Angelis, « Radiation-induced defects in solar cell materials », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 66, n° 1, p. 467-477, févr. 2001, doi: 10.1016/S0927-0248(00)00208-7.
[12] M. C. Ursule, « Compréhension des mécanismes physiques à l'origine des dégradations électriques extrêmes des pixels dans les capteurs d'images irradiés », Toulouse, ISAE, 2017.
[13] K. E. Atkinson, *An introduction to numerical analysis.* Estados Unidos: John Wiley, 1989.
[14] J. R. Srour et R. A. Hartmann, « Enhanced displacement damage effectiveness in irradiated silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 36, n° 6, p. 1825-1830, déc. 1989, doi: 10.1109/23.45375.
[15] P. W. Marshall, C. J. Dale, E. A. Burke, G. P. Summers, et G. E. Bender, « Displacement damage extremes in silicon depletion regions », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 36, n° 6, p. 1831-1839, déc. 1989, doi: 10.1109/23.45376.
[16] O. K. B. Lui et P. Migliorato, « A new generation-recombination model for device simulation including the Poole-Frenkel effect and phonon-assisted tunnelling », *Solid-State Electron.*, vol. 41, n° 4, p. 575-583, avr. 1997, doi: 10.1016/S0038-1101(96)00148-7.
[17] F. Domengie, P. Morin, et D. Bauza, « Modeling the dark current histogram induced by gold contamination in complementary-metal-oxide-semiconductor image sensors », *J. Appl. Phys.*, vol. 118, n° 2, p. 024501, juill. 2015, doi: 10.1063/1.4922969.

Chapitre V : Etude la réorganisation des défauts cristallins avec le temps au moyen d'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC)

Au cours du chapitre précédent, l'influence d'une population de pièges hétérogène sur l'estimation du courant d'obscurité a été abordée. Cette première étude a permis de montrer que le choix de la nature des pièges, de leurs propriétés et de leurs proportions affecte l'estimation des effets du champ électrique sur le courant d'obscurité. En conséquence, le calcul de la distribution du courant d'obscurité est directement affecté par la population de pièges considérée. Cependant, le choix des pièges et de leurs proportions a été réalisé arbitrairement, ce qui n'est pas exactement représentatif des défauts créés dans le composant. A l'heure actuelle dans notre outil de prédiction *DAAN*, le courant d'obscurité est déterminé par l'intermédiaire du facteur de dommage universel proposé par *Srour et Lo* [1]. Selon l'hypothèse simplificatrice de proportionnalité entre la dose de dommage de déplacement et le courant d'obscurité, ce coefficient permet de convertir un nombre de déplacements atomiques en courant d'obscurité. Sauf que ce coefficient a été déterminé pour un grand nombre de composants électroniques différents irradiés suivant différentes conditions (fluence, énergie et nature des particules différentes). Ce terme de proportionnalité représente seulement une dégradation moyenne du composant et masque les mécanismes de réorganisation qui peuvent se mettre en place quelques instants après un bombardement de particules énergétiques. Il ne donne donc aucune information sur la nature des défauts et leurs propriétés électriques, données nécessaires pour simuler plus finement l'augmentation du courant d'obscurité ainsi que les effets de champ électrique.

En réalité, une fois que l'énergie thermique s'est dissipée à la suite du pic thermique (cf chapitre II), une partie des paires de Frenkel (paires lacune-interstitiel) ont recombiné. Par la suite, les lacunes et interstitiels qui ont survécu commencent à migrer au sein de la matière. Ce processus de migration s'étend sur des échelles de temps beaucoup plus grandes que le pic thermique (quelques secondes voire quelques heures). Au cours du temps, leur diffusion au sein de la matière peut leur permettre de se rapprocher les uns des autres et de se situer à une distance suffisamment petite pour interagir ensemble (de l'ordre de quelques Å). On compte deux mécanismes principaux par lesquels ces défauts primaires peuvent interagir. Soit les paires de Frenkel vont recombiner et ainsi le matériau va guérir, soit deux défauts vont s'associer pour former un défaut complexe avec des propriétés électriques et migratoires qui lui sont propres. Ces défauts complexes peuvent ensuite migrer dans la matière et interagir avec d'autres défauts voisins à proximité par le biais de ces réactions. Dans l'optique d'estimer avec suffisamment de réalisme ces processus de réarrangement de la matière pour connaître la population de défauts à un temps donné après irradiation (quantité, nature), il est nécessaire de développer un modèle spécifique. Il existe aujourd'hui des méthodes numériques permettant d'étudier la structure individuelle de différentes espèces de défauts, de calculer le niveau d'énergie introduit dans la bande interdite du semi-conducteur et d'analyser la diffusion de ces espèces au sein d'un volume de simulation. Néanmoins, ces différents aspects sont souvent étudiés séparément et ne sont pas mis en lien avec le calcul de la distribution du courant d'obscurité après irradiation. Récemment, *Raine et al.* [2] et *Jay et al.* [3], [4] ont proposé une chaîne de simulation reprenant chacun de ces aspects pour expliquer l'origine des pixels RTS (Random Telegraphic Signal) et de quantifier l'amplitude et le nombre de ces niveaux RTS dans un pixel.

Afin de répondre à la problématique spécifique du calcul du courant d'obscurité, un algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) a été développé au cours de la thèse. L'algorithme KMC décrit dans ce chapitre se place dans un premier temps dans l'approximation d'une répartition uniforme de défauts dans le volume de simulation. Cela permet d'étudier le modèle pour un cas simplifié et de le

valider. L'objectif final est d'appliquer cet algorithme à des cascades de dommage engendrées par des noyaux de recul énergétiques (cf chapitre VI), hypothèse plus réaliste qu'une distribution uniforme de défauts. La comparaison entre le cas simplifié et le cas réaliste permet également de constater si des approximations peuvent être réalisées ou non. A partir des résultats de simulation fournis par cet algorithme, nous serons en mesure d'identifier la nature et la proportion des défauts cristallins électriquement actifs que l'on peut rencontrer après des temps de guérison de l'ordre du mois.

Dans ce chapitre, un bref état de l'art des méthodes de simulation de l'effet des radiations sur la matière cristalline est présenté. Le principe de fonctionnement de l'algorithme KMC pour le cas simple de la recombinaison des paires de Frenkel sera explicité dans un second temps. A partir de cette base, les étapes de développement d'un modèle dédié à l'étude de la recombinaison et de l'association de défauts utilisant la méthode KMC sont détaillées dans la troisième partie de ce chapitre. Le protocole de validation du modèle est ensuite présenté, avant de terminer sur la description des résultats de ce modèle et des informations accessibles à la fin de ce type de simulation. Cette dernière partie permet d'identifier les informations utiles pour le calcul de la DCNU.

V.1 Les outils courants de modélisation des effets des radiations dans la matière

Les méthodes numériques ont vu le jour grâce à l'augmentation de la puissance des machines de calcul telles que les ordinateurs [5]. Ce type de modèle permet d'étudier à l'échelle atomique le réarrangement de la matière désordonnée. *Srour et Palko* discute de manière extensive cette problématique dans la référence [6]. Comme l'indique *Nordlund* [5], [7], [8], la simulation complète d'une cascade de dommage et de ses conséquences sur les propriétés des matériaux irradiés nécessitent des modélisations multi-échelles, quelques soient les matériaux considérés (métaux, alliages, semi-conducteurs…). *Raine* et *Jay* ont développé une chaîne de simulations multi-échelles et l'ont appliquée à l'étude des pixels RTS dans les imageurs irradiés [2]–[4]. Les auteurs ont fait appel successivement à des méthodes numériques différentes, chacune dédiée à la modélisation d'un processus physique particulier. Nous proposons dans cette section une description des principales méthodes numériques utilisées pour modéliser l'effet des radiations dans les matériaux à l'heure actuelle. De plus amples détails sur le fonctionnement de ces outils ainsi que des méthodes alternatives sont fournis dans les références [5]–[12].

Simulation de la cascade de dommage

Premièrement, il est nécessaire d'établir la distribution spatiale des défauts primaires (paires lacune-interstitiel) dans le matériau en fonction de l'énergie de la particule incidente. Cette étape fait appel à un code de transport Monte Carlo qui modélise les interactions rayonnement-matière, tel que *SRIM* [13] ou *GEANT4* [12]. Ces outils reposent sur l'approximation de collision binaire [15] (Binary Collision Approximation en anglais, abrégé BCA), qui considère qu'une cascade de dommage se déroule selon des collisions successives entre deux objets. *SRIM* dans son mode « Quick calculation » utilise le modèle de Kinchin-Pease [16] et son extension proposée par Robinson [17] pour estimer le nombre de déplacements atomiques générés par un noyau de recul énergétique. On obtient de cette manière un système contenant la trace de la particule énergétique et des paires de Frenkel créées le long de sa trajectoire dans le volume de simulation.

Mise en mouvement des défauts sur des échelles de temps courtes (∼ picoseconde à femtoseconde)

Ensuite, il est possible de donner « vie » au système en simulant notamment les étapes de recombinaison après le pic thermique (cf chapitre II) et en suivant le mouvement des défauts primaires quelques instants après irradiation (de l'ordre de la femtoseconde à la picoseconde). Ce type de

simulation est appelé Dynamique Moléculaire (abrégé DM). Le résultat de ce type d'outil dépend notamment de la manière dont sont modélisées les forces qui agissent entre les atomes. Ces forces peuvent être déterminées au moyen d'un potentiel interatomique analytique ou à partir de calculs de mécanique quantique [5], comme la théorie de la fonctionnelle de la densité, plus connue sous le nom de DFT pour Density Functional Theory [18] en anglais (DFT). La DM permet également d'accéder à la disposition des atomes et à leur énergie potentielle dans le réseau cristallin. Ainsi, ces simulations permettent de donner une description précise des potentiels locaux au sein du volume de simulation.

Evolution des défauts sur des échelles de temps longues (heures, jours voire années)

Dans leurs travaux, *Raine et al.* et *Jay et al.* suivent la migration des défauts primaires ainsi que les interactions qui se déroulent entre eux sur une échelle de temps plus longue (jusqu'à plusieurs jours après irradiation) au moyen d'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo complexe (méthode *k-ART*, *kinetic Activation Relaxation Technique* [11]), qui tient compte de l'environnement énergétique en trois dimensions de chaque défaut établi par les simulations de dynamique moléculaire. Le système évolue grâce à un catalogue où sont répertoriées toutes les configurations atomiques et transitions possibles. L'utilisateur accède ainsi à la nature et au nombre de défauts qui seront responsables de la génération des charges électriques. Ce type de simulation est un cas particulier de la famille des algorithmes Kinetic Monte Carlo (KMC).

De manière plus générale, un algorithme KMC est une méthode permettant de simuler l'évolution temporelle de n'importe quel système avec des taux de transition connus. Ces taux ou fréquences de transition, définissent la probabilité avec laquelle un objet du système peut évoluer de l'état A (dit initial) à l'état B (dit final). En règle générale, ces transitions correspondent à des sauts atomiques dans la matière, mais de tels algorithmes peuvent être utilisés pour modéliser des systèmes plus complexes. Un algorithme de ce type a été développé au cours de la thèse pour simuler la migration des défauts dans la matière suite à une irradiation. Nous détaillerons plus précisément le fonctionnement d'un algorithme KMC dans la section V.2 de ce chapitre, avant de décrire la méthode KMC répondant aux besoins de la thèse dans la section V.3.

Détermination des propriétés électriques des défauts

Enfin, une fois la simulation du processus de réorganisation terminée, il est possible de déterminer le niveau d'énergie introduit dans la bande interdite du semi-conducteur par chaque défaut créé lors de l'étape précédente, ainsi que leur stabilité énergétique, au moyen de calculs *ab initio* [19]–[21]. La DFT peut être utilisée pour effectuer ce type de calcul. Le nombre de défauts impliqués, leur organisation au sein de la maille cristalline et leur stabilité énergétique vont jouer un rôle le niveau d'énergie introduit dans le gap du semi-conducteur (cf chapitre II).

V.2 Description de l'algorithme Kinetic Monte Carlo

Parmi toutes les méthodes présentées dans ce bref état de l'art, c'est l'algorithme de type Kinetic Monte Carlo (abrégé KMC) qui a été sélectionné, car il permet d'atteindre des échelles de temps en accord avec l'objectif des travaux de thèse. En effet, il est aussi bien possible de traiter des petites échelles de temps (de l'ordre de quelques femtosecondes, $10^{-15}\ s$) jusqu'à plusieurs jours (jusqu'à un mois dans notre cas). Cette large couverture en temps est possible grâce au principe de fonctionnement même d'un algorithme Kinetic Monte Carlo (décrit plus en détails dans le paragraphe suivant). En effet, au cours d'une simulation KMC le pas de temps s'adapte aux « objets » présents dans la simulation, en l'occurrence aux espèces de défauts dans notre cas. L'un des avantages de ce type d'algorithme est son adaptabilité aux différentes échelles de temps rencontrées par le système : au fur et à mesure que la simulation progresse, le pas de temps évolue en fonction de la mobilité des

défauts restants dans la simulation. Un autre point fort est son mode de fonctionnement : plutôt que de résoudre de manière analytique des équations complexes sur l'ensemble de tous les défauts simulés pour déterminer quel défaut va migrer à un instant donné, l'algorithme KMC considère que n'importe quelle transition peut se produire de manière aléatoire proportionnellement à la probabilité de migration du défaut au cours d'un temps aléatoire.

De plus, cette famille d'algorithme est populaire et reconnue par de nombreuses communautés scientifiques pour son efficacité et son réalisme vis-à-vis de nombreux domaines de recherches. En effet, des algorithmes KMC ont été développés pour les phénomènes de transport (diffusion d'espèces chimiques en surface ou en volume), pour les structures et propriétés de matériaux (comme la croissance cristalline par exemple, cf chapitre I), la chimie (réaction de catalyse) [22] ou encore la formation de boucles de dislocation dans les métaux irradiés [7], [23]. La méthode Kinetic Monte Carlo est donc bien adaptée à l'étude de la réorganisation des défauts cristallins dans la matière.

Nous nous servons de cet algorithme pour identifier de manière quantitative la nature des défauts cristallins responsables de l'augmentation du courant d'obscurité après irradiation. Puisque nous nous intéressons exclusivement à la nature des défauts présents à des échelles de temps atteignant le mois, nous n'effectuons pas de simulations de dynamique moléculaire pour modéliser les tous premiers instants qui suivent la création de la cascade. Nous suivons les hypothèses définies par *Kai Nordlund* [22], indiquant que même si la phase initiale de recombinaison qui se met en place après le pic thermique n'est pas modélisée de manière entièrement réaliste (voir le paragraphe suivant), les résultats qualitatifs issus de ces hypothèses correspondent néanmoins à la réalité. En revanche, cela ne nous permet pas de calculer précisément les états énergétiques des défauts stables électriquement actifs au moyen de calculs *ab initio*, contrairement aux travaux de *Raine et al.* et *Jay et al.* Cependant, nous utilisons leurs travaux ainsi que d'autres résultats de recherche (modélisations ou mesures expérimentales) de la littérature pour paramétrer les propriétés de migration des défauts dans nos simulations KMC. Les niveaux d'énergie des défauts sont également estimés à partir de résultats de mesures et de simulation, répertoriés dans le Tableau II.3 du chapitre II de ce manuscrit.

Le KMC simple : le cas de la recombinaison

Les cours proposés par *Kai Nordlund* [22] de l'Université d'Helsinki ainsi que les travaux de *Fichthorn et Weinberg* [24] ont servi de base pour développer un algorithme de type Kinetic Monte Carlo qualifié de « simple », c'est-à-dire que cet algorithme ne modélise que la recombinaison des paires de Frenkel. Le but de cet algorithme est de modéliser la cinétique de guérison des paires lacune-interstitiel au cours du temps. Pour cela, on ne considère que deux espèces de défauts, les lacunes et les interstitiels, qui réagissent exclusivement selon une réaction de recombinaison (réaction d'annihilation) :

$$I + V \rightarrow \emptyset \qquad \text{(V.1)}$$

La première hypothèse du modèle KMC proposé par *Kai Nordlund* repose sur le critère de distance pour déclencher la réaction de recombinaison. Cela signifie qu'une lacune et un interstitiel doivent se trouver l'un de l'autre à une distance inférieure à un rayon défini par l'utilisateur pour interagir. Cette hypothèse a également été suivie pour le modèle développé pendant la thèse. Du point de vue physique, cela signifie que si un interstitiel est assez proche d'un site vacant, il va pouvoir s'installer sur celui-ci pour retrouver une position normale au sein du réseau cristallin.

On suppose également que les défauts sont répartis uniformément dans le volume de simulation et en nombre égal. D'après le chapitre II (paragraphe II.5.3), nous savons que la cinétique des défauts est régie selon la probabilité de migration ayant pour expression :

$$W_i = w_{0,i}\exp\left(\frac{-E_{m,i}}{k_B T}\right) \quad \text{(V.2)}$$

La probabilité de migration W_i d'un défaut i dans le KMC est décrite selon deux paramètres : l'énergie de migration E_m et la fréquence intrinsèque de saut $w_{0,i}$. Le premier paramètre définit l'énergie que doit fournir le défaut pour franchir la barrière de potentiel pour migrer d'un point A à un point B. Le second paramètre définit la fréquence avec laquelle le défaut va tenter de franchir cette barrière de potentiel (Figure V.1). Le terme W_i représente un nombre de sauts effectués par unité de temps (fréquence), d'où son assimilation à une probabilité de migration (cf chapitre II). Il est nécessaire de connaître au préalable ces paramètres avant de démarrer l'exécution de l'algorithme KMC.

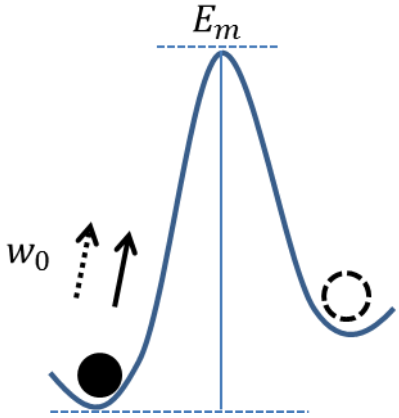


Figure V.1 : Représentation schématique du processus de migration d'un défaut. Pour atteindre sa position finale, le défaut (sphère noire) doit franchir une barrière de potentiel de hauteur E_m. Il tente de franchir cette barrière avec une fréquence w_0.

La fréquence de sauts W_i représente physiquement la capacité d'un défaut à se mouvoir dans la matière. Chaque défaut possède des propriétés de migration uniques qui définissent si un défaut se déplace aisément ou non dans le réseau cristallin. Plus la fréquence de sauts est élevée, plus le défaut est capable de migrer facilement de proche en proche, et donc de diffuser dans le volume étudié. La dernière hypothèse est que le défaut mis en mouvement par l'algorithme va migrer dans une direction aléatoire en trois dimensions. En effet, cette hypothèse est la conséquence du fait que nous nous plaçons dans le cas d'un algorithme KMC dit « off-lattice » (que l'on pourrait traduire de l'anglais par « hors réseau »). Par opposition à un algorithme « on-lattice », la désignation « off-lattice » signifie que le réseau cristallin du matériau étudié (en l'occurrence le silicium) n'est pas modélisé dans nos simulations, et donc que le défaut ne se déplace pas uniquement selon les liaisons atomiques de la maille cristalline. Puisque nous étudions la migration des défauts interstitiels ou des complexes de défauts qui ne peuvent trouver refuge sur des sites cristallins, les modélisations « off-lattice » sont donc à privilégier. Cela permet également un gain considérable de ressources pour les simulations [5]. Enfin, cette migration aléatoire dans une direction 3D s'effectue selon une distance définie par l'utilisateur en entrée du programme.

Pour résumer, les lacunes et les interstitiels sont disposés de manière aléatoire et uniforme en nombre égal dans un volume de simulation. A chaque espèce sont attribuées ses propriétés de migration, le rayon avec lequel le défaut va migrer ainsi que le rayon d'interaction entre deux espèces.

A partir de ces informations, il est possible de décrire l'algorithme KMC, qui suit le schéma suivant [22] :

0a°) Mise en place des lacunes et des interstitiels dans le volume de simulation. Le temps de simulation t est initialisé à 0. Dans ce chapitre, les défauts sont répartis aléatoirement de manière uniforme dans le volume de simulation.

0b°) Une fois les défauts implantés, on vérifie qu'il n'y a pas déjà des lacunes et des interstitiels situés à une distance inférieure au rayon de recombinaison défini par l'utilisateur (Figure V.2). Cette étape est qualifiée de « recombinaison initiale ». D'un point de vue physique, cette étape de simulation s'apparente au processus de recombinaison de paires de Frenkel qui suit lorsque l'énergie thermique du pic thermique se dissipe (cf chapitre II). Les paires de Frenkel proches vont donc disparaître du système.



Figure V.2 : Illustration d'une réaction de recombinaison. Si la lacune (sphère blanche) et l'interstitiel (sphère noire) sont situés dans une sphère dimensionnée par le rayon de recombinaison défini par l'utilisateur, ces deux entités vont s'annihiler (figure de gauche). Sinon, ces deux entités restent telles quelles (figure de droite).

1°) Ensuite, il faut établir la liste des taux de transition (fréquence de sauts W_i) de tous les lacunes et les interstitiels présents dans le volume de simulation

2°) Calcul de la fonction cumulative $R_j = \sum_{i=1}^{j} W_i$ pour $j = 1, \dots, N$, avec N le nombre total de lacunes et d'interstitiels dans le volume de simulation (Figure V.3). On note $R = R_N$ pour simplifier l'écriture. Le terme R correspond à la fréquence totale de sauts du système.

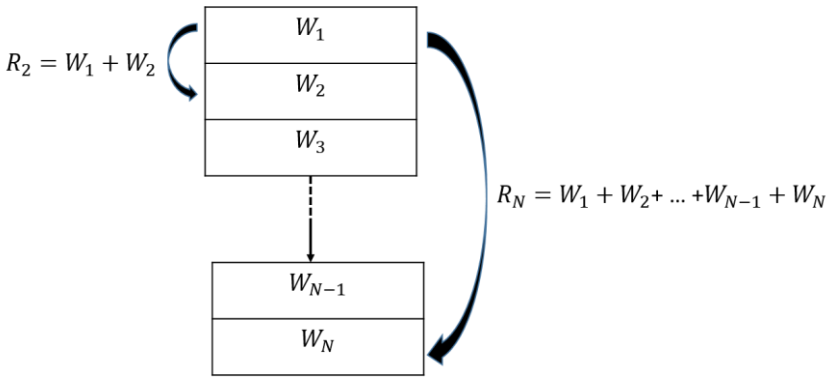


Figure V.3 : Liste des défauts simulés dans le KMC. Chaque espèce de défauts possède ses propres propriétés de migration. La fonction cumulative est la somme de la fréquence de sauts (W_i) de chaque défaut présent dans le volume de simulation. A chaque fin d'itération de l'algorithme KMC, la liste est mise à jour et la fonction cumulative est recalculée.

3°) Tirage aléatoire d'un nombre u selon une loi uniforme dans l'intervalle $[0\ ;\ 1]$.

4°) Recherche dans la liste de défauts du défaut correspondant au critère suivant :

$$R_{j-1} < u \times R \leq R_j \tag{V.3}$$

Cette étape (ou « step ») permet de sélectionner aléatoirement le défaut qui va migrer au cours de cette itération de l'algorithme en fonction de sa fréquence de sauts (voir Figure V.6).

5°) Sélection aléatoire des angles θ et φ pour calculer la direction de migration du défaut sélectionné selon un rayon défini par l'utilisateur au préalable r_{jump}. Par défaut, le rayon de migration est fixé à $2{,}35$ Å, car il s'agit de la distance entre deux atomes plus proches voisins dans une maille de silicium. Au cours de cette étape, on considère que le défaut sélectionné va migrer dans le réseau selon le rayon de saut. *Nordlund* considère que si la lacune ou l'interstitiel sort du volume de simulation, le défaut est perdu et ne fait plus partie de la simulation. Le rayon de saut est un paramètre pour lequel il faut prêter attention, puisque si le rayon de saut de la lacune ou de l'interstitiel (ou d'un défaut en général) est trop grand par rapport au volume de simulation, le défaut considéré peut rapidement atteindre les limites du volume de simulation. La méthode de gestion des défauts sortants du volume de simulation sera décrite dans le paragraphe V.3.4.

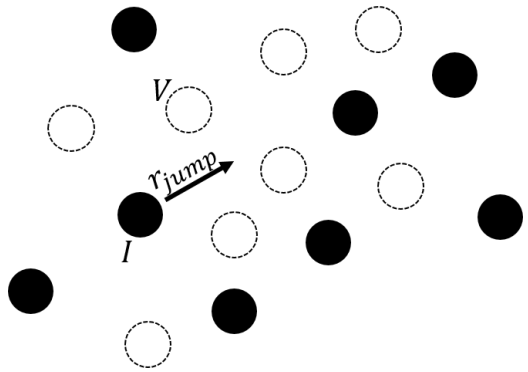


Figure V.4 : Une fois le défaut sélectionné, il « saute » dans une direction aléatoire dans une sphère de rayon r_{jump}. Chaque saut est effectué de manière indépendante. Un seul saut est réalisé par itération.

6°) Une fois la migration terminée, on cherche dans une sphère de rayon r_{rec} centrée sur le défaut qui vient de terminer sa migration s'il existe un candidat pour une réaction de recombinaison (Figure V.5). Physiquement, cela revient à tester si le déplacement réalisé par le défaut lui permet d'interagir avec un autre situé à une distance de l'ordre du paramètre de maille de silicium. Cette étape peut être coûteuse en temps de calcul si elle n'est pas optimisée, car l'opération classique de recherche implique de tester tous les défauts du volume. Une optimisation de cette étape par méthode *octree* est proposée au paragraphe V.3.7. De manière standard, on considère que le rayon de recombinaison entre une lacune et un interstitiel est égal à 4 Å. Cette distance est considérée comme plutôt réaliste même si en réalité le rayon de recombinaison peut varier. Il faut rester vigilant sur la valeur du rayon de recombinaison par rapport au système étudié. En effet, dans notre cas un rayon de recombinaison important conduirait à une recombinaison totale très rapide, ce qui n'est pas représentatif des processus de guérison dans le silicium. A l'inverse une valeur trop faible conduirait à un système qui n'évoluerait pas, puisque la lacune et l'interstitiel devrait se trouver à une distance très petite l'un de l'autre pour recombiner, ce qui ne serait pas réaliste non plus.

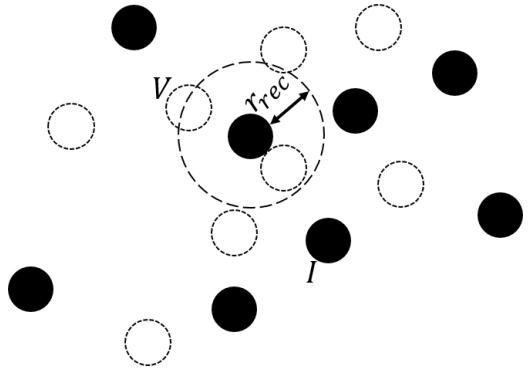


Figure V.5 : Une fois que le défaut a migré, l'algorithme KMC teste s'il existe des candidats pour une recombinaison. Le défaut le plus proche est celui qui sera sélectionné.

7°) S'il existe au moins un candidat, on sélectionne celui le plus proche du défaut testé. Sinon aucune action n'est effectuée. Cette étape revient à déterminer avec quelle entité va interagir le défaut qui a terminé sa migration. Nous supposons dans ce cas que l'attraction entre une lacune et un interstitiel est maximale lorsque la distance est minimale. La liste de défauts est ensuite mise à jour, et si une recombinaison a eu lieu, $N = N - 2$.

8°) Tirage aléatoire d'un nombre u' selon une loi uniforme dans l'intervalle $[0\ ;\ 1]$, puis le temps simulé est mis à jour $t = t + \Delta t$, avec :

$$\Delta t = -\frac{\ln u'}{R} \tag{V.4}$$

D'après l'équation (V.4), nous constatons que le pas de temps est inversement proportionnel à la fréquence totale de sauts du système. Le pas de temps varie donc en fonction du nombre de lacunes et d'interstitiels (ou de défauts de manière générale) et de la fréquence de sauts que l'utilisateur leur a attribuée. Cette étape est démontrée en Annexe B.

9°) Fin du step, le nombre d'itérations est mis à jour $N_{iter} = N_{iter} + 1$, puis on répète l'algorithme depuis l'étape 1 jusqu'à un critère d'arrêt défini par l'utilisateur. Ce critère peut être par exemple un nombre maximal d'itérations N_{max} (on continue tant que $N_{iter} < N_{max}$) ou alors jusqu'à un temps de simulation maximal (on recommence le KMC tant que le temps t est inférieur à un mois simulé par exemple). Un seul saut est donc réalisé par itération.

Cet algorithme suppose que chaque saut (processus activé thermiquement) soit indépendant des sauts réalisés précédemment par ce même défaut (cf chapitre II.5.3), et que tous les défauts de même nature (interstitiel ou lacune) possèdent la même probabilité de saut en tout temps de la simulation (en d'autres termes la fréquence de sauts est considérée constante au cours du temps pour un même défaut). De cette manière, cet algorithme implique que n'importe quel défaut choisi aléatoirement peut migrer selon une direction aléatoire avec un temps aléatoire (principe de « marche aléatoire », ou random walk en anglais). Le fait de tirer deux nombres aléatoires différents u et u' traduit ce concept de saut (ou « transition ») aléatoire à un temps aléatoire. Il faut préciser cependant que même si chaque saut a une probabilité uniforme de se produire, cette probabilité est proportionnelle à sa fréquence de saut. Ce principe peut être illustré très simplement en représentant les fréquences de saut d'une population de défauts avec des propriétés de migration différentes sur un même axe (Figure V.6). Dans le cadre de cet exemple, nous prenons un cas général d'une population variée de défauts quelconques.



Figure V.6 : Chaque espèce de défaut a une probabilité de saut qui lui est propre. Cette probabilité peut être représentée sous forme de « poids ». Plus ce poids est important, plus la probabilité qu'un défaut soit sélectionné est grande.

Dans le cas présent nous considérons 4 défauts différents numérotés de 1 à 4, possédant chacun une valeur différente de W_i. Sur la Figure V.6 sont représentés l'amplitude ou l'intensité de la fréquence de sauts de chaque défaut sur un même axe. On en déduit aisément que les défauts 1 et 4 possèdent une forte fréquence de sauts comparés aux défauts 2 et 3. Ceci implique que les défauts 1 et 4 ont une probabilité plus grande de migrer que les défauts 2 et 3. L'algorithme KMC permet justement de tenir compte de ces différences de probabilités de sauts grâce à l'étape 4°) présentée plus haut dans ce paragraphe. Lorsque l'algorithme tire uniformément un nombre u compris entre 0 et 1, puis calcule le terme uR, le processus de sélection a plus de chance de sélectionner le défaut 1 ou 4 qui sont mieux représentés par rapport aux autres défauts. On peut comparer cela à une sélection d'un objet en fonction de son « poids ». Le KMC s'assure ainsi que les processus les plus rapides seront tirés plus fréquemment que les plus lents.

Enfin l'étape 8°) permet de comprendre comment un algorithme KMC peut simuler des échelles de temps variées. Au début de la simulation un grand nombre de défauts est présent, et sachant que R dépend du nombre de défauts et de leurs propriétés de migration, la valeur de R au début de la simulation est grande. En conséquence, la valeur calculée de Δt est faible. Au fur et à mesure que des recombinaisons se produisent, les lacunes et les interstitiels disparaissent, et donc la valeur de R diminue avec le nombre d'itérations. Par extension, puisque $\Delta t \propto \frac{1}{R}$ la valeur du pas de temps Δt augmente avec le nombre d'itération si R diminue. Le pas de temps s'adapte donc au nombre de défauts présents dans la simulation ainsi qu'à leurs propriétés de migration.

Finalement avec cet algorithme simple, il est possible de suivre l'évolution du nombre de paires lacune-interstitiel en fonction du temps de simulation ou du nombre d'itérations (Figure V.7). A ce stade, cet algorithme permet seulement d'estimer le pourcentage de recombinaison des paires de Frenkel à un instant donné. Il ne tient pas compte du mécanisme d'association des défauts primaires qui donne naissance à la variété de défauts complexes recensés dans le chapitre II de ce manuscrit. Les étapes de développement qui ont mené à l'élaboration d'un algorithme de type Kinetic Monte Carlo considérant les mécanismes de recombinaison et d'association de défauts sont présentées dans la section suivante.

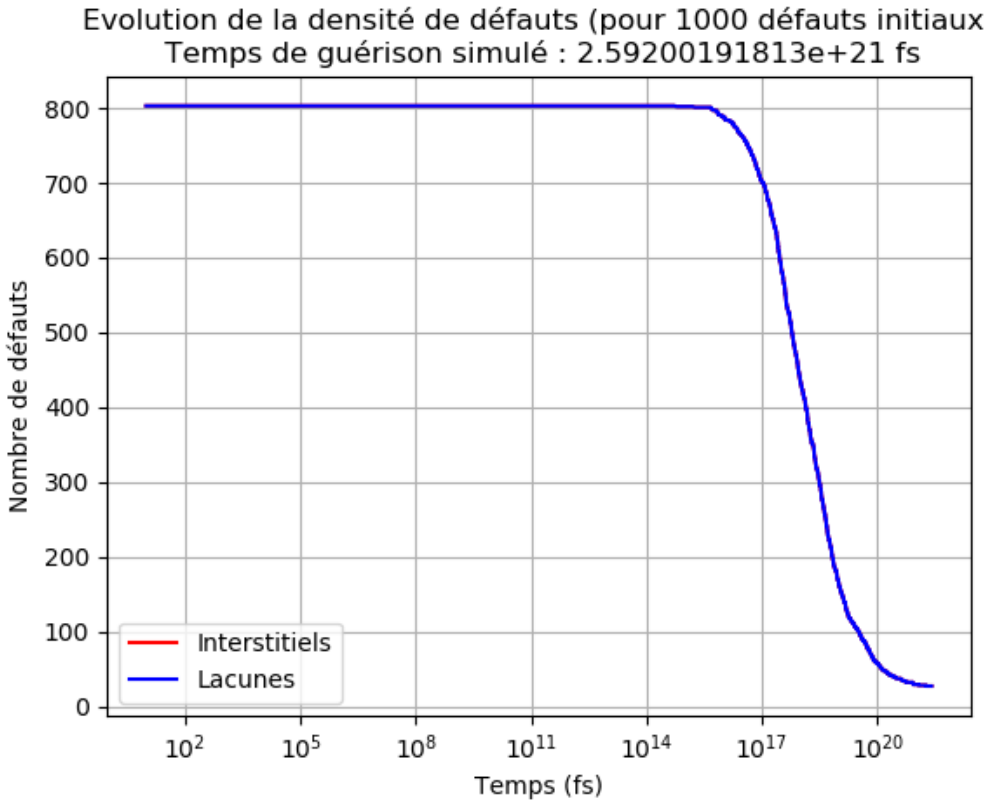


Figure V.7 : Evolution du nombre de lacunes et d'interstitiels en fonction du temps. 1000 défauts étaient implantés à l'état initial, soit 500 lacunes et 500 interstitiels. 100 paires lacune-interstitiel ont recombiné à l'instant initial. A l'état final au bout d'un temps simulé d'un mois, il ne reste qu'une dizaine de paires de Frenkel dans le volume de simulation.

V.3 Développement d'un algorithme KMC pour simuler la recombinaison et l'association des défauts cristallins dans le silicium

Le choix du langage s'est porté sur le Python 3.6 au moyen de l'environnement de développement *Spyder*. Ce langage de programmation interprété est un bon compromis entre vitesse d'exécution et simplicité de la syntaxe de programmation. Il permet surtout d'avoir accès à des modules et fonctionnalités sous une licence libre (« open source » en anglais) de « haut niveau » (par opposition au langage C ou C++ qui sont des langages « bas niveaux », c'est-à-dire qu'il y a peu d'intermédiaires entre le code du développeur et la machine qui exécute les instructions).

Le but de ce paragraphe est de montrer comment le KMC est étendu à la gestion d'autres défauts que la lacune ou l'interstitiel. En pratique, cela revient à reprendre exactement les mêmes étapes de l'algorithme présenté dans la section précédente, en y ajoutant des nouvelles règles et des exceptions. Par exemple, un faible nombre d'impuretés peut être ajouté à l'état initial, et des espèces qui ne sont pas présentes à l'état initial peuvent désormais être produites au cours du temps. Il est donc nécessaire d'établir l'inventaire des défauts que l'on peut créer, des paramètres de migration associés à chaque espèce et des réactions par lesquelles il est possible de créer ces défauts. La gestion du mécanisme d'association nécessite de développer des fonctionnalités supplémentaires pour l'algorithme Kinetic Monte Carlo. Cela impose notamment d'établir des règles pour encadrer les interactions qui sont autorisées. Par exemple un défaut donné ne peut pas s'associer avec n'importe quel autre défaut, et il faut également songer à la taille maximale des agrégats de défauts produits par le KMC, afin d'éviter la création d'un cluster d'une taille irréaliste dans le volume de simulation. Une étude bibliographique a été réalisée afin d'identifier les valeurs les plus pertinentes pour les

paramètres d'énergie de migration $E_{m,i}$ et de fréquence intrinsèque de saut $w_{0,i}$. Certains défauts possèdent une fréquence de sauts W_i tellement élevée qu'ils sont capables de parcourir plusieurs microns s'ils ne rencontrent aucun centre de recombinaison ou d'association, ce qui est le cas notamment des lacunes, des interstitiels et des di-interstitiels (association de deux interstitiels). Les règles de gestion des défauts sortants du volume, que l'on appelle conditions aux limites du volume de simulation, sera explicitée dans les paragraphes suivants. Plusieurs possibilités sont offertes à l'utilisateur pour répartir ces défauts selon une géométrie prédéfinie. Enfin, une optimisation a été nécessaire pour gérer le temps de calcul qui peut devenir conséquent lorsque le système est composé de beaucoup de défauts et sera présentée dans le paragraphe V.3.7.

V.3.1 Gestion des interactions dans une simulation KMC

Afin de modéliser correctement le processus de réorganisation des défauts, il faut tenir compte de la réaction de complexation des défauts. Pour rappel, cette réaction se produit lorsque deux défauts instables se rencontrent et se lient pour former une entité plus stable. Ce sont d'ailleurs ces complexes qui vont le plus souvent introduire des niveaux intermédiaires d'énergie dans la bande interdite du silicium et créer des niveaux électriquement actifs pour participer à l'augmentation du courant d'obscurité (cf chapitre II). Pour réaliser cette opération, une liste de défauts « autorisés » est transmise au programme via un fichier support. Lorsqu'un défaut vient de migrer, l'algorithme cherche si des défauts sont situés dans un rayon donné pour réaliser une interaction, c'est-à-dire soit une recombinaison, soit une association. C'est le même processus que celui présenté en Figure V.5, mais également appliqué à l'association de défauts, et étendu à tout type de défaut. Pour savoir si une réaction peut avoir lieu, il suffit au programme de vérifier si l'association de leur nom est inscrite dans la liste des défauts autorisés (fichier support, voir Figure V.8). Par exemple, si la réaction $V + V_2 \rightarrow V_3$ est potentiellement faisable et que la tri-lacune V_3 est un défaut autorisé dans la liste, alors cette réaction devient une candidate pour l'itération en cours. En revanche, si on n'autorise pas la création de complexes impliquant plus gros (en nombre de défauts) que la tri-lacune ou tri-interstitiel, la réaction $V_3 + V_2 \rightarrow V_5$ ne peut pas avoir lieu, et cette réaction n'est pas retenue pour l'itération en cours. Comme le but de cet outil est de fournir des informations sur les défauts présents 1 mois après irradiation et de simuler le courant d'obscurité associé, nous limitons la taille des défauts produits. En effet, les défauts complexes de grande taille ou les clusters étant très rarement rencontrés pour des temps longs dans le silicium [4], le résultat de l'agrégation de défauts de trop grande taille serait inexploitable dans le cadre de l'étude proposée dans cette thèse. De plus, il se trouve que la structure des clusters ou des défauts impliquant un grand nombre de lacunes ou d'interstitiels ont tendance à évoluer au cours du temps. Ils peuvent soient interagir avec les défauts qu'ils ont capturé, ou se désagréger via le mécanisme de dissociation [23]. La dissociation est un processus qui intervient lorsque l'énergie thermique vient rompre la liaison établie entre deux entités (défauts). Par exemple, une tri-lacune V_3 peut se dissocier en une lacune et une bilacune si l'énergie est suffisante ($V_3 \rightarrow V_2 + V$). La réaction de dissociation se produit si l'énergie fournie au complexe dépasse l'énergie de dissociation E_d. Cette énergie est plus grande que l'énergie de migration E_m [23], [25], [26]. A température ambiante, cette réaction a une faible probabilité de se produire pour les défauts considérés dans nos simulations par rapport au mécanisme de migration. Cette réaction est notamment observée lorsqu'on applique un recuit thermique à un échantillon irradié. Au fur et à mesure que la température s'élève, les liaisons des défauts se cassent (énergie supérieure à E_d) pour former de nouvelles entités plus stables à haute température (cf chapitre II). Dans le cadre de notre étude, la réaction de dissociation est négligée.

Une des limitations d'un algorithme Kinetic Monte Carlo comme le nôtre, contrairement à la technique *k-ART* (section V.2), est que le programme n'est pas fait pour prédire de nouvelles espèces

de défauts. En d'autres termes, le programme ne peut réaliser que des réactions qu'il connaît, alors que la technique *k-ART* permet de prédire des configurations atomiques qui n'étaient pas proposées par l'utilisateur en entrée du programme.

Il est important de préciser que la réaction d'association inclut également le cas que nous appelons la recombinaison « partielle » dans ce manuscrit. Ce cas se produit lorsqu'un défaut complexe rencontre un autre défaut (primaire ou complexe) de nature opposée. Par exemple, si une tri-lacune interagit un interstitiel, le résultat de cette réaction sera une bilacune ($V_3 + I \rightarrow V_2$). Nous considérons dans cette situation qu'une des lacunes qui composent la tri-lacune a réagi avec l'interstitiel par recombinaison, d'où le terme de recombinaison partielle. Cependant, il n'est pas correct d'appeler cette réaction une dissociation, car ce terme désigne une réaction à part entière (voir paragraphe précédent). A noter également que lorsque qu'une association ou une recombinaison partielle a lieu, le défaut « enfant » est situé au barycentre des coordonnées des défauts « parents ».

Pour résumé, à mesure que le système évolue, la liste des défauts présents dans le volume de simulation est mise à jour. En fonction de la réaction qui vient de se produire, soit deux éléments sont supprimés du système (recombinaison) soit un élément est ajouté (association de défauts pour créer une espèce non présente à l'état initial) ou modifié (recombinaison partielle).

V.3.2 Architecture de l'algorithme KMC

L'organisation de l'algorithme a été pensée pour traiter des systèmes différents au moyen de fonctions adaptées aux besoins de l'utilisateur. Le code est organisé selon les règles de la programmation dite « orientée objet ». Cela signifie que le programme est compartimenté en différentes classes indépendantes qui ont chacune un rôle précis, contenant des variables ou des méthodes (fonctions) dédiées à leur rôle. La plupart des classes sont alimentées par des fichiers dits « support » dans lesquels sont contenus les paramètres de simulation. Le fichier d'entrée (le fichier support principal) contient les paramètres de simulation basiques comme le nombre d'itérations maximal, la taille du volume simulé, le temps simulé maximal et les adresses de tous les autres fichiers supports nécessaires au bon fonctionnement du code.

La classe *KMCProperties* contient tous les paramètres de base de la simulation. Elle sert à poser les fondations du système simulé et encadre le déroulement de la simulation. Certaines informations sont ensuite transmises à la classe *DataBaseDefects*, qui sert à collecter toutes les propriétés des défauts qui sont introduits initialement ($t = 0$) dans le volume de simulation : leurs propriétés de migration, leur proportion, leur nom, etc…. A partir de ces deux classes, le programme peut construire le système initial de défauts. C'est donc dans la classe *DefectSystem* que les défauts primaires sont implantés de manière aléatoire selon les conditions données par la classe *DataBaseDefects* dans le volume de simulation défini par la classe *KMCProperties*.

Pour que le système puisse évoluer, il faut lui appliquer des méthodes physiques. La classe *PhysicalInteractions* est une boîte à outils contenant des méthodes permettant d'appliquer au système l'algorithme Kinetic Monte Carlo décrit dans ce chapitre. La fonction de recherche permettant d'identifier le meilleur candidat à une interaction physique a été optimisée selon une méthode *octree* (voir paragraphe V.3.7) Le cœur du programme se situe dans la classe *DefectSystem*. Le système (ou l'objet) issu de cette classe évolue de manière dynamique avec le temps. Ainsi, un suivi du nombre de chaque espèce de défauts est réalisé pour construire un historique sur l'ensemble de la simulation. La classe *DefectSystem* est la partie centrale du programme, puisque c'est dans cette partie du code que sont stockés les défauts que le système est autorisé à créer et leurs propriétés de migration associées.

L'architecture du code est présentée sur la figure ci-dessous :

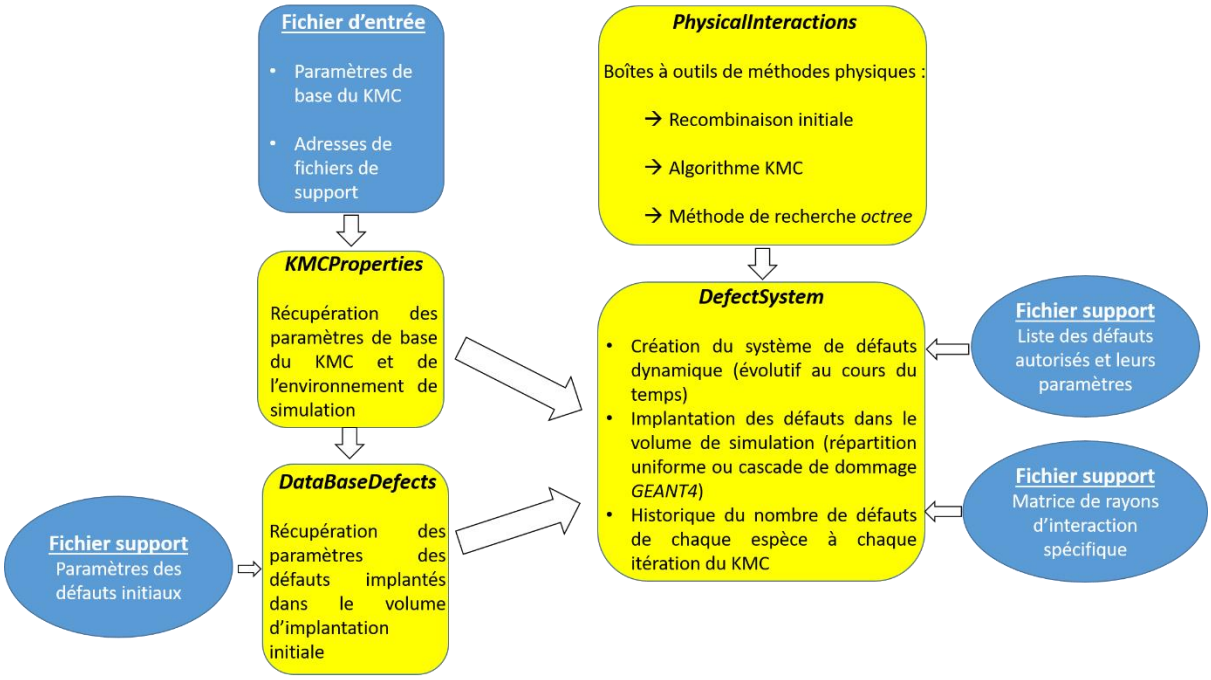


Figure V.8 : Chaque classe est représentée par une case jaune. Les fichiers supports sont représentés par des bulles bleues. Le sens de transfert des informations et des paramètres est représenté avec des flèches. La classe DefectSystem est au cœur du programme car elle centralise toutes les actions appliquées au système de défauts qui évolue avec le temps.

De plus amples détails sont fournis dans les paragraphes suivants, mettant en lumière certaines spécificités du programme développé pour modéliser la réorganisation de la matière désordonnée.

V.3.3 Conditions initiales d'implantation des défauts dans le volume de simulation

Dans ce programme, il est possible de choisir la forme du volume initial de simulation où sont implantés aléatoirement les défauts. L'utilisateur a le choix entre 3 géométries distinctes. La première forme est un pavé droit quelconque. Cette géométrie permet de simuler un échantillon quelconque, mais aussi de simuler une fine couche de silicium, ou bien un pixel. La seconde forme disponible est la géométrie cylindrique. Ce type de volume d'implantation permet de modéliser de manière simplifiée une cascade de dommage créée le long d'une trace d'une particule énergétique. Enfin, la dernière géométrie disponible est une sphère. Une telle géométrie permet de représenter de manière simple une poche amorphe, zone de fort désordre cristallin.

Les dimensions de chaque géométrie sont ajustables par le biais du fichier d'entrée. La classe *KMCProperties* se charge de récupérer ces paramètres pour transmettre l'information à la liste de défauts (également appelée « système de défauts » dans ce manuscrit) qui va être créée (classe *DefectSystem*). L'influence de la géométrie d'implantation sera étudiée plus en aval dans ce chapitre.

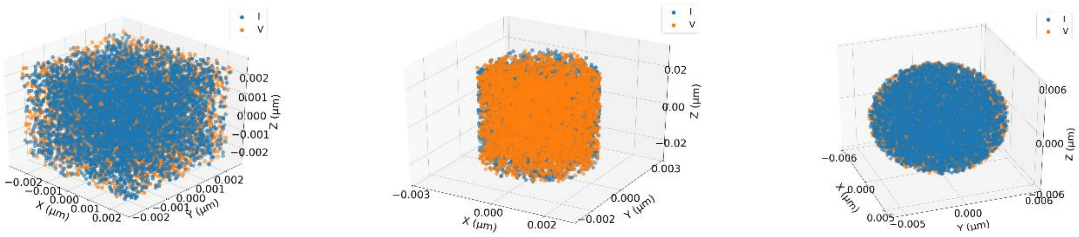


Figure V.9 : Illustrations des différentes géométries d'implantation initiale des défauts. A gauche, les défauts sont implantés dans un pavé droit quelconque. Au centre, les défauts sont disposés selon une géométrie cylindrique. A droite, les défauts sont répartis dans une sphère. Dans tous les cas, les défauts sont repartis uniformément (homogène). Aussi, quel que soit la géométrie, le volume d'implantation est contenu dans une boîte de simulation plus grande. Les dimensions du volume d'implantation et de la boîte de simulation sont ajustables par l'utilisateur.

Il est également possible pour notre programme de traiter des cascades de dommage simulées par notre outil *GEANT4*. Dans ce cas, les dimensions du volume initial d'implantation de défauts sont définies par la topologie de la cascade. Dans cette configuration, la répartition des paires lacune-interstitiel dans le volume n'est pas uniforme. La réorganisation des paires lacune-interstitiel engendrées par une cascade de dommage sera exclusivement étudiée dans le chapitre VI de ce manuscrit. Pour le moment dans ce chapitre, l'utilisation de géométries simples prédéfinies permet d'étudier la cinétique de recombinaison et d'association des défauts cristallins pour des cas simples.

V.3.4 Conditions aux limites du volume de simulation

Une fois les défauts implantés dans le système, la classe *PhysicalInteractions* aura la tâche de faire évoluer ce système, notamment en appliquant l'algorithme Kinetic Monte Carlo présenté précédemment dans ce chapitre. Lorsque les défauts vont migrer dans des directions aléatoires, il est probable que ces défauts se dirigent vers les limites du volume d'implantation initiale. C'est pourquoi une boîte de simulation est codée dans le programme, plus grand que le volume d'implantation initial. Cela permet de suivre l'évolution des espèces même si elles ont quitté le volume dans lequel elles étaient implantées au départ. Mais le problème reste le même lorsque les défauts arrivent aux limites de cette boîte de simulation. Dans ce cas, l'utilisateur a le choix entre deux options : soit le défaut dépasse la frontière du volume de simulation et il est supprimé du système (perte d'éléments), soit le défaut est réinjecté à l'exact opposé du volume de simulation par symétrie sphérique dans le même sens de migration (conservation d'éléments). Cette option est contrôlée par l'utilisateur par un simple booléen dans le fichier d'entrée. Le choix de l'option dépend surtout de la taille de l'échantillon dans lequel on effectue la simulation. Si un petit volume est étudié (quelques nm^3 par exemple), il y a une faible probabilité qu'un volume fictif contenant des défauts se retrouve à proximité de celui étudié et l'hypothèse de la perte de défauts est la plus réaliste. En revanche, à l'échelle d'un pixel (quelques μm^3), la probabilité que deux cascades de dommage se rencontrent est non négligeable, donc on peut supposer que si un défaut est sorti de la boîte, un défaut d'une autre cascade de dommage peut entrer dans la boîte de simulation.

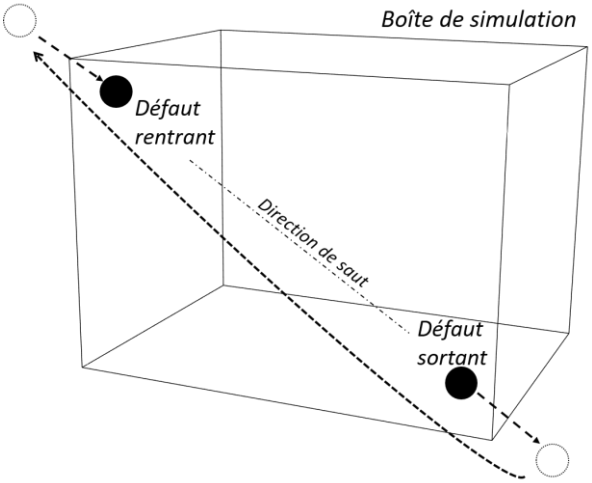


Figure V.10 : Représentation schématique du mécanisme de conservation des défauts par symétrie. Si l'option est activée par l'utilisateur, lorsqu'un défaut sort de la boîte de simulation, il est remis dans le volume de simulation par symétrique sphérique selon la direction de saut du défaut.

D'une autre manière, cette option permet de gagner en temps de calcul. En effet en fonction de la taille de la boîte de simulation, il est probable que des défauts très mobiles (forte probabilité de migration) s'éloignent tellement du volume initial qu'ils n'ont plus aucune chance d'interagir avec le reste du système. Ces défauts étant passifs, ils freinent le temps simulé dans le système. Par exemple, une lacune possédant une forte probabilité de migration, elle a un fort poids dans le calcul de la fonction cumulative R à chaque itération. Si le défaut est supprimé lorsqu'il franchit les limites du volume de simulation, cela permet de diminuer l'amplitude de R, et par conséquent d'augmenter le pas de temps Δt. On évite ainsi de laisser un défaut passif dans la simulation et on peut converger plus rapidement vers le critère d'arrêt, qui est généralement un temps simulé dans notre cas.

V.3.5 La matrice de rayons d'interaction spécifique

Au départ dans l'algorithme KMC conçu initialement, chaque espèce de défauts possédait son propre rayon de recombinaison. Lorsque l'algorithme a été amélioré pendant la thèse pour prendre en compte la réaction d'association, il a fallu définir aussi un rayon d'association de chaque espèce avec une autre. Pour tenir compte du fait que chaque réaction possède son propre rayon d'interaction, une matrice de rayons d'interaction spécifique a été créée. On peut comparer cette matrice à une table de correspondance qui indique le rayon maximal pour lequel deux entités peuvent réagir ensemble. Ce nouveau mode de gestion des rayons d'interaction offre la possibilité à l'utilisateur de moduler la probabilité qu'une interaction se produise. Par exemple, le fait d'augmenter le rayon maximal d'une interaction augmente les chances que celle-ci se produise s'il n'y a qu'une seule réaction possible. La règle permettant de sélectionner le meilleur candidat à une interaction parmi plusieurs défauts est décrite dans le paragraphe suivant. Dans nos simulations, le rayon d'interaction impliquant des défauts de même nature ($V + V \rightarrow V_2$ ou $I_2 + I \rightarrow I_3$ par exemple) est légèrement plus faible (fixé à 3 Å) que le rayon d'interaction impliquant des défauts de nature opposée ($I + V \rightarrow \emptyset$ ou $V_2 + I \rightarrow V$ par exemple) qui est fixé par défaut à 4 Å selon la référence [22]. La valeur du rayon d'interaction impliquant des défauts de natures opposées est fixée arbitrairement (mais du même ordre de grandeur) à une valeur inférieure car, à l'image des interactions coulombiennes entre des charges électriques, des défauts de même nature vont avoir tendance à exercer une force de répulsion, alors que des défauts de natures opposées vont plutôt exercer une force d'attraction [5]. Ce phénomène a été observé dans des métaux pour des défauts de petites tailles (complexes impliquant quelques lacunes ou interstitiels) [27], [28]. En revanche pour des défauts impliquant de nombreuses lacunes ou de nombreux interstitiels (au-delà de 4 environ), la distorsion du réseau engendrée par ces clusters va induire des forces attractives et répulsives selon des directions différentes autour d'eux.

Dans un semi-conducteur tel que le silicium, des défauts de ce type peuvent faciliter l'agglomération de défauts situés à proximité [3]. Cependant pour de longues échelles de temps (plusieurs secondes après irradiation), les clusters de défauts vont avoir tendance à se recristalliser, se recombiner partiellement avec les défauts agglomérés ou se désagréger. C'est pourquoi nous limitons la taille des défauts pour qu'ils ne contiennent au maximum que trois lacunes ou trois interstitiels, et que le rayon d'interaction pour des défauts de natures opposées est plus grand que pour des défauts de même nature.

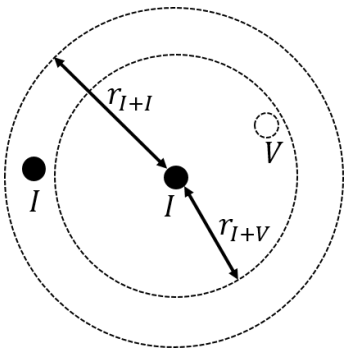


Figure V.11 : Illustration du principe de rayon d'interaction spécifique. La réaction de recombinaison entre la lacune et l'interstitiel possède son propre rayon, et de même pour la formation d'un di-interstitiel.

V.3.6 Prise de décision de l'interaction lors d'une itération KMC

Lors de l'exécution de l'algorithme Kinetic Monte Carlo, il est probable que le défaut qui a migré soit dans le rayon d'interaction spécifique de deux réactions différentes (Figure V.11). Par exemple, une lacune peut se trouver à une distance inférieure au rayon de recombinaison avec un interstitiel, et aussi à une distance inférieure au rayon d'association avec une autre lacune pour former une bilacune. Lorsqu'il y a une compétition entre deux réactions, nous considérons dans l'algorithme que la réaction la plus probable est la plus proche. C'est un choix qui n'est pas systématiquement représentatif de la réalité mais qui au premier ordre permet une bonne approximation.

Plusieurs équipes de recherches développent depuis plusieurs années des outils numériques en se servant d'algorithme de type Kinetic Monte Carlo pour d'autres applications liées à la physique de la matière. Dans leur cas, il se peut que chaque transition ne possède pas exactement la même probabilité de se produire à tout instant de la simulation. Cette probabilité est déterminée en fonction de son environnement ou « paysage » énergétique [10].

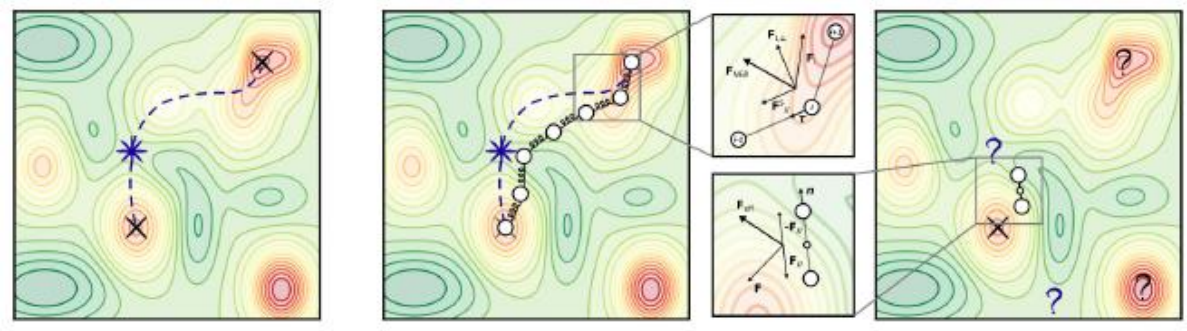


Figure V.12 : Certains algorithmes Kinetic Monte Carlo proposent des critères de sélection plus complexes pour définir quelle interaction est la plus probable. Pour ce faire, « l'environnement énergétique » est modélisé dans leurs simulations, ce qui permet d'apporter plus de réalisme à leurs calculs [10].

En réalité, les liaisons et les interactions électrostatiques entre les défauts et les atomes du réseau cristallins créent un ensemble de barrières et de puits de potentiel en tout point de l'espace. Le choix de l'interaction la plus probable est déterminé en fonction du chemin énergétique le plus favorable

que doit emprunter le défaut pour déclencher une réaction avec une autre entité. Ce chemin est déterminé par des calculs complexes, soit par exemple en estimant le chemin avec les plus faibles barrières énergétiques à franchir, soit en considérant que les interactions électrostatiques exercent des forces similaires à des ressorts qu'il faut minimiser, ou encore en trouvant le chemin où les forces latérales exercées par l'environnement sur le défaut sont minimales lors de sa migration (voir Figure V.12). Les critères varient suivant le domaine d'applications et les équipes de recherche. Cependant, ces calculs sont coûteux en temps et en ressources. C'est pourquoi en première approximation, pour des raisons de simplicité, ces types de calculs n'ont pas été abordés.

V.3.7 Optimisation de la méthode de recherche des défauts cristallins

Au cours du développement du programme, un goulot d'étranglement pour le temps d'exécution du code a été identifié. Dans la version initiale du code, le temps de calcul pouvait dépasser la semaine de simulation lorsqu'un grand nombre de paires de Frenkel étaient implantées (de l'ordre de 5000 paires de Frenkel, soit 10000 défauts individuels à gérer). Ce fort temps de simulation est surtout causé par l'étape 6°) de l'algorithme, c'est-à-dire lorsque l'algorithme cherche tous les candidats potentiels pour réaliser une interaction avec le défaut qui vient de migrer. Auparavant, la recherche de candidats était effectuée dans la liste entière de défauts. En pratique, cette opération revient à réaliser une boucle sur tout le système et tester si le défaut peut interagir avec celui qui vient de migrer. Non seulement cette seule opération est longue, mais elle est répétée à chaque itération de l'algorithme, ce qui la rend également inutilement coûteuse. Pour pallier cela, des méthodes d'optimisation de l'opération de recherche ont été investiguées.

La méthode d'optimisation choisie et intégrée à l'algorithme Kinetic Monte Carlo est la méthode de recherche par « octree » (contraction des mots anglais « octary » et « tree » signifiant littéralement « arbre octaire »). Cette méthode était initialement destinée au secteur de la robotique et de l'automatique [29], avant de s'étendre au domaine des effets spéciaux au cinéma et des jeux vidéo [30]. Le secteur scientifique étant de plus en plus exigeant en termes de coûts de calcul pour les simulations, certains scientifiques commencent à s'intéresser à ce type de protocole de recherche [31]. Elle consiste à diviser récursivement un volume père en 8 sous-volumes fils (aussi appelés cellules) plus petits jusqu'à un seuil défini par l'utilisateur [32]. Ce seuil correspond soit à une « profondeur » maximale de l'arbre (nombre de fois que l'on a sous-divisé le volume père) ou à un nombre maximal d'objets par sous-volume. Une représentation schématique d'un octree ainsi que sa hiérarchie associée est proposée sur la Figure V.13 :

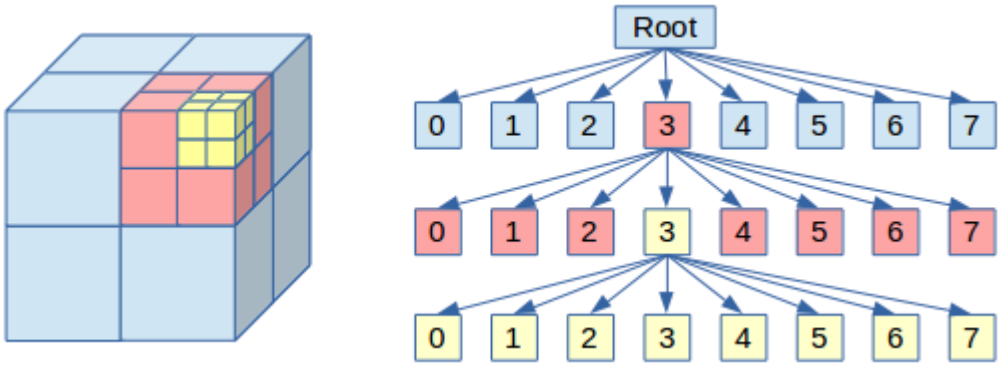


Figure V.13 : Représentation schématique d'un volume divisé selon la méthode « octree ». Le volume père, appelé la « racine » (root en anglais) est sous divisé récursivement en 8 volumes fils jusqu'à un critère défini par l'utilisateur. La profondeur de l'arbre correspond au nombre maximal de fois que l'arbre a été divisé. Sur cette figure par exemple, la profondeur est 3. Si un volume n'est plus sous-divisé alors il est qualifié de « feuille », sinon c'est un « nœud » de l'arbre [32].

Un octree est un système d'information hiérarchisé apparenté à un arbre où les sous-volumes terminaux sont appelés « feuilles » et le volume père le « tronc ». Un volume qui possède un fils et un père est appelé « nœud ».

En procédant ainsi, le volume de simulation est quadrillé et un petit nombre de défauts est contenu dans chaque cellule. L'intérêt de cette méthode est de réduire drastiquement le nombre d'éléments à tester par un algorithme. En conséquence, plutôt que de tester tous les éléments du volume, seuls les cellules situées dans le rayon de recherche défini par l'utilisateur sont testées. Le coût de l'opération de recherche est donc grandement réduit puisque un nombre limité d'éléments est testé. Cependant, l'octree doit être paramétré correctement pour que le gain soit optimal. Il faut trouver le bon compromis entre la profondeur de l'arbre et le nombre d'éléments contenus dans les cellules. En effet si la profondeur de l'arbre est trop grande, l'algorithme va perdre du temps à accéder à la cellule demandée. A l'inverse si l'arbre n'est pas assez profond, beaucoup d'éléments peuvent se trouver dans une seule cellule, occasionnant également un coût pour le calcul qui pourrait être évité. Il existe des moyens pour rendre les octrees encore plus efficaces, mais ils reposent sur des solutions mathématiques complexes [33].

Dans le cadre de la thèse, c'est la librairie sous licence libre *Point Cloud Library* (PCL) [34] qui a été choisie. Cette bibliothèque de fonctions C++ est dédiée à l'optimisation de recherche d'éléments dans des espaces 2D et 3D. Pour pouvoir utiliser cette librairie écrite en C++ dans le programme codé en Python, le module d'interfaçage *python-pcl* est utilisé [35]. L'utilisation de cette librairie dédiée et optimisée a permis de gagner environ un facteur 4 sur le temps d'exécution de l'algorithme KMC.

V.3.8 Choix des propriétés de migration des défauts

Paramètres utilisés pour la thèse

Nom	$\boldsymbol{E_m}$ $\boldsymbol{(eV)}$	$\boldsymbol{w_0}$ $\boldsymbol{(fs^{-1})}$	$\boldsymbol{r_{jump}}$ (Å)
I	0,9	1,717	3,84
V	0,51	$1{,}282 \times 10^{-3}$	2,35
V_2	1,0	10^{-2}	2,35
V_3	1,32	10^{-2}	2,35
I_2	0,28	10^{-2}	1,92
I_3	1,66	10^{-2}	10^{-2}
O_i	2,5	10^{-2}	2,35
C_i	0,8	10^{-2}	2,35
C_iO_i	2,0	10^{-2}	2,35
VO_i	1,85	10^{-2}	2,35
V_2O_i	1,31	$1{,}5 \times 10^{-3}$	2,35
V_3O_i	1,5	$2{,}1 \times 10^{-5}$	2,35

Tableau V.1 : Récapitulatif des paramètres de migration utilisés pendant la thèse. Les propriétés de migration peuvent être très variées d'une espèce à l'autre. Lorsque que certains paramètres ne sont pas connus, ils sont fixés arbitrairement à la valeur par défaut (10^{-2} fs^{-1} pour w_0, 2,35 Å pour r_{jump}).

Dans le cadre de cette étude, nous nous sommes essentiellement appuyés sur les travaux proposés par *Trochet et al.* [12] ainsi que de *Jay et al.* [3] pour fixer la valeur des paramètres d'énergie de migration E_m et de fréquence intrinsèque de sauts w_0, bien que d'autres références aient été utilisées (voir chapitre II). Nous proposons ici de reprendre une partie des paramètres qu'ils ont utilisés pour alimenter le modèle KMC développé au cours de la thèse. Si le paramètre n'est pas connu, ce qui est surtout le cas pour w_0 et r_{jump}, il est fixé à une valeur par défaut. Pour w_0, la valeur standard est fixée à 10^{-2} fs^{-1}, car elle correspond à la fréquence de Debye [36]. Pour r_{jump}, la valeur par défaut

est $2{,}35$ Å, car c'est la distance de l'atome plus proche voisin dans une maille de silicium. Le tri-interstitiel est quant à lui considéré comme quasiment immobile, c'est pourquoi son rayon de migration est très faible (10^{-2} Å).

Etude paramétriques des propriétés de migration

Afin d'estimer l'influence des propriétés de migration des défauts au cours d'une simulation KMC, une étude paramétrique a été réalisée pour les paramètres E_m, w_0 et T. Nous avons dans un premier temps analysé la variation de la probabilité de saut (ou fréquence de sauts) W_i en fonction de la température T pour différentes valeurs de w_0 (comprises entre $10^{-5}\ fs^{-1}$ et $1{,}0\ fs^{-1}$). L'énergie de migration E_m est fixée à $0{,}1\ eV$ (voir Figure V.14). Le paramètre w_0 est étudié sur une large gamme représentative des valeurs trouvées dans la littérature (cf chapitre II).

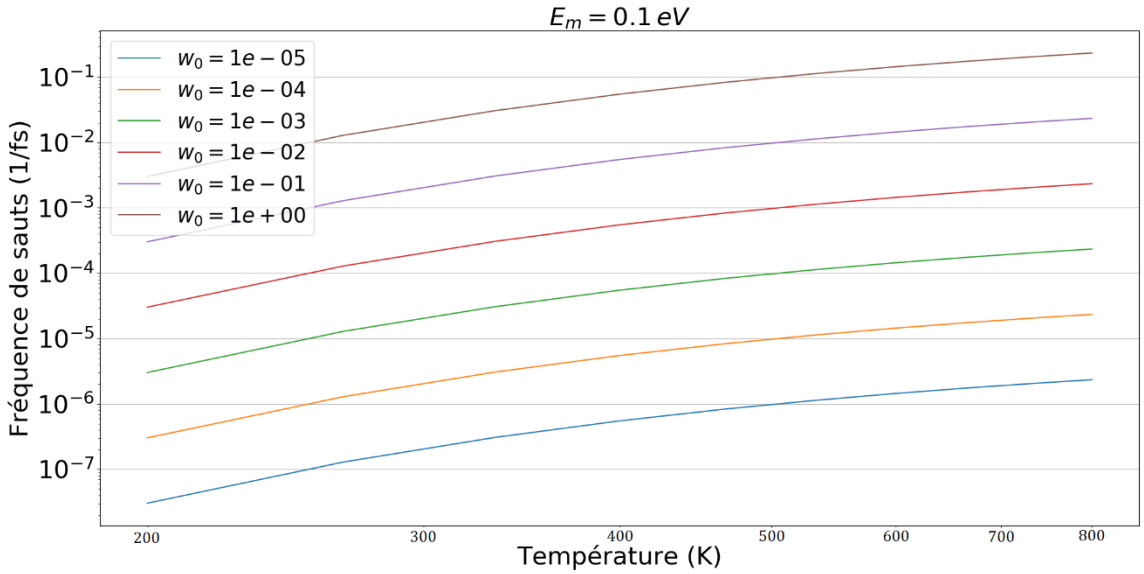


Figure V.14 : Evolution de la fréquence de sauts W_i en fonction de la température pour différentes valeurs de la fréquence de sauts intrinsèque w_0. L'énergie de migration E_m est fixée à 0,1 eV.

D'après la Figure V.14, lorsque w_0 augmente d'un ordre de grandeur, la fréquence de sauts W_i augmente de la même manière. Ceci s'explique aisément par l'expression de W_i, où w_0 est le préfacteur du terme exponentiel contenant l'énergie de migration.

Nous passons ensuite à l'analyse de la sensibilité de W_i en fonction de la variation de E_m, où l'énergie de migration varie également sur une gamme représentative des valeurs trouvées dans la littérature pour des défauts de nature différente (de $0{,}1\ eV$ à $2{,}0\ eV$). La fréquence intrinsèque de sauts est fixée $1{,}0\ fs^{-1}$ et la température varie sur la même gamme que l'étude précédente.

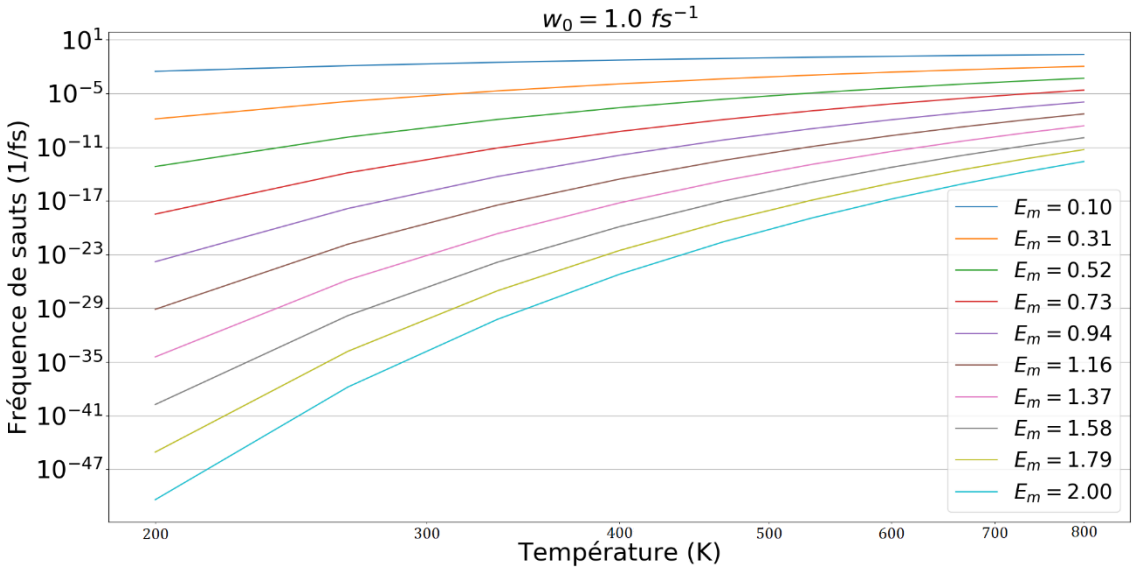


Figure V.15 : Evolution de la fréquence de sauts W_i en fonction de la température pour différentes valeurs d'énergie de migration E_m. La fréquence de sauts intrinsèque w_o est fixée à $1{,}0\ fs^{-1}$.

D'après la Figure V.15, la probabilité de sauts W_i est beaucoup plus sensible à la variation de E_m qu'à celle de w_0. Si l'on se place à température ambiante ($300\ K$), un défaut avec une énergie de migration de $0{,}1\ eV$ à une fréquence de sauts 10000 fois plus grande qu'un défaut avec une énergie de migration d'environ $0{,}3\ eV$. Dans le cas extrême, un défaut avec une énergie de migration de $0{,}1\ eV$ a une fréquence de saut 10^{30} fois plus élevée qu'un défaut avec une énergie de migration de $2{,}0\ eV$. La fréquence de sauts W_i est donc très sensible à la variation de E_m. Du point de vue mathématique, cette observation est logique puisque l'énergie de migration est contenue dans l'exponentielle de l'expression de W_i. Enfin, la sensibilité de W_i à la température est clairement dépendante de l'énergie de migration. Plus l'énergie de migration est élevée, plus la sensibilité est forte. A titre d'exemple, pour un défaut avec $E_m = 0{,}1\ eV$, une augmentation de la température d'environ 60 K ne multiplie la fréquence de sauts W_i que d'un facteur inférieur à 2, alors que pour un défaut avec $E_m = 2{,}0\ eV$, la fréquence de sauts est multiplié par un facteur 10^5. Cela peut s'expliquer physiquement par le fait que la barrière de potentiel est tellement difficile à franchir pour le défaut que le moindre apport d'énergie thermique va permettre d'augmenter grandement ses chances de la franchir.

Selon ces études paramétriques, nous en concluons que l'énergie de migration est le paramètre le plus important pour étudier la cinétique de réorganisation des défauts dans la matière après irradiation.

Puisque nous connaissons désormais l'influence des propriétés de migration des défauts sur l'amplitude de W_i, la fréquence de sauts des défauts considérés au cours des travaux de thèse est représentée en fonction de la température (Figure V.16) :

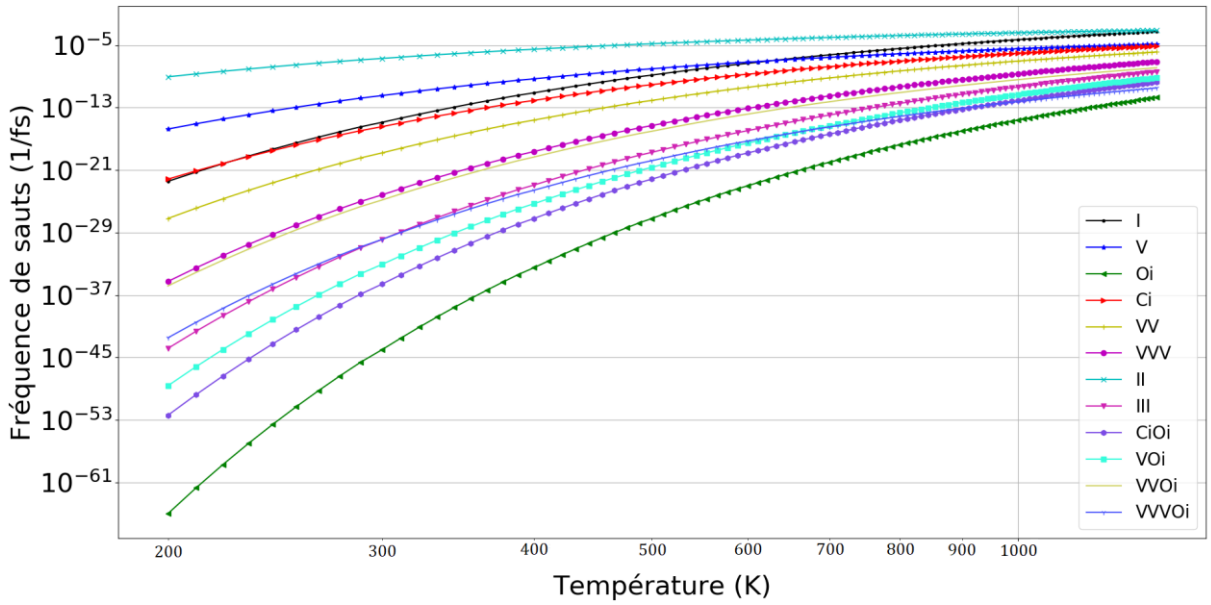


Figure V.16 : Evolution de la fréquence de sauts W_i en fonction de la température pour chaque espèce de défauts considérés pendant la thèse. Les paramètres de migration de défauts sont ceux exposés en Tableau V.1.

Nous en déduisons que la lacune, l'interstitiel et le di-interstitiel sont très mobiles à température ambiante (Figure V.16). Ces défauts ont donc une grande chance de migrer dans la matière et de se rencontrer pour former des défauts plus gros. En fonction de la température, certaines espèces deviennent plus mobiles que d'autres, c'est peut-être une des raisons expliquant que des espèces différentes sont créées au cours du temps lors de recuit thermique (cf chapitre II). L'interstitiel d'oxygène O_i doit franchir une barrière de potentiel tellement élevée pour migrer que sa probabilité de sauts est très faible. A température ambiante, il peut être considéré comme immobile (en moyenne 1 saut tous les 3×10^{21} ans !). En revanche, les complexes lacunaires qui se forment autour de cette impureté sont plus mobiles. On peut considérer qu'à température ambiante, la capture de l'interstitiel d'oxygène par un complexe lacunaire est quasiment le seul moyen pour ce défaut de se mouvoir au sein du réseau cristallin. C'est ce que l'on appelle la diffusion améliorée transitoire, ou Transient Enhanced Diffusion en anglais (plus de détails sont fournis dans le chapitre II). On remarque également que de manière globale, les défauts complexes présentent une fréquence de sauts plus faible que les défauts primaires (à l'exception du di-interstitiel), ce qui les rend plus stables et donc potentiellement électriquement actifs. C'est pour cette raison qu'expérimentalement, plusieurs jours après irradiation, on n'observe que des défauts complexes. Vu qu'à l'état initial il n'y a que des lacunes, des interstitiels et des impuretés, la cinétique de la guérison du silicium va dépendre des espèces qui vont être créées au fur et à mesure du temps de simulation.

V.4 Validation de l'algorithme KMC

Afin de valider l'algorithme KMC, nous avons comparé le résultat des simulations réalisées par celui-ci avec les travaux de *Amar et al.* [37]. Dans ces travaux, les auteurs ont analysé la quantité d'espèces qui survivent à un processus d'annihilation en fonction du nombre d'entités à l'état initial, et de la différence du nombre d'entités dans chaque population. Dans leur étude, seules deux espèces sont considérées, avec les mêmes propriétés de migration. L'énergie de migration et la fréquence intrinsèque de sauts sont fixées à des valeurs proches de la lacune décrite dans le Tableau V.1. Le rayon

de saut est fixé à $2{,}35$ Å et le rayon d'interaction est égal à 4 Å (rayon de recombinaison classique, cf section V.2). La simulation est effectuée à $300\ K$ pour une durée simulée d'un mois. Lorsque deux entités opposées se rencontrent, elles disparaissent du système. Nous sommes donc dans une situation très proche du KMC simple, où seul le mécanisme de recombinaison entre lacune et interstitiel est considérée. Pour nous placer dans les mêmes conditions que ces auteurs, le rayon de saut de la lacune et de l'interstitiel sont fixées à valeur égale, et les défauts sont répartis uniformément dans la boîte de simulation selon une géométrie sphérique. Les dimensions de la boîte de simulation sont très grandes comparées au volume d'implantation des défauts, et l'option de symétrie est activée afin de conserver les défauts dans la boîte.

Le but des travaux d'*Amar et al.* est de proposer des lois simples pour prédire le nombre moyen de défauts survivants en fonction du nombre de défauts et de la proportion de chaque espèce à l'état initial. On note M_- le nombre moyen de défauts survivants de l'espèce minoritaire, M_+ le nombre moyen de défauts survivants de l'espèce majoritaire, N le nombre total de défauts à l'état initial, Δ l'écart entre le nombre d'interstitiels et le nombre de lacunes et Δ_c le seuil critique ($\Delta_c = N^{\frac{1}{3}}$). Le seuil critique est un critère proposé par les auteurs, permettant de définir dans quelle situation se trouve le système à l'état initial. A partir de cela, les auteurs définissent 4 régimes différents pour des temps longs :

- Si $\Delta < \Delta_c$, $M_- \sim M_+ \propto N^{\frac{1}{3}}$. Dans cette situation, un léger déséquilibre est introduit dans le nombre de défauts à l'état initial, une population est mieux représentée que l'autre. Cependant, l'écart reste faible par rapport au seuil critique. Le nombre moyen final de deux espèces sera proportionnel à $N^{\frac{1}{3}}$.

- Si $\Delta \ll \Delta_c$, $M_- \sim M_+ \sim N^{\frac{1}{3}}$. Cette situation correspond au cas « sous critique ». Il y a très peu d'écart entre la population minoritaire de défauts et la population majoritaire de défauts, donc le nombre de survivants de chaque espèce sera quasiment identique et égal à $N^{\frac{1}{3}}$.

- Si $\Delta > \Delta_c$, $M_- \sim N^{1/6}$ et $M_+ \sim N^{1/2}$. Dans cette situation, le déséquilibre entre la population minoritaire et majoritaire devient de plus en plus important, puisque l'écart entre les deux populations est supérieur au seuil critique. Dans ce cas, ce déséquilibre va conduire à l'extinction progressive de l'espèce minoritaire, mais il restera toujours quelques survivants.

- Enfin, si $\Delta \gg \Delta_c$, $M_- \sim 0$ et $M_+ \sim \Delta$. Cette situation correspond au cas « super critique ». A l'état initial, la population majoritaire domine complètement l'autre. Par conséquent, la population minoritaire tend vers l'extinction complète et la population majoritaire tend vers l'écart initial Δ.

Nous nous sommes placés dans les cas sous critique et super critique pour valider le KMC, et nous avons réalisé 10 exécutions de l'algorithme KMC. Les lois de puissance $N^{1/6}$, $N^{\frac{1}{3}}$ et $N^{1/2}$ sont comparées au nombre moyen final de défauts majoritaires M_+ et minoritaires M_- calculés par notre algorithme KMC. Les simulations sont réalisées pour $N = [100; 1000; 10000]$. La barre d'erreur (ici l'écart-type) des données est reportée sur chaque point de simulation.

L'ensemble de ces résultats est reporté sur la Figure V.17 :

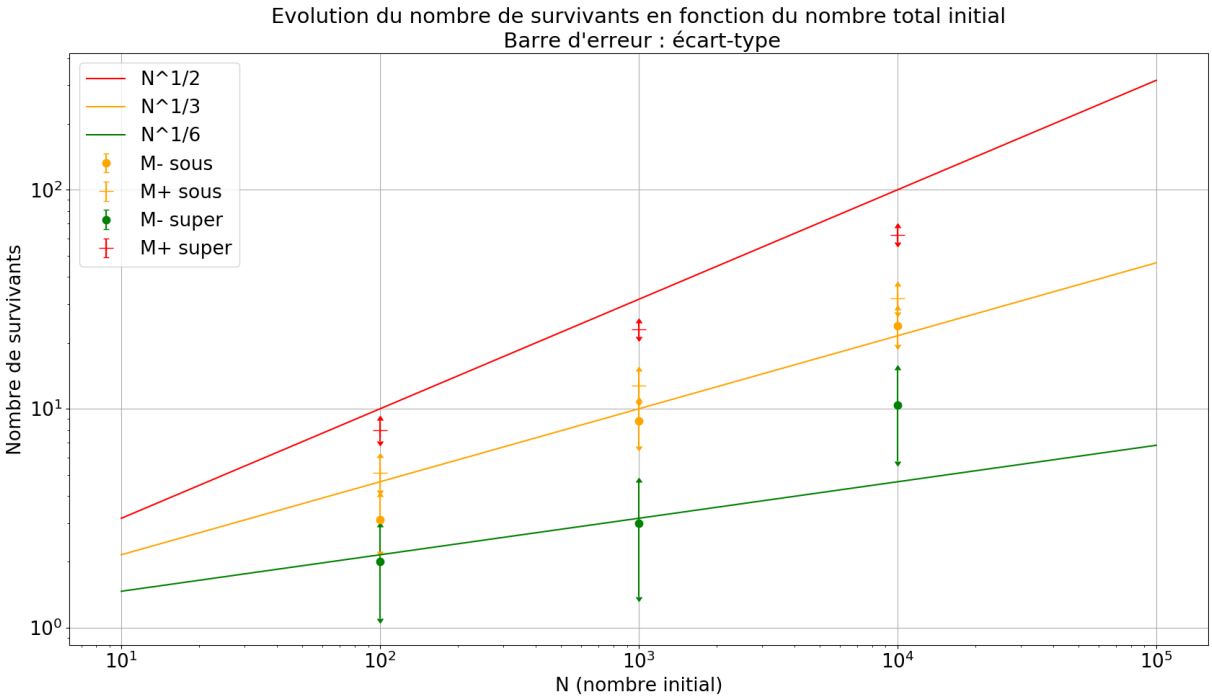


Figure V.17 : Comparaison entre les lois théoriques proposées par Amar et al. (lois de puissance) et les résultats de simulation de notre modèle KMC. Les conditions de simulation ont été choisies pour correspondre au mieux à celles des travaux de ces auteurs. L'écart-type des résultats de simulation est représenté selon une barre d'erreur sur chaque point.

A partir de la Figure V.17, nous pouvons constater que les résultats fournis par l'algorithme KMC sont proches des lois théoriques proposées par *Amar et al.*, que ce soit dans le cas sous critique ou super critique. L'algorithme KMC vérifie de manière satisfaisante le cas sous critique puisque les points et leurs barres d'erreur sont très proches de la droite $N^{1/3}$ excepté pour $N = 10000$. Dans le cas super critique, le nombre moyen de défauts majoritaires survivants M_+ tend vers la droite $N^{1/2}$ sans jamais l'atteindre, alors que le nombre moyen de défauts minoritaires survivants M_- suit bien la droite $N^{1/6}$ sauf pour $N = 10000$. Le fait que le point $N = 10000$ ne soit pas satisfaisant s'explique différemment pour le cas sous critique et super critique. Dans le cas sous critique, c'est ici le temps de simulation qui est mis en cause. En effet, une simulation avec 10000 défauts est très longue pour le KMC (plusieurs jours, voire plus d'une semaine). En conséquence, toutes les simulations n'ont pas systématiquement convergé par rapport à la taille du système. En ce qui concerne le cas super critique, c'est ici la valeur de Δ qui est responsable de l'écart observé. Suivant la valeur de Δ, le système évoluera selon les régimes expliqués plus haut dans ce paragraphe. Il se trouve qu'une légère variation de Δ peut faire basculer le système d'un régime à l'autre. Pour $N = 10000$ et pour cette expérience, le choix de Δ semble conduire le système à évoluer entre deux régimes, celui où $\Delta > \Delta_c$ et $\Delta \gg \Delta_c$. Un autre Δ peut mener à un résultat plus proche du cas théorique super critique.

Malgré ces légères divergences, nous estimons que l'algorithme permet de reproduire de manière satisfaisante les lois théoriques proposées par *Amar et al.*, et l'algorithme KMC est ainsi validé.

V.5 Etude paramétrique sur le taux de guérison

Par extension au protocole de validation, plusieurs études ont été réalisées pour connaître l'influence des paramètres de simulation sur les résultats donnés par le KMC, en particulier sur le taux de guérison. De l'instant initial jusqu'à l'état final, l'historique de l'évolution du système au cours du temps est conservé. Au fur et à mesure des interactions (recombinaisons ou associations), des défauts

vont disparaître ou des espèces qui n'étaient pas présentes à l'état initial vont être créées. Le fait de tracer le nombre de défauts d'une espèce donnée en fonction du temps permet d'analyser la cinétique des différentes réactions qui ont lieu au cours du temps. En analysant l'ensemble des défauts restants, il est possible d'en déduire le taux de guérison de la simulation. Ce taux de guérison est calculé selon l'expression simple :

$$\tau_{guér.} = \frac{Nombre\ de\ défauts\ \text{à}\ l'état\ final\ dans\ le\ volume}{Nombre\ de\ défauts\ \text{à}\ l'état\ initial\ dans\ le\ volume} \times 100 \qquad \text{(V.5)}$$

Le taux de guérison est donc exprimé en pourcentage, et reflète l'intensité du processus de réorganisation : plus le taux de guérison est élevé, moins il y a de défauts à l'état final.

V.5.1 Influence du volume d'implantation des défauts

Les trois géométries disponibles dans l'algorithme KMC ont été testées afin de connaître leur influence sur le taux de guérison. Dans cette étude, nous avons seulement considéré la réaction de recombinaison. Les lacunes et les interstitiels ont les mêmes propriétés de migration. La densité de défauts (nombre de paires lacune-interstitiel par unité de volume) est fixée à 12,5 % pour chaque géométrie. L'influence de la densité de défauts, que nous appelons « taux d'amorphisation » dans la suite de ce manuscrit, sera étudiée plus en aval dans cette section. Nous avons réalisé une moyenne sur 5 simulations KMC par géométrie. Les résultats de cette étude sont répertoriés dans le Tableau V.2 :

Géométrie / N	Cube	Sphère	Cylindre
100	92,5 %	92 %	92 %
1000	97,5 %	98 %	97,8 %
10000	99,4 %	99,4 %	99,3 %

Tableau V.2 : Evolution du taux moyen de recombinaison finale en fonction du nombre de défauts à l'état initial pour différentes géométries d'implantation. D'après cette étude, la forme du volume où sont répartis les défauts n'a pas de conséquence sur l'évaluation du taux de recombinaison final.

D'après cette étude, la géométrie d'implantation des défauts ne semble avoir aucune incidence sur le résultat final. Cette étude n'a pas été réalisée dans le cas où la réaction d'association est considérée, cependant nous nous attendons à des résultats similaires puisque les mécanismes de migration sont identiques pour n'importe quel défaut.

V.5.2 Le calcul du pas de temps Δt

Ce paragraphe est un aspect de l'algorithme plus numérique que physique. Au cours de la simulation, en fonction des espèces encore présentes dans le volume, le pas de temps peut varier brusquement. Cela se produit surtout lorsque des espèces très mobiles (lacune, interstitiel ou di-interstitiel) disparaissent entièrement de la boîte de simulation. En effet, ces espèces peuvent avoir une fréquence de sauts 10^{10} fois plus importante que certains complexes moins mobiles. Puisque le pas de temps est inversement proportionnel à la somme des fréquences de sauts de tous les défauts dans le volume, le pas de temps peut augmenter de plusieurs ordres de grandeur d'une itération à l'autre si une espèce très mobile s'éteint. Il arrive donc parfois qu'une simulation converge très

rapidement vers le temps de simulation cible si toutes les espèces mobiles ont disparu de la boîte de simulation.

V.5.3 Le taux d'amorphisation

Le taux d'amorphisation (équivalent à une densité de défauts) correspond au rapport entre le nombre de défauts dans un volume donné et le nombre d'atomes dans ce même volume. Cela signifie que plus le taux d'amorphisation est élevé, plus la matière est désordonnée dans le volume considéré. Le taux d'amorphisation, inspiré des travaux de *Hernández-Mangas et al.* [38] (exprimé en pourcentage), est calculé selon l'expression suivante :

$$\tau_{amorp.} = 100 \times \frac{N_{paires}}{n_{Si} \times V_{impl.}} \quad \text{(V.6)}$$

Avec N_{paires} le nombre de paires de Frenkel initialement implantées dans le volume de simulation, n_{Si} le nombre d'atomes de silicium par unité de volume ($5 \times 10^{22}\ atomes/cm^3$) et $V_{impl.}$ la taille du volume où sont implantés les défauts à l'état initial. Par défaut dans cette étude, le volume d'implantation des défauts est une sphère. Le volume de la sphère et le nombre de défauts sont adaptés pour obtenir le taux d'amorphisation souhaité. A un taux d'amorphisation donné, le nombre de défauts et la taille du volume augmentent pour garder ce pourcentage constant.

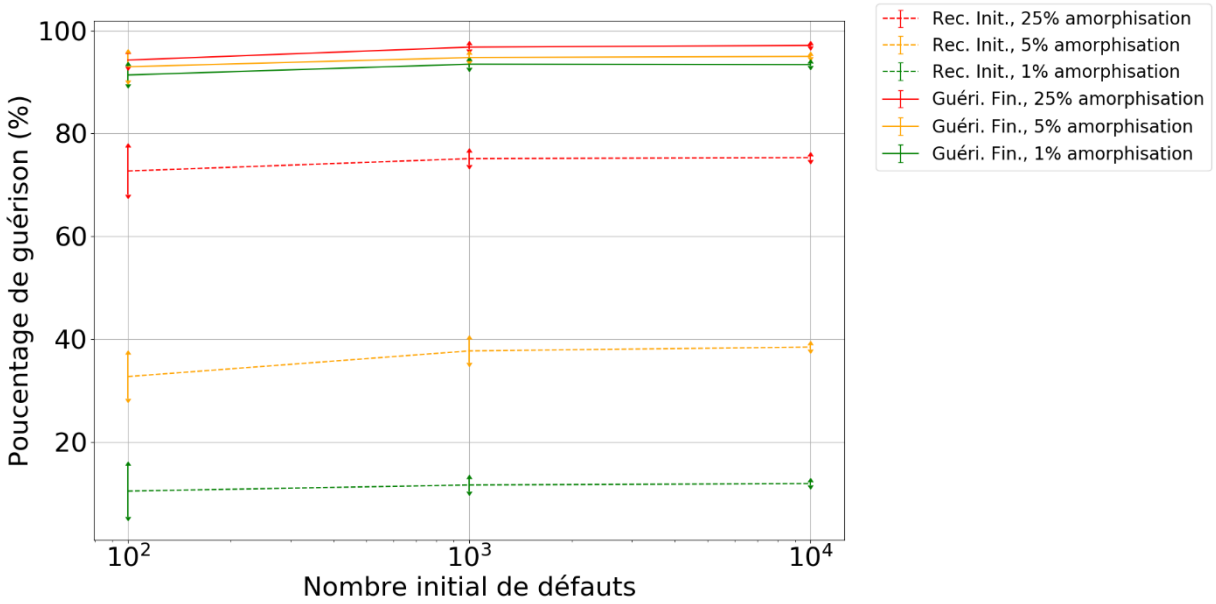


Figure V.18 : Evolution du taux (pourcentage) de recombinaison initiale (en pointillé) et de guérison finale (en trait continu) en fonction du nombre de défauts à l'état initial. Différents taux d'amorphisation sont testés pour évaluer l'influence de cette variable sur les taux de recombinaison initiale et de guérison finale. Les réactions de recombinaison et d'association sont considérées dans ces simulations. La barre d'erreur correspond à l'écart-type sur les données simulées.

Dans le cadre de cette étude, les mécanismes d'association et de guérison sont considérés. Les paramètres de migration des défauts correspondent à ceux indiqués dans le Tableau V.1 de ce chapitre. Le nombre maximal de lacunes ou d'interstitiels impliqués dans un défaut est limité au maximum à 3. De très faibles proportions d'impuretés d'oxygène et de carbone sont également considérées dans ces simulations. En fonction des espèces présentes à l'état initial, la nature des défauts présents à l'état final va varier. C'est surtout vrai dans le cas des impuretés liées aux procédés de fabrication (cf chapitre I), puisque le carbone interstitiel et l'oxygène interstitiel peuvent se

complexer ($C_i + O_i \rightarrow C_iO_i$), et les complexes lacunaires peuvent également s'associer à l'interstitiel d'oxygène pour former des complexes électriquement actifs (VO_i, V_2O_i…cf chapitre II).

Afin d'évaluer l'influence du taux d'amorphisation sur les résultats du KMC, le taux de guérison est tracé en fonction du nombre initial de défauts pour différents pourcentage d'amorphisation. D'après la Figure V.18, plus le taux d'amorphisation est élevé plus le taux de recombinaison initiale est élevé. Ceci s'explique par le fait qu'à l'état initial, la distance moyenne entre les lacunes et les interstitiels diminue lorsque le taux d'amorphisation augmente. Pour 100 défauts à l'état initial, lorsque le taux d'amorphisation passe de 1 % à 5 %, le taux de recombinaison initiale passe d'environ 10 % à 35 %. Si l'on multiplie le taux d'amorphisation par 5 (25 % d'amorphisation), le taux de recombinaison initiale est de l'ordre de 70 %. Le constat est similaire pour un nombre de défauts à l'état initial plus élevé. On observe donc une forte variation du taux de recombinaison initiale avec le taux d'amorphisation à l'état initial.

En revanche, nous remarquons que le taux de guérison final est quasiment identique pour une large gamme de taux d'amorphisation, mais augmente tout de même avec celui-ci (entre 90 % et 96 % suivant le nombre initial de défauts et le taux d'amorphisation). Cette observation est en corrélation avec les travaux de *Hernández-Mangas et al.* [38], qui ont constaté que le taux de guérison d'une poche amorphe augmente avec le taux d'amorphisation. Nous constatons également que l'incertitude sur les points de simulation (écart-type) diminue à mesure que le nombre de défauts augmente. Ceci s'explique par le fait que plus le nombre de défauts augmente, plus la statistique du nombre de recombinaisons augmente et par conséquent le taux de recombinaison tend vers la moyenne. On notera toutefois que pour notre modèle KMC, avec les paramètres utilisés, un taux d'amorphisation inférieur à 1 % rend très compliqué le déroulement des simulations, à cause du grand nombre d'itérations nécessaire avant que deux défauts ne se rencontrent.

Nous remarquons également que le nombre moyen de défauts survivants augmente linéairement avec le nombre de défauts initial pour un taux d'amorphisation compris entre 1 % et 25 %. A partir des résultats de cette étude, nous en déduisons l'expression empirique suivante :

$$N_{fin} \cong \left(1 - \tau_{guér.}\right) \times N_{init} \tag{V.7}$$

Avec $\tau_{guér.}$ le taux de guérison, dans notre cas environ égal à $0{,}94\ (\pm 0{,}015)$, N_{fin} le nombre moyen de défauts à l'état final et N_{init} le nombre de défauts à l'état initial. Cela signifie qu'en moyenne, le nombre de défauts survivants peut être estimé par cette expression simple à une incertitude près. Ce résultat rappelle les travaux de *Amar et al.* étudiés dans la section précédente, puisque nous déduisons une loi simple pour prédire le nombre d'entités qui ont survécu par rapport à un nombre initial dans le cas où les objets peuvent s'annihiler ou s'associer. Nous avons montré que dans le cas d'une répartition homogène de défauts et en autorisant la réaction d'association jusqu'à trois lacunes ou interstitiels, le nombre de survivants suit une loi de proportionnalité avec le nombre initial de défauts suivant le taux de guérison.

V.5.4 Le rôle des impuretés

On peut souligner que les impuretés jouent surtout un rôle de « stabilisateur » pour la simulation KMC. En effet, un défaut comme l'oxygène possède une barrière de potentiel tellement élevée que le temps moyen entre deux sauts successifs est très grand. Même si cette impureté peut s'associer à des lacunes ou des complexes lacunaires pour gagner en mobilité, sa probabilité de saut restera faible. En conséquence, même si les impuretés sont en très faible nombre dans les simulations

(quelques atomes dans un volume, quel que soit le taux d'amorphisation), elles vont avoir une contribution non négligeable dans le calcul du pas de temps Δt. En effet, la fréquence de sauts des impuretés et des défauts associés étant très faible (voir Figure V.16), le pas de temps calculé à chaque itération sera important. De cette manière, lorsque tous les défauts avec une forte fréquence de sauts auront disparu du volume de simulation (lacunes, interstitiels, di-interstitiels), le pas de temps ne va pas « exploser ». Cela signifie que Δt a moins de chance de présenter une forte variation d'une itération à l'autre (différence de plus de 10^{10} ordres de grandeur dans les cas extrêmes) lorsque les défauts qui migrent aisément disparaissent. Les impuretés jouent donc un rôle passif dans les interactions entre défauts, mais un rôle actif du point de vue de la stabilité numérique du code.

Leur influence sur le pourcentage de guérison est négligeable tant que leur concentration ne dépasse pas 3 à 4 % du nombre total de défauts à l'état initial. En réalité, ces concentrations d'impuretés sont très peu probables. Si l'on prend le cas de l'oxygène, qui est une impureté fréquemment rencontrée dans le silicium, sa concentration dépasse rarement $10^{19}\ atomes.cm^{-3}$. En comparaison avec la densité du silicium ($5 \times 10^{22}\ atomes.cm^{-3}$), nous nous retrouvons avec une proportion de 1 atome de silicium pour $0{,}0002$ atome d'oxygène. Si le volume est faible, il est possible de se retrouver dans le cas d'un nombre non entier d'impuretés, ce qui n'est pas possible de simuler. Dans les cas où un faible nombre de défauts est étudié, le nombre d'impuretés est surestimé pour en avoir un nombre entier. Lorsque que l'on traite des petits volumes, le taux d'impuretés est fixé au minimum (par exemple 4 % d'atomes d'oxygène pour 48 % de lacunes et 48 % d'interstitiels pour 100 défauts au total, avec un taux d'amorphisation de 25 % dans une sphère de $1\ nm^3$). Ce biais diminue avec l'augmentation du volume de simulation, mais l'influence de ce biais est négligeable sur l'estimation du taux de guérison. En effet, nous avons seulement observé une baisse du taux de guérison finale de 1 à 2 % dans le pire cas lorsqu'une faible concentration d'impuretés est considérée, à cause du fait que certaines impuretés n'ont pas interagi avec une autre espèce au cours de la simulation.

V.5.5 Conclusions des études paramétriques

Pour conclure ces différentes analyses, nous avons noté dans un premier temps que les taux de recombinaison initiale estimés par notre outil sont moins élevés que ceux observés dans la littérature [3]. En effet, le taux de recombinaison initial varie de 10 % à 35 % pour un taux d'amorphisation raisonnable compris entre 1 % et 5 %, ce qui est sous-estimé par rapport à la littérature qui indique plutôt une valeur autour de 50 %. Dans un second temps, les taux de guérison donnés par notre modèle KMC dans les conditions considérées dans ce chapitre sont légèrement surestimés, puisque l'algorithme KMC fournit un taux de guérison d'environ 94 %, contre 90 % dans la littérature [39].

Une explication de ces différences est notre hypothèse de départ dans ces simulations, qui considère une répartition uniforme de défauts. En réalité les interactions entre une particule énergétique et les atomes du réseau cristallin ne produisent pas forcément des paires de Frenkel de manière uniforme sur son passage. D'un côté, comparée à une cascade de dommage, une répartition uniforme de défauts implique certainement qu'en moyenne la distance entre paires lacune-interstitiel est plus grande à l'état initial, ce qui a pour conséquence de sous-estimer le nombre de recombinaison qui ont lieu à l'étape 0b°) de l'algorithme. D'un autre côté, la répartition homogène de défauts primaires implique qu'un défaut donné présente plus de défauts candidats autour de lui, augmentant la probabilité qu'une réaction se produise et augmentant aussi le taux de guérison. Enfin, il est important de rappeler que les résultats issus des simulations réalisées avec un taux d'amorphisation de 25 % constituent un cas extrême, puisqu'un taux d'amorphisation supérieur à 10 % est déjà une

valeur élevée [38]. Ce fort taux d'amorphisation explique les taux de recombinaison initiale et de guérison importants constatés dans nos simulations qui ne sont pas en strict accord avec la littérature.

V.6 Evolution des populations de défauts en fonction du temps

Afin de vérifier si la population prédite par notre algorithme KMC est cohérente avec la littérature, nous nous plaçons dans un cas proche de celui de *Jay et al.* [3], c'est-à-dire que nous suivons l'évolution d'une population de défauts depuis l'état initial jusqu'à quelques jours. Dans ce cas précis, nous autorisons l'algorithme à créer des défauts impliquant au maximum 4 lacunes ou interstitiels, puisque ces auteurs peuvent également créer des défauts de cette taille voire plus grand.

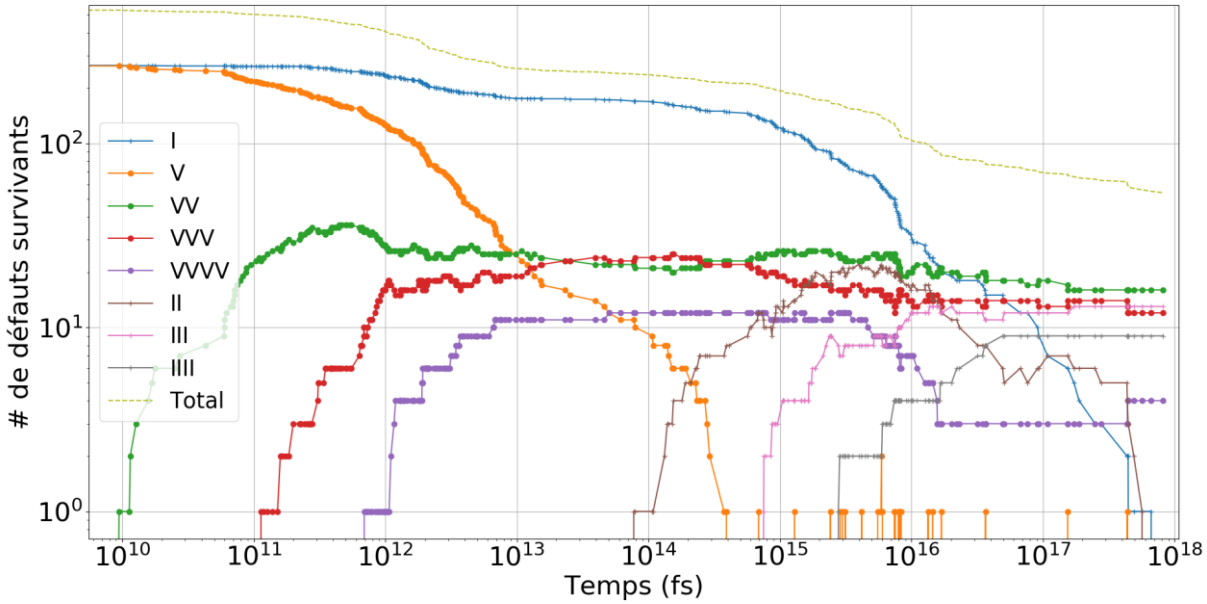


Figure V.19 : Evolution du nombre de chaque espèce de défauts en fonction du temps. 500 paires lacune-interstitiel ont été disposées aléatoirement dans le volume à l'état initial. Pour comparer aux travaux de Jay et al., l'algorithme est autorisé à créer des défauts impliquant au maximum 4 lacunes ou interstitiels. Au bout de quelques minutes de temps simulés, le réservoir de lacunes et d'interstitiels est épuisé. Seuls des défauts complexes comme la bilacune, tri-lacune et tri-interstitiel sont présents. Les quadri-interstitiels ou quadri-lacunes sont en faible nombre. C'est d'ailleurs ce qu'ont observé Jay et al. dans leurs travaux [3], [4]. Les courbes associées aux lacunes et complexes lacunaires sont tracées avec des cercles, celles associées aux interstitiels et aux complexes d'interstitiels avec des croix. Le total est tracé en pointillé.

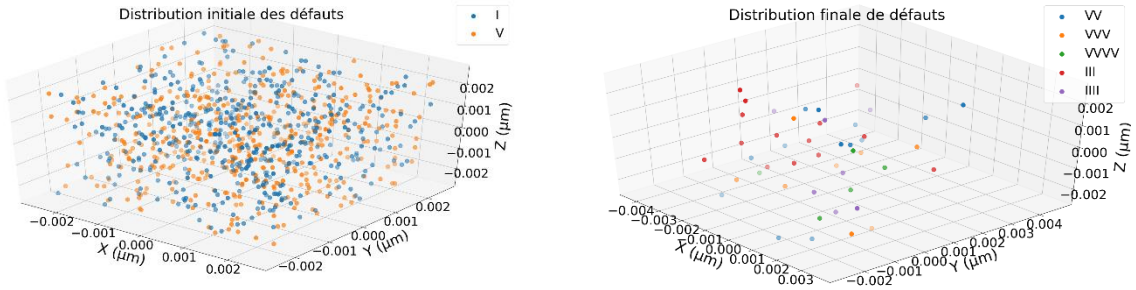


Figure V.20 : Distribution spatiale des défauts à l'état initial (à gauche) et à l'état final (à droite). Le nombre de défauts a drastiquement réduit. Certains défauts ont été créés en dehors du volume initial d'implantation mais sont restés dans la boîte de simulation. Quel que soit la nature du défaut (primaire ou complexe), il est représenté de manière ponctuelle. La transparence des points représente la profondeur à laquelle il se trouve dans le volume.

L'historique de la simulation KMC permet suivre l'extinction des espèces présentes à l'état initial et la production d'autres espèces au cours du temps dans la boîte de simulation. Dans l'historique présenté en Figure V.19, on constate que le nombre de lacunes décroît rapidement après le début de la simulation. Cette décroissance s'explique notamment par la forte mobilité de la lacune dans le silicium. En conséquence, elle sert de réactif pour deux réactions différentes : d'une part les lacunes se recombinent avec les interstitiels voisins, et d'autre part elles s'associent entre elles pour produire des bilacunes. Au bout d'une milliseconde environ, les tri-lacunes commencent à se former grâce à la migration simultanée des lacunes et des bilacunes produites auparavant. En parallèle, les interstitiels commencent à migrer dans le volume de simulation. C'est pourquoi on observe une augmentation progressive du nombre de di-interstitiels puis de tri-interstitiels. Au bout de quelques minutes, les lacunes et les interstitiels ont soit recombiné, soit complexé, soit disparu du volume de simulation si l'option de symétrie n'est pas activée. En ce qui concerne la lacune, son nombre oscille entre 0 et 2 après quelques secondes de temps simulé. Il faut comprendre ici que des lacunes ne sont pas créées : elles proviennent de recombinaisons partielles de défauts complexes. Une fois qu'une lacune est relâchée, elle est aussitôt impliquée dans une nouvelle interaction, du fait de sa grande mobilité. La réaction de recombinaison partielle explique également que de manière générale, l'extinction et la création de défauts au cours du temps ne se font pas de manière monotone. A l'état final, il ne reste que des défauts complexes stables connus pour être électriquement actifs. A titre de comparaison, *Jay et al.* [3] ont constaté qu'avec leur algorithme Kinetic Monte Carlo avancé (technique *k-ART* [11]), il est rare que les défauts impliquent plus de 4 lacunes ou interstitiels. Ces mêmes auteurs affirment également par la suite [4] que les défauts qui vont dominer la génération de charges sont principalement les bilacunes et les tri-interstitiels. Les autres défauts comme les tri-lacunes, quadri-lacunes et quadri-interstitiels vont jouer un rôle mineur à cause de leur nombre plus faible. D'après la Figure V.19, nous reproduisons une tendance similaire avec notre algorithme KMC, puisque les défauts les plus représentatifs semblent être les bilacunes, suivies des tri-interstitiels, puis des autres défauts. Cependant, les auteurs n'ont pas indiqué dans quelles proportions sont représentés ces défauts à la fin de leur simulation. Nous pouvons donc seulement constater que la nature des défauts qu'ils ont identifiés à la fin de leur simulation correspond de manière qualitative à notre estimation. Notre algorithme présente donc des résultats cohérents avec la littérature qui pourront être utilisés pour la prédiction du courant d'obscurité.

On notera également qu'une partie des défauts a été créée en dehors du volume où ils sont répartis initialement. Cela signifie qu'une partie des défauts primaires a migré vers l'extérieur et a interagi en dehors du volume initial. Ceci souligne l'importance du choix des dimensions de la boîte de simulation dans le cas où l'option de symétrie n'est pas activée (perte d'objets au cours du temps). En effet, si la boîte de simulation possède des dimensions très proches du volume d'implantation initiale des défauts, les défauts ont de grandes chances de migrer en dehors de la boîte de simulation et ils seront perdus. A l'inverse, une boîte trop grande sera pénalisante du point de vue du temps de calcul car des espèces avec des grandes fréquences de sauts peuvent migrer très loin des autres défauts et ne jamais interagir, faisant que le pas de temps de la simulation ne va pas augmenter. Le cas optimal consisterait en une boîte de simulation qui présenterait des dimensions satisfaisant les conditions suivantes : d'une part, il faut être sûr que les défauts qui sortent du volume de simulation n'ont qu'une infime probabilité d'interagir avec une autre entité que l'on pourrait négliger, et d'autre part il faut que la boîte soit suffisamment grande pour que les défauts qui ont migré au-delà des frontières du volume initial aient assez d'espaces pour interagir avec les autres. Une étude analysant l'influence du rapport entre la taille de la boîte de simulation et la taille du volume initial serait bénéfique. Elle pourrait permettre par exemple d'établir un critère pour dimensionner de manière optimale la boîte

de simulation par rapport au volume d'implantation des défauts. Si un critère peut être identifié à partir de ce type d'étude, cela permettrait de gagner du temps de simulation et des ressources.

A partir des résultats du KMC, il est possible d'établir une population « type » de défauts en fonction des conditions de simulation. Le rapport entre le nombre final de défauts complexes et le nombre de défauts primaires à l'état initial nous donne accès au taux de guérison. Cependant, il ne faut pas oublier que cet algorithme repose avant tout sur une méthode Monte Carlo. Le résultat d'une seule simulation KMC n'est donc pas représentatif du taux de guérison moyen et du nombre moyen de défauts contenus dans la population finale.

Dans le cadre de notre étude, ce sont les taux de guérison et les proportions de défauts données par les simulations KMC qui vont servir à estimer l'intensité du courant d'obscurité sans utiliser le facteur de dommage universel. Cependant, nous avons vu que le taux de recombinaison à l'état initial était sous-estimé, et que le taux de guérison final est surestimé. Il semble donc nécessaire d'affiner le modèle KMC avant de l'utiliser pour prédire la distribution du courant d'obscurité à partir de la population de pièges type prédite par l'algorithme. Cette amélioration repose sur l'utilisation de cascades de dommage modélisées par *GEANT4* en entrée du code KMC, et sera détaillée au cours du chapitre suivant (chapitre VI).

V.7 Conclusions du chapitre

Au cours de ce chapitre, l'algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) développé au cours de la thèse a été présenté. Le but de cet algorithme est de modéliser la réorganisation des défauts cristallins après irradiation. Il permet d'estimer le pourcentage de guérison qui a lieu dans un volume de simulation, et d'identifier quantitativement les défauts électriquement actifs les plus représentatifs.

Le principe de fonctionnement de base de cet algorithme dans le cas de la recombinaison de paires de Frenkel a été détaillé, ainsi que les fonctionnalités supplémentaires apportées au code pour simuler également la réaction d'association de défauts. Le code a été validé en comparant les résultats de simulation avec une étude disponible dans la littérature, dans la situation de la recombinaison seule.

Ensuite, différents paramètres de simulation ont été étudiés pour connaître leur influence sur le taux de guérison final estimé par le KMC. Il se trouve que la forme du volume d'implantation initiale des défauts n'a pas d'incidence sur les résultats, mais que le choix du taux d'amorphisation (équivalent à une densité de défauts) n'est pas négligeable. En effet, plus celui-ci est grand, plus le nombre de recombinaisons qui ont lieu à l'état initial est grand. En revanche, le taux de guérison final est moins sensible au pourcentage d'amorphisation du volume de simulation. En considérant un volume avec une répartition homogène de défauts et que les interactions possibles sont la recombinaison et l'association de défauts, le nombre moyen de défauts à l'état final montre une relation de proportionnalité entre le taux de guérison et le nombre de défauts à l'état initial.

Enfin, les résultats de cette première version du programme ont été comparés à ceux proposés dans la littérature pour des applications similaires, tenant compte de la recombinaison et de l'association de défauts. En se plaçant dans des conditions de simulation proches de celles employées par les auteurs, la nature des défauts que nous avons identifiés par notre outil KMC comme étant présents après des temps longs de guérison est similaire à leurs prédictions. Il semble donc que la bilacune, le tri-interstitiel et la tri-lacune soient des défauts potentiellement responsables de l'augmentation du courant d'obscurité. En revanche, nous ne sommes pas en mesure de savoir si les proportions de défauts estimées par notre méthode KMC sont similaires à celles de la littérature car il n'y a pas d'informations exactes à ce sujet à notre connaissance.

Même si le code est validé et que l'algorithme présente des résultats encourageants, il se trouve que pour des taux d'amorphisation inférieurs à 10 %, le taux de recombinaison initiale est sous-estimé et le taux de guérison final est surestimé par rapport aux informations fournies dans la littérature. Nous suspectons que cela soit dû en partie à l'hypothèse de répartition uniforme de défauts dans le volume de simulation. Il semble donc nécessaire de considérer une approche plus réaliste pour modéliser la répartition des défauts dans le volume après irradiation.

Dans le chapitre suivant, le programme de modélisation de la guérison des défauts est amélioré pour prendre en compte les cascades de dommage calculées par l'outil de transport dans la matière *GEANT4*. Cette action est réalisée dans le but de calculer un taux de guérison plus réaliste qu'une distribution homogène de défauts. Ainsi, le modèle KMC est appliqué sur une cascade de dommage et non sur un volume où les défauts sont répartis uniformément. Les populations de pièges estimées par le modèle KMC et le taux de guérison obtenu sont ensuite utilisées en entrée de *DAAN* pour calculer la distribution du courant d'obscurité avec ces nouveaux paramètres. Le modèle d'effets de champ électrique 3D étudiés lors du chapitre IV de ce manuscrit sera utilisé sur la population de pièges prédite par le modèle KMC.

Bibliographie du chapitre

[1] J. R. Srour et D. H. Lo, « Universal damage factor for radiation-induced dark current in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, n° 6, p. 2451–2459, 2000.

[2] M. Raine *et al.*, « Simulation of Single Particle Displacement Damage in Silicon; Part I: Global Approach and Primary Interaction Simulation », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 133-140, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2615133.

[3] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single Particle Displacement Damage in Silicon; Part II: Generation and Long-Time Relaxation of Damage Structure », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 141-148, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2628089.

[4] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single-Particle Displacement Damage in Silicon; Part III: First Principle Characterization of Defect Properties », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 2, p. 724-731, févr. 2018, doi: 10.1109/TNS.2018.2790843.

[5] K. Nordlund, « Historical review of computer simulation of radiation effects in materials », *J. Nucl. Mater.*, vol. 520, p. 273-295, juill. 2019, doi: 10.1016/j.jnucmat.2019.04.028.

[6] J. R. Srour et J. W. Palko, « Displacement Damage Effects in Irradiated Semiconductor Devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 60, n° 3, p. 1740-1766, juin 2013, doi: 10.1109/TNS.2013.2261316.

[7] K. Nordlund *et al.*, « Primary radiation damage: A review of current understanding and models », *J. Nucl. Mater.*, vol. 512, p. 450-479, déc. 2018, doi: 10.1016/j.jnucmat.2018.10.027.

[8] K. Nordlund et M. P. Short, « Modeling of Radiation Damage in Materials: Best Practices and Future Directions », in *Handbook of Materials Modeling: Applications: Current and Emerging Materials*, W. Andreoni et S. Yip, Éd. Cham: Springer International Publishing, 2020, p. 2367-2379.

[9] K. Nordlund, « Molecular dynamics method for materials simulations », p. 65.

[10] M. Andersen, C. Panosetti, et K. Reuter, « A Practical Guide to Surface Kinetic Monte Carlo Simulations », *Front. Chem.*, vol. 7, 2019, doi: 10.3389/fchem.2019.00202.

[11] N. Mousseau *et al.*, « Following atomistic kinetics on experimental timescales with the kinetic Activation–Relaxation Technique », *Comput. Mater. Sci.*, vol. 100, p. 111-123, avr. 2015, doi: 10.1016/j.commatsci.2014.11.047.

[12] M. Trochet, L. K. Béland, J.-F. Joly, P. Brommer, et N. Mousseau, « Diffusion of point defects in crystalline silicon using the kinetic activation-relaxation technique method », *Phys. Rev. B*, vol. 91, n° 22, p. 224106, juin 2015, doi: 10.1103/PhysRevB.91.224106.

[13] « James Ziegler - SRIM & TRIM ». http://www.srim.org/ (consulté le août 03, 2020).

[14] « Overview | geant4.web.cern.ch ». https://geant4.web.cern.ch/ (consulté le déc. 05, 2018).
[15] R. Smith, Éd., *Atomic and ion collisions in solids and at surfaces: theory, simulation and applications*. Cambridge, U.K. ; New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1997.
[16] G. H. Kinchin et R. S. Pease, « The Displacement of Atoms in Solids by Radiation », *Rep. Prog. Phys.*, vol. 18, n° 1, p. 1–51, janv. 1955, doi: 10.1088/0034-4885/18/1/301.
[17] M. T. Robinson, « Dependence of radiation effects on the primary recoil energy », Oak Ridge National Lab., CONF-710601--, 1972. Consulté le: sept. 16, 2020. [En ligne]. Disponible sur: http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:4042795.
[18] P. Hohenberg et W. Kohn, « Inhomogeneous Electron Gas », *Phys. Rev.*, vol. 136, n° 3B, p. B864-B871, nov. 1964, doi: 10.1103/PhysRev.136.B864.
[19] A. Luis Santos Ferreira-Resende, « An ab initio Study of Deep-Level Defects in Silicon », PhD Thesis, University of Exeter, 1999.
[20] « ab-initio calculation », *Oxford Reference*. https://www.oxfordreference.com/view/10.1093/oi/authority.20110803095344143 (consulté le août 03, 2020).
[21] A. Gellé, « Ab initio study of electronic structure of the family of incommensurate copper oxide compounds Sr(14-x)Ca(x)Cu(24)O(41). », Theses, Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004.
[22] K. Nordlund, « Kinetic Monte Carlo ». 2006, Consulté le: août 23, 2018. [En ligne]. Disponible sur: http://beam.acclab.helsinki.fi/~knordlun/mc/mc8nc.pdf.
[23] J. P. Balbuena, M. J. Caturla, et E. Martinez, « Kinetic Monte Carlo Algorithms for Nuclear Materials Applications », in *Handbook of Materials Modeling: Applications: Current and Emerging Materials*, W. Andreoni et S. Yip, Éd. Cham: Springer International Publishing, 2018, p. 1-22.
[24] K. A. Fichthorn et W. H. Weinberg, « Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations », *J. Chem. Phys.*, vol. 95, n° 2, p. 1090-1096, juill. 1991, doi: 10.1063/1.461138.
[25] G. P. Gaidar, « Annealing of radiation-induced defects in silicon », *Surf. Eng. Appl. Electrochem.*, vol. 48, n° 1, p. 78-89, févr. 2012, doi: 10.3103/S1068375512010061.
[26] A. O. Evwaraye et E. Sun, « Electron-irradiation-induced divacancy in lightly doped silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 47, n° 9, p. 3776-3780, sept. 1976, doi: 10.1063/1.323260.
[27] D. R. Mason, X. Yi, M. A. Kirk, et S. L. Dudarev, « Elastic trapping of dislocation loops in cascades in ion-irradiated tungsten foils », *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 26, n° 37, p. 375701, août 2014, doi: 10.1088/0953-8984/26/37/375701.
[28] W. Schilling, « Self-interstitial atoms in metals », *J. Nucl. Mater.*, vol. 69-70, p. 465-489, févr. 1978, doi: 10.1016/0022-3115(78)90261-1.
[29] G. Garcia et J. F. L. Corre, « A New Collision Detection Algorithm Using Octree Models », in *Proceedings. IEEE/RSJ International Workshop on Intelligent Robots and Systems '. (IROS '89) 'The Autonomous Mobile Robots and Its Applications*, sept. 1989, p. 93-98, doi: 10.1109/IROS.1989.637892.
[30] « Introduction to Octrees », *GameDev.net*. https://www.gamedev.net/articles/programming/general-and-gameplay-programming/introduction-to-octrees-r3529/ (consulté le mars 28, 2019).
[31] M. Karamitros, « Extension de l'outil Monte Carlo généraliste Geant4 pour la simulation de la radiolyse de l'eau dans le cadre du projet Geant4-DNA », PhD Thesis, Bordeaux 1, 2012.
[32] « octree | The Infinite Loop ». https://geidav.wordpress.com/tag/octree/ (consulté le avr. 01, 2019).
[33] P. Bénet, « Octree optimisés grâce au code de Morton », *Developpez.com*. http://pierre-benet.developpez.com/tutoriels/algorithme-3d/octree-morton/ (consulté le mars 27, 2019).
[34] « Point Cloud Library », *Point Cloud Library*. https://pointcloudlibrary.github.io/ (consulté le juill. 21, 2020).
[35] « Python Bindings to the Point Cloud Library ». https://nlesc.github.io/python-pcl/ (consulté le mai 09, 2019).
[36] L. Bukonte, « Modelling of defect formation and evolution in metals and silicon », 2017.

[37] J. G. Amar, E. Ben-Naim, S. M. Davis, et P. L. Krapivsky, « Extinction and Survival in Two-Species Annihilation », nov. 2017, doi: 10.1103/PhysRevE.97.022112.
[38] J. M. Hernández-Mangas, J. Arias, L. Bailón, M. Jaraíz, et J. Barbolla, « Improved binary collision approximation ion implant simulators », *J. Appl. Phys.*, vol. 91, n° 2, p. 658-667, déc. 2001, doi: 10.1063/1.1424052.
[39] P. W. Marshall, C. J. Dale, et E. A. Burke, « Proton-induced displacement damage distributions and extremes in silicon microvolumes charge injection device », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 37, n° 6, p. 1776-1783, déc. 1990, doi: 10.1109/23.101191.

Chapitre VI: Développement d'une chaîne de simulation pour étudier l'influence de la réorganisation des défauts sur la prédiction du courant d'obscurité

Au cours du chapitre précédent, l'algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) développé pendant la thèse a été décrit. Ce programme est utilisé pour modéliser au premier ordre la réorganisation des défauts selon certaines hypothèses expliquées dans le chapitre précédent. Il permet notamment d'estimer la population de défauts présente à l'état final après un temps de simulation défini par l'utilisateur, ainsi que le pourcentage de guérison des défauts cristallins par rapport à l'état initial. Les hypothèses de calcul choisies précédemment n'étaient pas représentatives de la répartition des déplacements atomiques dans les cascades de dommage générées par des PKA. Malgré cela, notre modèle est en accord avec ce qui est proposé dans la littérature. D'après les résultats du chapitre V, le processus de recombinaison initiale (à l'instant $t = 0$) semble être sous-estimé et le pourcentage de guérison à l'état final semble lui être surestimé. Il est donc nécessaire de prendre une hypothèse de simulation plus réaliste que la répartition homogène de défauts choisie précédemment pour valider le code. Pour rappel, les résultats donnés par cet algorithme serviront à l'outil de prédiction *DAAN* pour estimer la distribution du courant d'obscurité après irradiation sans utiliser le facteur de dommage universel [1].

Nous avons donc couplé le code de transport *GEANT4* à l'algorithme Kinetic Monte Carlo. De cette manière, les simulations KMC sont appliquées sur des cascades de dommage simulées par *GEANT4* et non sur des volumes où les défauts sont uniformément répartis. L'apport principal de ce chapitre est de proposer une chaîne de simulations regroupant *GEANT4* (*ARAMIS*), l'algorithme Kinetic Monte Carlo, *DAAN* ainsi que le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions présenté dans ce manuscrit pour estimer la distribution du courant d'obscurité (cf chapitre IV).

Dans un premier temps, les modifications apportées à l'outil *ARAMIS* (*GEANT4*) et les conditions de simulations pour modéliser les cascades de dommage seront décrites. Afin de connaître la population de défauts « type » et le taux de guérison moyen, il est nécessaire de réaliser une étude statistique sur la guérison des cascades de dommage. Nous présenterons donc dans un second temps la méthode employée pour réaliser cette étude statistique. Enfin dans un dernier temps, les informations issues de cette étude seront utilisées en entrée de *DAAN* pour estimer la distribution du courant d'obscurité associée à cette population de défauts. Le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions dépeint au cours du chapitre IV sera également utilisé pour tenir compte de l'influence du champ électrique sur la population de pièges estimée par l'algorithme Kinetic Monte Carlo. Le résultat de cette chaîne de simulation sera comparé aux données expérimentales déjà présentées auparavant dans ce manuscrit. La contribution de la dose ionisante cumulée (TID) sera également prise en compte pour le composant SAPPHIRE afin d'affiner les simulations à bas niveau de courant d'obscurité. L'incertitude sur la distribution expérimentale du courant d'obscurité sera également calculée, afin d'évaluer si nos points de simulations sont situés dans l'incertitude de mesure.

VI.1 Utilisation de *GEANT4* (application *ARAMIS*) pour simuler une cascade de dommage

VI.1.1 Modifications d'*ARAMIS* pour enregistrer la position des défauts

Afin de modéliser les cascades de dommages créées par le passage des particules énergétiques, l'application *GEANT4 ARAMIS* (cf chapitre III) développée à l'ONERA a été modifiée pour enregistrer les positions des lacunes et des interstitiels créés.

L'application *ARAMIS* est initialement destinée au comptage du nombre de déplacements atomiques créés à la suite d'une interaction nucléaire qui s'est produite au centre d'une matrice élémentaire de pixels (cf chapitre III). Au cours d'une interaction, la particule incidente et les atomes déplacés sont suivis à chaque instant de la simulation. Pour chaque particule incidente simulée, on obtient une collection d'évènements dans laquelle la position et l'énergie de la particule sont enregistrées à chaque fois qu'un atome a bougé. A partir de ces informations, il est possible d'extraire les positions des lacunes et des interstitiels. La position d'une lacune correspond à la première localisation d'un atome déplacé. La position d'un interstitiel correspond au lieu où l'énergie cinétique d'un atome qui a été déplacé a atteint $0\ eV$.

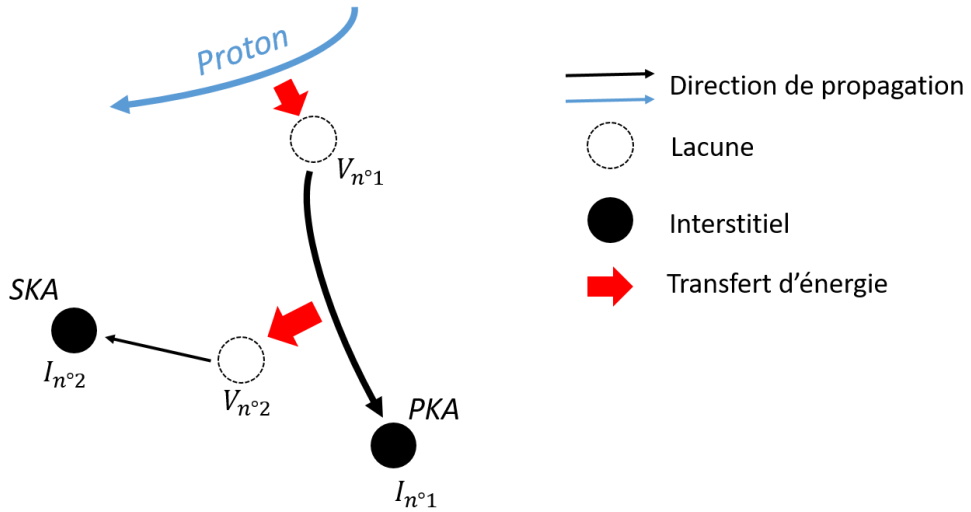


Figure VI.1 : Illustration simplifiée d'une cascade de dommage. L'énergie enregistrée par ARAMIS est la quantité d'énergie fournie à l'atome pour être déplacé. La lacune correspond au lieu où l'atome a été éjecté, l'interstitiel à l'endroit où l'atome n'a plus d'énergie cinétique.

Les positions des couples lacune-interstitiel sont enregistrées dans un fichier formaté de manière à être lu par le programme contenant l'algorithme Kinetic Monte Carlo. L'utilisateur décide s'il souhaite utiliser une cascade de dommage générée par *GEANT4* ou une répartition de défauts uniformes via un booléen dans le fichier d'entrée du programme.

VI.1.2 Conditions de simulation

Dans le cadre de notre étude, nous nous intéressons uniquement à la simulation de cascades de dommage causées par des protons. Plutôt que de suivre les évènements liés à la cascade de dommage dans une matrice élémentaire de pixels, la cascade de dommage est simulée dans un seul pixel de grande taille de façon à contenir la cascade entière.

Afin de s'assurer de ne pas perdre la trace d'un atome déplacé, la particule énergétique n'est pas envoyée depuis l'extérieur du volume de simulation mais plutôt sous la surface à une profondeur

suffisante. De cette manière, si un atome est éjecté en sens inverse de la direction de propagation de la particule énergétique, il n'est pas perdu. L'angle d'incidence de la particule est orienté selon la direction normale à la surface de l'échantillon. Les éventuelles couches latérales et superficielles du pixel ne sont pas prises en compte dans ces simulations. Enfin, pour être en accord avec *DAAN*, l'énergie seuil de déplacement atomique est fixée à la valeur standard de $21\ eV$.

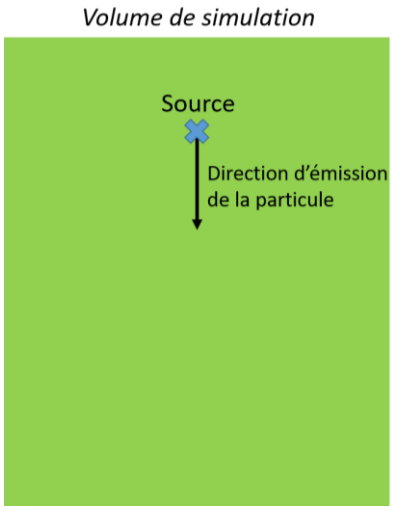


Figure VI.2 : Coupe du volume de simulation dans ARAMIS. La particule est émise dans le volume pour ne perdre des atomes qui pourraient s'être propagés dans le sens inverse de la direction d'émission de la particule.

VI.2 Etude statistique de la guérison des cascades de dommage en fonction de l'énergie incidente de la particule via l'algorithme KMC

De par la nature de l'algorithme Kinetic Monte Carlo, chaque simulation réalisée avec celui-ci donnera un résultat unique. En effet, les défauts sont sélectionnés aléatoirement et migrent également dans des directions aléatoires. De plus, pour une même cascade de dommage, nous n'obtiendrons pas exactement le même résultat à chaque exécution du KMC. Ainsi, chaque PKA d'une même énergie ne conduit pas au même nombre initial de défauts. La forme de la cascade de dommage varie également selon le PKA pour une même énergie. La migration aléatoire des défauts, le nombre initial de défauts différents et la forme différente de la cascade pour une même énergie de PKA engendrent une dispersion statistique sur les résultats d'algorithme KMC. Chaque simulation suit donc un scénario différent, appelé « trajectoire Monte Carlo ». Afin de dégager une tendance et des informations représentatives de ces simulations, il est nécessaire d'effectuer une étude statistique sur celles-ci. Dans notre cas, cela consiste à réaliser plusieurs fois des simulations dans des conditions similaires pour extraire le taux de recombinaison initiale moyen, le taux de guérison moyen, la population type de défauts et l'écart-type associé à ces données.

Même s'il peut paraître intuitif au premier abord de réaliser une simulation KMC sur l'ensemble des défauts produits le long de la trajectoire d'un proton (plusieurs PKA), cela n'est pas réalisable avec les moyens mis à disposition au cours de la thèse. En effet, un proton va générer un ensemble de PKA sur des dimensions qui impose des temps de calcul prohibitif. La cascade de dommage produite par un seul PKA peut contenir des milliers de paires lacune-interstitiel, ce qui peut se révéler déjà long en temps de calcul. Simuler la trajectoire d'un proton conduirait à des jours voire des semaines de simulation dans le pire cas. Afin de contourner le problème, nous avons suivi une démarche différente.

Si l'on fait l'hypothèse que les cascades de dommage de chaque PKA sont indépendantes (ceci est très majoritairement le cas, car les PKA sont produits à des distances éloignées à l'échelle de la taille d'une sous-cascade), une stratégie plus économe en temps de calcul consiste à simuler une

cascade de dommage à partir d'un PKA et non du proton incident. Plutôt que de simuler la trajectoire entière causée par une particule énergétique, on ne modélise qu'une partie des cascades en choisissant un noyau de recul comme précurseur de la cascade. Cette démarche est justifiée par le fait que l'on peut considérer qu'une cascade est un ensemble de sous-cascades créées par les différents PKA. C'est une stratégie très classique également adoptée par *Raine et al.* [2] et *Jay et al.* [3], [4].

VI.2.1 Choix des particules énergétiques pour simuler la cascade de dommage

Une étude bibliographique a été menée afin de connaître l'ordre de grandeur de l'énergie des PKA à simuler dans notre application *GEANT4*. *Wood et al.* [5] estiment selon leurs calculs que des protons de 6 à $10\ MeV$ engendrent des PKA de l'ordre de 1 à $2\ keV$, et des protons de plus de $20\ MeV$ produisent des PKA d'environ 12 à $20\ keV$ (cf chapitre II). *Srour et Palko* [6] affirment également que des protons de $100\ MeV$ produisent des PKA de l'ordre de $10\ keV$. *Raine et al.* [2] ont plus spécifiquement étudié le cas des neutrons. Ils estiment qu'au-delà de $60\ MeV$, les neutrons et les protons vont engendrer des PKA avec des énergies similaires. Pour des hautes énergies, les PKA peuvent avoir des énergies de l'ordre du MeV. Ces ordres de grandeur sont confirmés par les travaux de *Inguimbert et al.* [7], qui ont analysé la distribution de l'énergie des noyaux de recul produits par les interactions nucléaires en fonction de l'énergie des protons incidents. Leurs travaux sont reportés sur la Figure VI.3 :

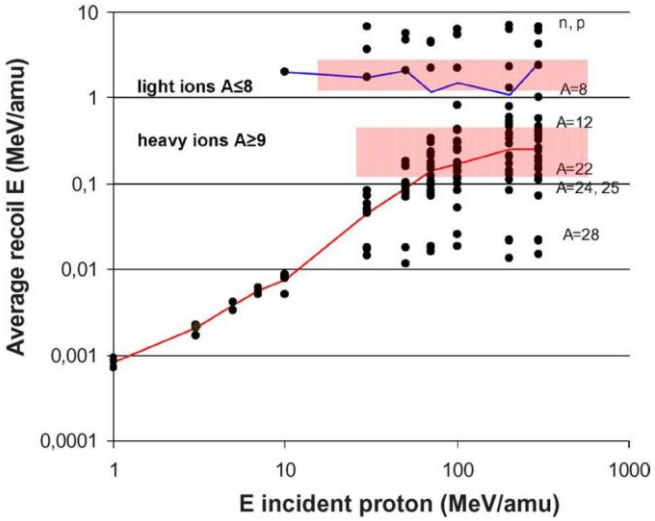


Figure VI.3 : Evolution de l'énergie des noyaux de recul en fonction de l'énergie du proton incident. Les noyaux de silicium correspondent aux points les plus bas (A = 28).

Nous nous basons sur les travaux de *Inguimbert et al.* pour choisir l'énergie des noyaux de recul à simuler. Des simulations *GEANT4* réalisées au cours de la thèse sont en accord avec les ordres de grandeurs cités plus haut.

Le choix de l'énergie du PKA a un impact direct sur les simulations KMC. Par exemple, il est difficile d'effectuer une étude statistique avec des PKA de faibles énergies (inférieures au keV), car ils entraînent seulement des défauts isolés. Par conséquent, en fonction de la cascade de dommage étudiée issue d'un PKA de faible énergie, plusieurs scénarios peuvent se dérouler. Par exemple, si la distance entre les paires de Frenkel est faible, la recombinaison initiale[1] va dominer. En revanche, si les paires de Frenkel sont un peu plus éloignées les unes des autres, il se peut que les lacunes et les

[1] La recombinaison initiale correspond au processus de recombinaison des lacunes et des interstitiels au tout début de l'algorithme KMC (étape 0b°), voir chapitre V. Cette étape élimine les paires de Frenkel qui sont déjà situées à une distance inférieure au rayon de recombinaison. Le taux de recombinaison initiale est égal à la quantité de lacunes et d'interstitiels qui ont recombiné par rapport au nombre total de paires lacune-interstitiel à l'état initial.

interstitiels qui ont survécu à la recombinaison initiale migrent loin de la cascade initiale et n'interagissent jamais entre eux. Enfin, il existe le cas intermédiaire où quelques défauts complexes vont être créés. L'ensemble de ces scénarios fait que plusieurs simulations successives peuvent donner des résultats complètement différents. Il est donc difficile d'estimer de manière satisfaisante un taux de guérison[2] et une population type de défauts en considérant des PKA de faibles énergies.

Afin de réaliser une étude statistique avec un échantillon suffisamment représentatif, c'est-à-dire un échantillon où il se déroule assez d'interactions, nous considérons au minimum une énergie de $1\ keV$ pour les PKA lorsque le proton a une énergie comprise entre $6{,}5\ MeV$ et $10\ MeV$. Nous considérons également des PKA de $10\ keV$ pour être plus représentatif des protons plus énergétiques. Enfin, quelques simulations avec des PKA de $100\ keV$ ont été réalisées à titre indicatif, car les temps de calcul étaient trop longs pour finaliser une étude statistique complète.

VI.2.2 Influence de l'énergie incidente des particules sur le facteur de guérison

VI.2.2.1 Exemple d'une simulation d'une cascade de dommage engendrée par un PKA

Un exemple d'une cascade de dommage issue d'un PKA de $10\ keV$ simulée dans *ARAMIS* est présenté en Figure VI.4.

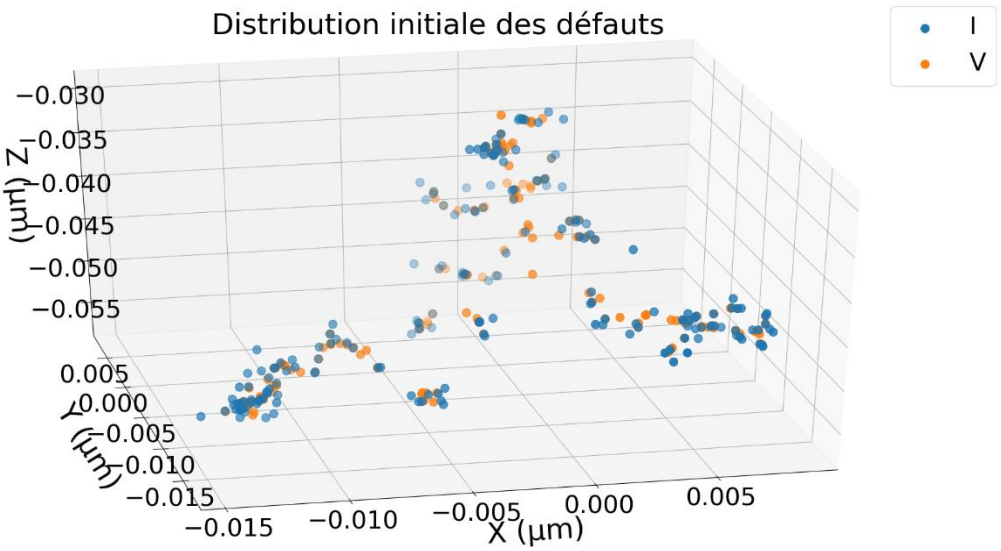


Figure VI.4 : Cascade de dommage engendrée par un PKA de 10 keV simulée avec l'application ARAMIS. La transparence des points est relative à la profondeur à laquelle ils se situent par rapport au point de vue de l'image. La notation « I » correspond à un interstitiel, tandis que la notation « V » correspond à une lacune.

Dans cet exemple, on remarque que la cascade est divisée en deux sous-structures, similaires à deux branches. Le long de chaque branche, on distingue une alternance entre défauts isolés et poches de paires de Frenkel. Cette observation est en parfait accord avec la description du processus de création de cascades donnée par *Wood et al.* [5]. Cette cascade de dommage a été choisie aléatoirement dans la base de données accessible par l'algorithme KMC. Le programme décrit dans le chapitre V de ce manuscrit se charge ensuite de faire évoluer ce système par les différentes réactions de recombinaison

[2] La guérison désigne le processus de réorganisation des défauts dans son ensemble (recombinaison, association, recombinaison partielle). Le taux de guérison correspond donc au nombre de défauts qui ont survécu au processus de réorganisation par rapport au nombre total de défauts à l'état initial.

et d'association de défauts. La distribution finale de défauts simulée au bout d'un mois par le KMC est présentée en Figure VI.5 :

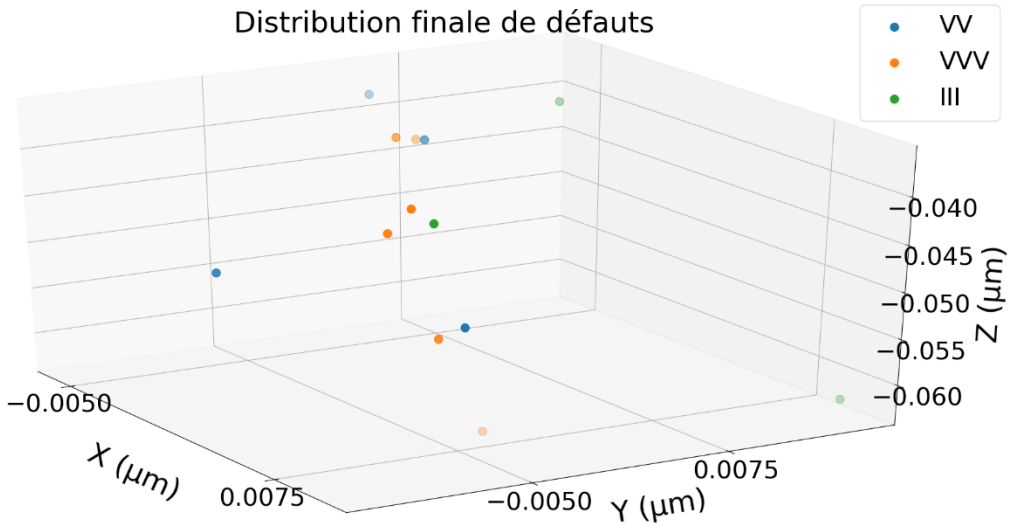


Figure VI.5 : Distribution spatiale de défauts simulée par l'algorithme KMC. Le temps simulé dans le KMC est de 1 mois. La transparence des points est relative à la profondeur à laquelle ils se situent par rapport au point de vue de l'image. La position d'un défaut est représentée par un point de couleur propre à son espèce. Les noms des défauts sont composés en fonction des défauts primaires qui les constituent : « VV » pour bilacune, « VVV » pour tri-lacune et « III » pour tri-interstitiel.

A l'état final, 1 mois après que la cascade de dommage ait été introduite, très peu de défauts ont survécu par rapport au nombre de paires de Frenkel présentes à l'état initial. La majorité des complexes sont créées dans des zones très proches de la cascade initiale, même si quelques défauts ont complexé en dehors du volume d'implantation initiale. Cette observation tend à confirmer notre hypothèse considérant les cascades de dommage indépendante. S'il reste des interstitiels, lacunes ou di-interstitiels à l'état final, ces défauts ne seront pas pris en compte dans la population de défauts donnée par le KMC. Ils sont négligés car ils sont connus pour être très mobiles et donc électriquement inactifs. Ces défauts peuvent subsister s'ils n'ont pas atteint les frontières du volume de simulation. L'historique permettant de suivre l'évolution de la cascade à l'état initial jusqu'à la distribution de défauts à l'état final est présenté en Figure VI.6. De manière identique au cas d'une répartition homogène de défauts (cf chapitre V), les lacunes disparaissent très vite pour produire des bilacunes et participer à des recombinaisons avec des interstitiels. Les tri-lacunes sont ensuite créées, puis vient le tour des complexes à base d'interstitiels de se former. Les di-interstitiels ont une durée de vie très faible dans le volume de simulation car ils vont soit sortir du fait de leur très grande mobilité ou recombiner partiellement avec les complexes lacunaires. Finalement pour cette simulation, au bout d'un mois, ce sont les complexes lacunaires qui prédominent, avec une domination des bilacunes, suivies des tri-lacunes et tri-interstitiels.

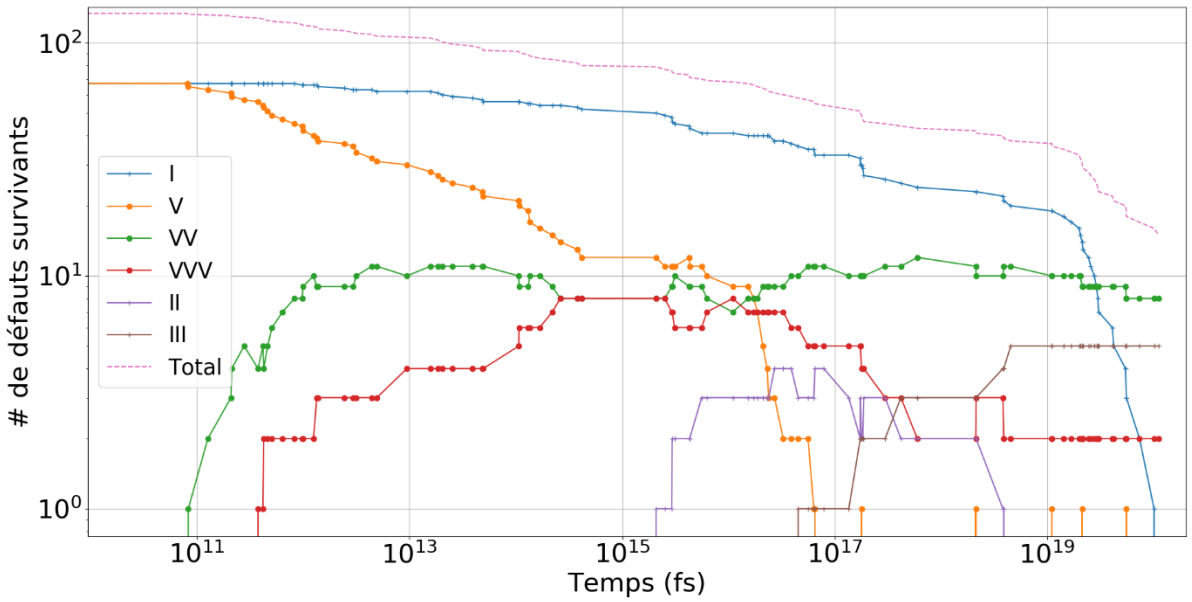


Figure VI.6 : Evolution du nombre de défauts de chaque espèce en fonction du temps dans une simulation KMC. L'énergie du PKA est de 10 keV et le temps simulé est de 1 mois.

Afin d'identifier de manière représentative dans quelles proportions sont présentes ces espèces de défauts, ce type de simulation est exécuté plusieurs fois pour réaliser une étude statistique. Cette étude servira également à déterminer le taux de recombinaison initiale et le taux de guérison à l'état final.

VI.2.2.2 Etude statistique du taux de guérison et de la population finale de défauts

Une base de données pour une énergie de PKA donnée contient 1000 cascades différentes. Par conséquent lors de l'étude statistique, le programme tirera au hasard une cascade de dommage et l'algorithme KMC décrit dans le chapitre V sera utilisé pour estimer le taux de recombinaison initiale moyen, le taux de guérison moyen et la population type de défauts associée qui survit au bout d'un mois.

Pour réaliser l'étude statistique, nous avons réalisé 30 simulations pour des énergies de PKA de 1 keV et 10 keV. Pour 100 keV, 5 simulations ont été réalisées. Le faible nombre de simulations effectuées par rapport au nombre de cascades disponibles dans la base de données pour ces énergies de PKA s'expliquent par le temps de calcul qui est limitant. En plus de connaître les taux de recombinaison initiale et de guérison ainsi que la population type de défauts pour chaque PKA, cela permettra d'étudier l'influence de l'énergie du PKA sur ces résultats.

Le taux de recombinaison initiale moyen $\langle \tau_{rec.\ init.} \rangle$ est donné en pourcentage avec son écart-type associé σ. Il correspond en moyenne au nombre de paires de Frenkel qui ont recombiné à l'étape 0b°) de l'algorithme Kinetic Monte Carlo (cf chapitre V). Le taux de guérison moyen $\langle \tau_{guérison} \rangle$ correspond au pourcentage de défauts restants lorsque le programme a atteint le temps cible. Les défauts qui se sont échappés de la boîte de simulation sont comptés comme ayant guéri, car on peut considérer qu'en moyenne ces défauts ont une chance d'interagir avec une autre cascade de dommage ou qu'ils ont disparu à la surface du pixel. Pour les mêmes raisons, les défauts très mobiles et connus pour être électriquement peu actifs, c'est-à-dire les lacunes, interstitiels et di-interstitiels sont comptés dans le facteur de guérison. En effet, il arrive que ces défauts se déplacent

dans la boîte sans interagir avec un autre défaut et sans s'échapper du volume de simulation. Pour une simulation, le nombre de défauts qui s'échappent et le nombre de lacunes ou d'interstitiels dits « résiduels » représentent à eux seuls environ 5 à 20% dans le pire cas du nombre total de défauts présents à l'état final.

Finalement, nous ne considérons que les défauts connus pour être électriquement actifs pour des temps de guérison longs, autrement dit la bilacune V_2, la tri-lacune V_3 et le tri-interstitiel I_3 [4], [8]. Nous pouvons ainsi constituer la population type de défauts à partir de ces informations. Pour ce faire, le pourcentage de chaque espèce de défauts est calculé à la fin de chaque simulation KMC, puis la moyenne de ces pourcentages est ensuite effectuée.

	$1\ keV$	$10\ keV$	$100\ keV$
$\langle\tau_{rec.\ init.}\rangle$ (σ)	58,6 % (7,7 %)	57 % (2,5 %)	56.55 % (0,97 %)
$\langle\tau_{guérison}\rangle$ (σ)	81,8 % (5,5 %)	87 % (2 %)	88,76 % (0,97 %)

Tableau VI.1 : Récapitulatif des études statistiques réalisées sur les taux de recombinaison initiale et de guérison pour des simulations KMC en fonction de l'énergie du PKA.

$X_{rel.}$ (%) (σ)	$1\ keV$	$10\ keV$	$100\ keV$
V_2	62 % (42 %)	50 % (19 %)	48,62 % (6,43 %)
V_3	23,5 % (26 %)	16,9 % (15,6 %)	29,78 % (5,59 %)
I_3	0,75 % (5 %)	16,9 % (10,2 %)	21,59 % (4,22 %)

Tableau VI.2 : Récapitulatif des études statistiques réalisées sur le pourcentage moyen du nombre de chaque espèce de défauts en fonction de l'énergie du PKA. Ces informations permettent d'établir une population type de défauts.

D'après l'analyse des Tableau VI.1 et Tableau VI.2, le taux moyen de recombinaison initiale $\langle\tau_{rec.\ init.}\rangle$ varie peu avec l'énergie du PKA. L'écart-type sur ces données diminue lorsque l'énergie du PKA augmente. Cette baisse s'explique par le fait que plus l'énergie du PKA augmente, plus il y a de paires de Frenkel et donc plus l'échantillon est grand. Un grand échantillon permet de réduire l'incertitude sur la valeur moyenne estimée. En revanche la moyenne du taux de guérison augmente avec l'énergie du PKA, et son incertitude diminue. Un taux de guérison élevé peut s'expliquer en partie par le fait que les terminaisons des sous-cascades engendrées par de telles énergies de PKA montrent une densité de défauts plus élevée que pour le reste de la cascade. Les recombinaisons et les associations sont donc plus nombreuses dans ces régions de fortes densités de défauts [9]. Il est possible de mettre en évidence indirectement cette tendance en étudiant la distance moyenne entre une lacune et un interstitiel d'une même paire en fonction de l'énergie du PKA. Nous avons simulé avec *GEANT4* 100 PKA différents de même énergie puis calculé la distance moyenne entre une lacune et un interstitiel d'une même paire (notée $\langle d\rangle$) et l'écart-type associé (noté σ_d).

$\boldsymbol{E_{PKA}}$	$\boldsymbol{\langle d\rangle\ /\ \sigma_d}$	$\boldsymbol{d_{max}}$	$\boldsymbol{X(d \leq \langle d\rangle)}$
$100\ eV$	6,3 Å / 5,08 Å	$2{,}92\ nm$	59 %
$500\ eV$	8,58 Å / $1{,}1\ nm$	$9{,}29\ nm$	70 %
$1\ keV$	8,93 Å / $1{,}22\ nm$	$11{,}9\ nm$	69,77 %
$10\ keV$	$1\ nm$ / $2{,}36\ nm$	$62{,}5\ nm$	74,65 %
$100\ keV$	$1{,}1\ nm$ / $5{,}35\ nm$	$239\ nm$	77,48 %
$1\ MeV$	$1{,}33\ nm$ / $19{,}5\ nm$	$1{,}16\ \mu m$	82,57 %

Tableau VI.3 : Etude sur la distance séparant une lacune et un interstitiel d'une même paire. La distance moyenne et l'écart-type associé sont déterminés à une énergie de PKA donnée. La distance maximale est également relevée. Le nombre de paires lacune-interstitiel qui présente une distance lacune-interstitiel inférieure à la moyenne est déterminé et inscrit dans la dernière colonne du tableau. Les cascades de dommage sont simulées via ARAMIS (GEANT4).

Nous avons aussi déterminé le nombre de paires de Frenkel pour lesquels la distance qui sépare la lacune et l'interstitiel est inférieure à la distance moyenne déterminée pour l'ensemble des paires de Frenkel (noté $X(d \leq \langle d \rangle)$). La distance maximale séparant une lacune et l'interstitiel associé pour les 100 simulations a également été extraite pour chaque énergie (notée d_{max}). Les résultats de ces calculs sont répertoriés dans le Tableau VI.3. Nous remarquons que la distance moyenne entre une lacune et un interstitiel augmente peu avec l'énergie du PKA (seulement un facteur 2 entre des PKA de $100\ eV$ et de $1\ MeV$, soit en rapport 10^4 en énergie). En revanche, l'écart-type associé augmente grandement avec l'énergie du PKA. La distance maximale augmente également avec l'énergie du PKA. Nous constatons que le nombre de paires lacune-interstitiel qui présente une distance inférieure à la distance moyenne calculée sur l'ensemble des paires de Frenkel augmente avec l'énergie du PKA. Cela implique que l'augmentation de l'écart-type est provoquée par des évènements extrêmes et rares. Cette tendance peut expliquer l'augmentation du taux de guérison avec l'énergie du PKA (voir Tableau VI.1). En moyenne, on pourrait dire que le taux de guérison d'une cascade engendrée par un PKA de faible énergie est très proche du taux de guérison d'une cascade engendrée par un PKA de haute énergie, car cette cascade serait une combinaison de plusieurs sous-cascades indépendantes. Cependant, il peut arriver dans certains cas que les terminaisons des sous-cascades se superposent, augmentant la densité locale de paires lacune-interstitiel. Ce mécanisme expliquerait pourquoi nous observons un taux de guérison sensiblement plus élevé lorsque l'énergie du PKA augmente. Le Tableau VI.3 montre que pour une énergie de PKA croissante, la lacune et l'interstitiel d'une même paire ont tendance en moyenne à être plus proche l'un de l'autre, probablement car cette paire se retrouve dans des terminaisons de sous-cascades. De ce fait, moins de défauts isolés sont créés, et les paires lacune-interstitiel ont plus de chance de guérir.

En ce qui concerne le pourcentage moyen de défauts de chaque espèce (Tableau VI.2), on constate que les simulations KMC pour des PKA de $1\ keV$ fournissent des estimations très variables. En effet, les écarts-types sont grands et donnent une incertitude conséquente sur le nombre moyen de défauts. Ces valeurs traduisent le fait qu'à la fin d'une simulation KMC, il se peut qu'une tri-lacune soit présente en petit nombre, soit majoritaire ou à l'inverse complètement absente. Pour des PKA de $1\ keV$, la population de tri-interstitiels est clairement minoritaire par rapport aux défauts lacunaires. Ce déficit s'explique sûrement par le fait que les interstitiels ont une fréquence de sauts plus faibles que les lacunes. Par conséquent, les lacunes très mobiles vont soit migrer puis recombiner avec des interstitiels, soit les interstitiels vont réagir avec des complexes lacunaires qui se sont formés avant qu'ils n'aient commencé à se mettre en mouvement. Enfin, comme les lacunes, certains interstitiels peuvent migrer loin de la cascade et sortir du volume de simulation. Une fois tous ces interstitiels consommés, il n'en reste que très peu pour former des complexes assez importants tels que les tri-interstitiels.

En revanche, pour des PKA de $10\ keV$, la population de tri-interstitiels et de tri-lacunes sont très similaires. On relève cependant une incertitude moins grande sur l'estimation du nombre de tri-interstitiels. La population de bilacune reste majoritaire quelle que soit l'énergie du PKA, ce qui est en accord avec les observations expérimentales disponibles dans la littérature [6], [8], [10]–[12]. On notera également que l'amplitude des écarts-types est diminuée par rapport à des simulations KMC réalisées avec des PKA de $1\ keV$. Cela est dû une nouvelle fois au nombre supérieur d'objets pour réaliser l'échantillon.

Les simulations pour des PKA de $100\ keV$ tendent à confirmer cette tendance, puisqu'avec un nombre inférieur de simulations effectuées, l'écart-type sur les données est plus faible par rapport à des PKA de $1\ keV$ ou $10\ keV$. On notera également que la population type de défauts pour des PKA de $100\ keV$ est semblable à celle estimée pour des PKA de $10\ keV$, hormis une légère prédominance

de la tri-lacune par rapport au tri-interstitiel. Mais cette différence n'est peut-être pas significative statistiquement vu le nombre restreint d'échantillon à $100\ keV$.

D'après les simulations KMC, le taux moyen de recombinaison initiale est autour de 50 %, et le taux final de guérison est estimé autour de 90 %, ce qui est en adéquation avec la littérature [3], [13], [14]. Aussi, la population de défauts estimée par les simulations KMC est en accord avec la littérature. En effet, la bilacune est souvent jugée comme responsable de l'augmentation du courant d'obscurité. Les clusters de défauts comme la tri-lacune ou le tri-interstitiel sont également répandus dans les composants en silicium après irradiation, et sont soupçonnés de jouer également un rôle dans la dégradation de ces composants [1], [4], [6], [15]–[17]. Ce résultat prouve que le fait d'utiliser des cascades de dommage en entrée des simulations KMC permet d'obtenir des taux de recombinaison initiale et de guérison plus proches de ceux habituellement rencontrés dans la littérature, comparé à l'hypothèse d'une répartition homogène de défauts. Même si le taux de recombinaison initiale est légèrement surestimé, ces résultats confortent notre démarche. Cette surestimation est probablement due au choix du rayon d'interaction entre la lacune et l'interstitiel pour une recombinaison qui est peut être légèrement trop élevée, facilitant le déclenchement de cette interaction dans l'algorithme.

VI.3 Couplage de l'algorithme KMC avec l'outil de calcul prédictif du courant d'obscurité

Nous connaissons désormais les populations types de pièges en fonction de l'énergie du PKA, ainsi que le taux de guérison un mois après irradiation. Ces informations vont donc être utilisées pour alimenter l'outil de calcul du courant d'obscurité *DAAN*.

VI.3.1 Modifications de *DAAN* pour tenir compte des données de sortie du KMC

Afin d'utiliser les informations issues des simulations KMC, le programme *DAAN* a dû être légèrement modifié. Tout d'abord, l'outil prend désormais en entrée un fichier contenant le taux de guérison moyen ainsi que son écart-type. Sachant que le taux de guérison n'est pas un coefficient identique pour chaque simulation KMC, nous décidons de tirer aléatoirement le facteur de guérison à chaque interaction nucléaire dans *DAAN*. Nous faisons l'hypothèse que ce tirage aléatoire s'effectue dans une gaussienne ayant pour moyenne le facteur moyen de guérison et comme écart-type l'écart-type donné par l'étude statistique sur le taux de guérison (Figure VI.7). Aussi, même si le taux de guérison était jusqu'ici généralement exprimé en pourcentage, le facteur de guérison s'exprime sans unité. Un taux de guérison de 90 % correspond à un facteur de guérison de 0,90 par exemple. Cette hypothèse permet de rendre compte physiquement du fait qu'une cascade de dommage provoquée par une interaction nucléaire ne va pas systématiquement guérir avec le même taux.

Ensuite, contrairement aux précédentes versions de *DAAN*, nous considérons l'hypothèse qu'une interaction nucléaire ne va pas générer les mêmes défauts, mais plutôt une population de défauts paramétrée par les informations fournies par les simulations KMC. En revanche, nous considérons toujours que tous les défauts vont subir l'influence du même champ électrique.

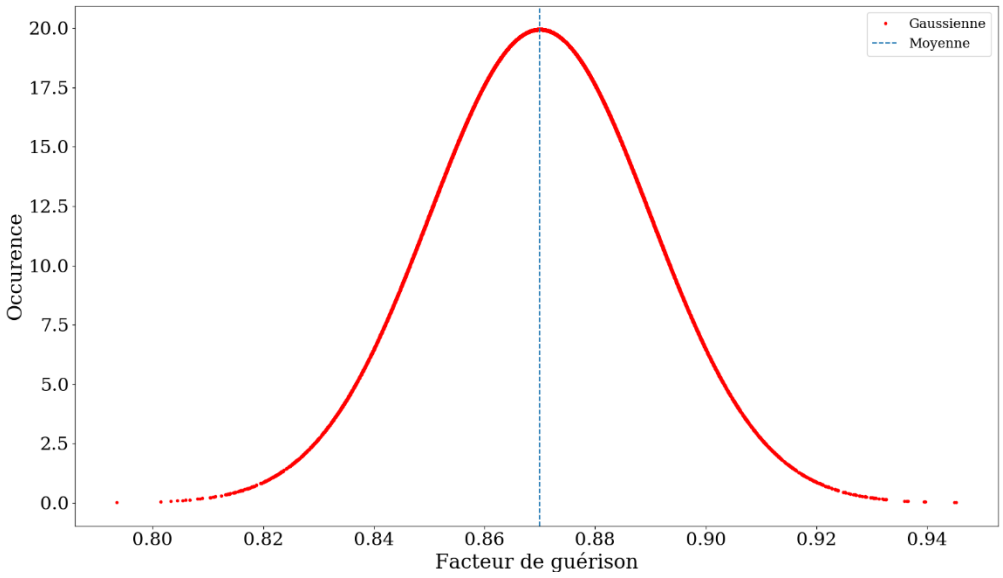


Figure VI.7 : Distribution du facteur de guérison selon une gaussienne. Cette gaussienne, de moyenne 0,87 et d'écart-type 0,02, représente la distribution du facteur de guérison selon l'étude statistique sur des PKA de 10 keV. Cette distribution est utilisée pour toutes les simulations DAAN considérant des PKA de 10 keV représentatifs de l'irradiation aux protons.

En pratique, cela revient à calculer un taux de génération moyen amplifié par les effets de champ électrique :

$$\langle g' \rangle_j = \frac{\sum_{i=0}^{N_{déf.}} \lambda_{g,j,i} \times g_i}{N_{déf.}} \quad \text{(VI.1)}$$

où $\lambda_{g,j,i}$ est le facteur de champ électrique calculé pour le défaut i pour un champ électrique tiré aléatoirement pour l'interaction nucléaire j. Le piège i présente un taux de génération intrinsèque g_i et $N_{déf.}$ est le nombre de défauts total dans la population. Nous rappelons ici que chaque $\lambda_{g,j,i}$ est déterminé pour chaque piège pour le même champ électrique. L'augmentation du courant d'obscurité généré par une interaction nucléaire, tenant compte de la population de défauts et du taux de guérison issus des simulations KMC, est obtenue selon l'expression suivante :

$$\Delta I_j = N_{d,j} \times \langle g' \rangle_j \times (1 - AF_j) \quad \text{(VI.2)}$$

avec $N_{d,j}$ le nombre de déplacements atomiques générés par l'interaction nucléaire j, réduit du facteur de survie $(1 - AF_j)$. Le coefficient AF_j correspond au facteur de guérison tiré aléatoirement au cours de l'interaction nucléaire j. Le terme $(1 - AF_j)$ représente donc la proportion de défauts qui a survécu au processus de réorganisation. $\langle g' \rangle_j$ est le taux de génération moyen de la population de défauts défini juste au-dessus. Le courant d'obscurité est donc proportionnel au nombre de déplacements atomiques et aux paires électron-trou générées par une population type de pièges présentes après une guérison d'une durée définie par l'utilisateur (1 mois dans notre cas).

L'augmentation du courant d'obscurité dans un pixel est donc la somme des ΔI_j sur l'ensemble des interactions nucléaires qui ont eu lieu en son sein. Ce nouveau calcul est incorporé à *DAAN* dans le cas où l'on souhaite utiliser les résultats de l'algorithme KMC.

VI.3.2 Comparaisons des résultats de simulation avec des données expérimentales

VI.3.2.1 Remarques sur les paramètres de simulations

D'après le Tableau VI.1 et le Tableau VI.2, l'énergie du PKA considérée comme représentative de l'irradiation aux protons va directement affecter la simulation du courant d'obscurité. En effet, chaque énergie de PKA possède sa propre distribution de facteur de guérison et sa propre population type de défauts. D'après l'étude bibliographique réalisée sur les paramètres de pièges dans le chapitre II, nous avons constaté que très peu de données existent sur les petits clusters de défauts tels que les tri-lacunes ou tri-interstitiels. Ce manque de données est pénalisant pour les simulations du courant d'obscurité, car il est par conséquent difficile d'évaluer la fiabilité des paramètres de pièges. Par exemple, aucune information n'est disponible sur les sections efficaces de capture d'électrons et de trous pour le tri-interstitiel, et très peu d'études se focalisent sur les propriétés électriques de la tri-lacune. Dans cette étude, si les paramètres ne sont pas connus (cas du tri-interstitiel) ou si peu d'informations sont disponibles (cas de la tri-lacune), leurs valeurs sont fixées de manière à être dans une gamme représentative des mesures et calculs répertoriés dans la littérature (cf chapitre II).

A partir du pourcentage final moyen de chaque espèce de défauts à une énergie de PKA donnée (Tableau VI.2, paragraphe VI.2.2.2), nous sommes en mesure d'établir une population type de pièges pour la simulation *DAAN*. Le paramètre X représente la proportion (ou le « poids ») du piège dans la population de défauts simulée (Tableau VI.4) :

$\boldsymbol{Energie\ PKA}$	$\boldsymbol{X}$ (%)		
	$V_2^{-/0}$	$V_3^{-/0}$	I_3
$1\ keV$	70	30	0
$10\ keV$	≈ 54	≈ 23	≈ 23

Tableau VI.4 : Population de pièges attribuée à chaque énergie du PKA. Ces informations utilisées par DAAN servent à calculer le courant d'obscurité à chaque interaction nucléaire.

D'après le Tableau VI.1 et le Tableau VI.2, les variations sur le nombre moyen de chaque espèce de défauts et sur le taux de guérison sont plus importantes entre des PKA de $1\ keV$ et $10\ keV$ qu'entre des PKA de $10\ keV$ et $100\ keV$. Notre estimation de la population de défauts et du taux de guérison effectuée avec des PKA de $10\ keV$ est donc valable en première approximation à plus haute énergie. Nous considérons seulement les populations de défauts engendrées par des PKA de $1\ keV$ et de $10\ keV$ pour nos simulations. Nous faisons donc le choix de discrétiser en deux domaines distincts l'énergie du PKA issu d'un proton : si l'énergie du proton est inférieure à $10\ MeV$, alors le PKA aura une énergie de $1\ keV$. Dans le cas où le proton possède une énergie supérieure à $10\ MeV$, le PKA aura une énergie de $10\ keV$. Ainsi, pour simuler l'augmentation du courant d'obscurité provoquée par des protons de $6{,}5\ MeV$, la population de pièges déterminée avec des PKA de $1\ keV$ est sélectionnée. Vu que toutes les autres énergies de proton que nous simulons sont supérieures ou égales à $30\ MeV$, la population de pièges correspondant à une énergie de PKA de $10\ keV$ est privilégiée.

En ce qui concerne les paramètres de pièges (niveau d'énergie et sections efficaces de capture d'électrons et de trous), ces derniers ont été fixés à des valeurs représentatives de

la littérature et de l'étude bibliographique proposée dans le chapitre II de ce manuscrit (Tableau II.3). Les paramètres utilisés sont consignés dans le Tableau VI.5 :

	$E_t\ (eV)$	$\sigma_n\ (m^2)$	$\sigma_p\ (m^2)$
$V_2^{-/0}$	$E_v + 0{,}71$	5×10^{-19}	5×10^{-19}
$V_3^{-/0}$	$E_v + 0{,}665$	$2{,}4 \times 10^{-19}$	1×10^{-18}
I_3	$E_v + 0{,}92$	1×10^{-18}	1×10^{-18}

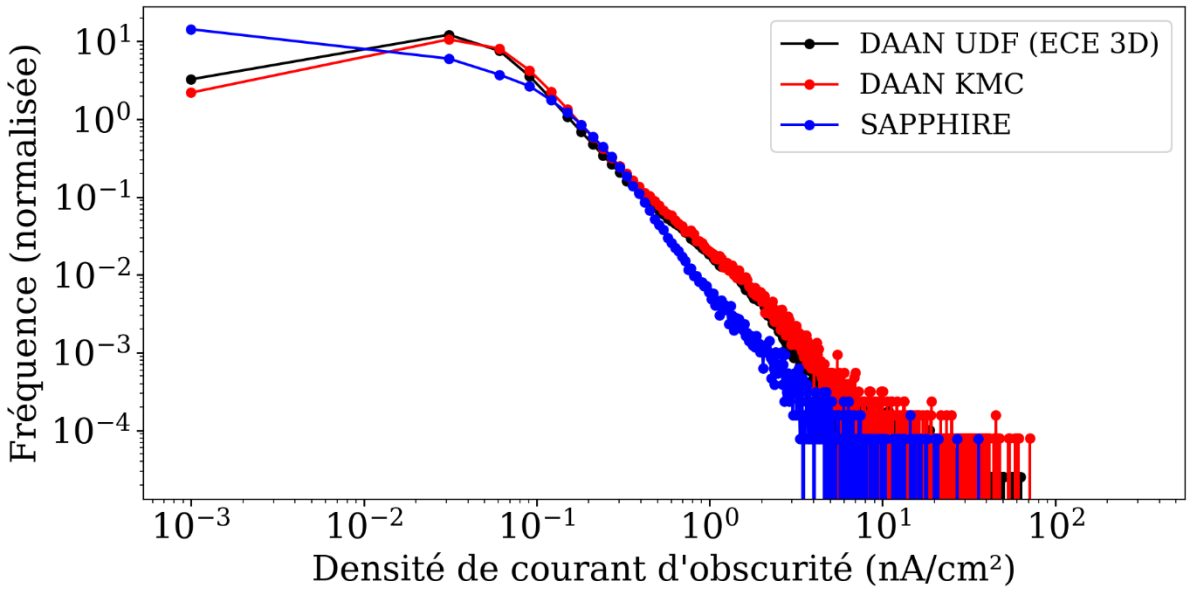
Tableau VI.5 : Inventaire des paramètres de pièges utilisés pour calculer le taux de génération moyen de paires électron-trou ainsi que les effets de champ électriques associés pour simuler l'augmentation du courant d'obscurité dans DAAN.

Pour rappel, le paramètre E_t correspond à la position du niveau d'énergie dans la bande interdite du silicium, ici exprimé par rapport à la bande de valence E_v située à $0\ eV$. Les paramètres σ_n et σ_p correspondent aux sections efficaces de capture d'électrons et de trous respectivement.

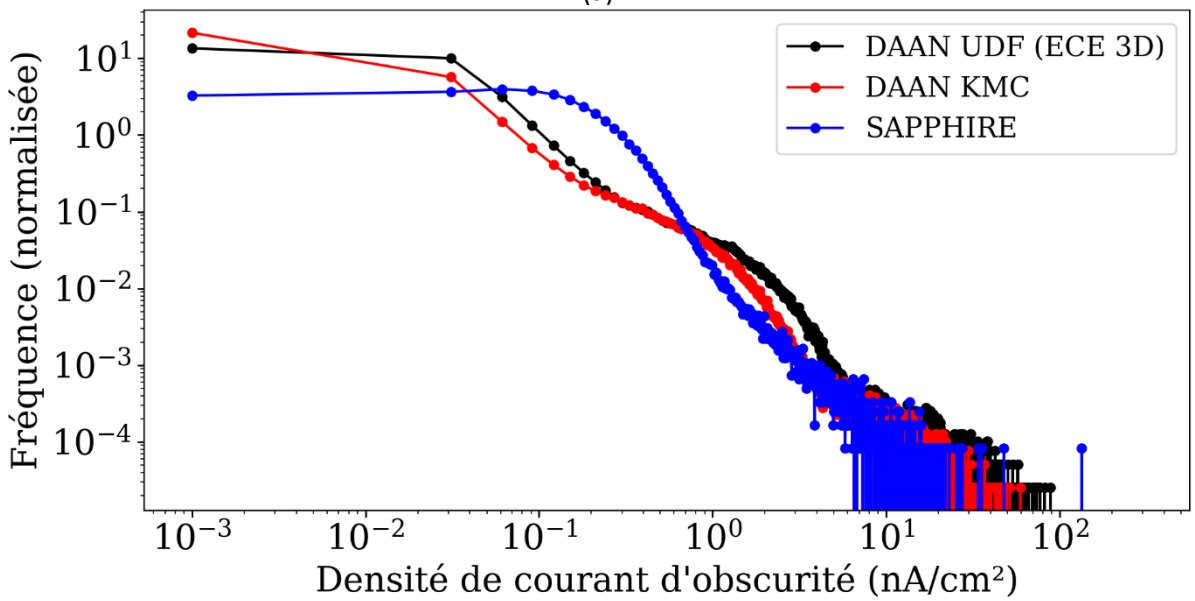
L'augmentation du courant d'obscurité est calculée en fonction de la population de défauts paramétrée à partir des données fournies dans le Tableau VI.4 et le Tableau VI.5, et en fonction du taux de guérison issu du Tableau VI.1. Grâce aux informations extraites des modélisations KMC, des simulations *DAAN* sont réalisées et comparées aux données expérimentales pour le composant SAPPHIRE (Figure VI.8) et pour le composant JADE (Figure VI.9). Les conditions de simulations sont celles présentées dans ce chapitre (paragraphes VI.2.2.2 et VI.3.1). Aussi, pour chaque simulation réalisée à partir des informations fournies par le KMC, nous représentons également la simulation effectuée à partir de la méthode présentée dans le chapitre IV. Pour rappel, cette méthode consiste à convertir le nombre de déplacements atomiques en courant d'obscurité au moyen du facteur de dommage universel de *Srour* (UDF), en tenant compte des effets du champ électrique modélisés en trois dimensions (cf chapitre IV, paragraphe IV.1.1). Pour cette méthode, les effets de champ électrique sont calculés en considérant une population de pièges composée exclusivement de bilacune $V_2^{-/0}$ avec $E_t = E_v + 0{,}71$ et $[\sigma_n; \sigma_p] = [5 \times 10^{-19}\ m^2; 5 \times 10^{-19}\ m^2]$. Dans les paragraphes suivants, nous nommons la méthode de calcul de courant d'obscurité utilisant les données issues des simulations KMC la « méthode KMC » et la méthode utilisant le facteur de dommage universel la « méthode UDF ». Cette comparaison permet d'étudier l'apport de notre nouvelle méthode de calcul par rapport à la précédente.

VI.3.2.2 Analyse des résultats de simulation pour le SAPPHIRE

D'après la Figure VI.8, la comparaison entre les simulations issues de la méthode KMC et de celles réalisées à partir du facteur de dommage universel montre que, pour les paramètres de simulation considérés, les résultats sont similaires. Pour la modélisation des protons de $6{,}5\ MeV$ (population de pièges et facteur de guérison correspondant à des PKA de $1\ keV$), la simulation issue de la méthode KMC fournie une très légère surestimation du courant d'obscurité maximal (environ un facteur 1,1) par rapport à la méthode utilisant le facteur de dommage universel.


DAAN UDF (ECE 3D)
DAAN KMC
SAPPHIRE
Fréquence (normalisée)
Densité de courant d'obscurité (nA/cm²)

(a)


DAAN UDF (ECE 3D)
DAAN KMC
SAPPHIRE
Fréquence (normalisée)
Densité de courant d'obscurité (nA/cm²)

(b)

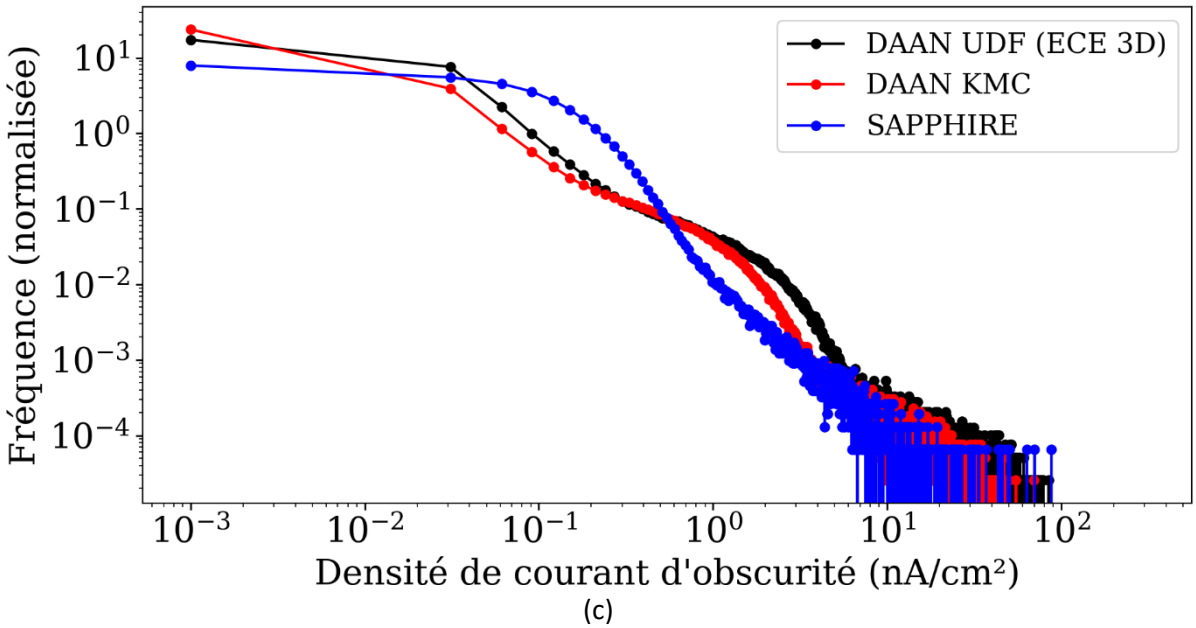


Figure VI.8 : Comparaison des distributions des courants d'obscurité simulés selon les informations fournies par le KMC (en rouge), simulés au moyen du facteur de dommage universel (UDF, en noire) avec les effets de champs électriques 3D (ECE 3D) et mesurés expérimentalement (en bleue) pour le composant SAPPHIRE à $294{,}15\ K$ *1 mois après irradiation pour des protons (a) de* $6{,}5\ MeV$ *à une fluence de* $3{,}89 \times 10^{9}\ p^{+}/cm^{2}$*, (b) de* $72{,}8\ MeV$ *à une fluence de* $2{,}52 \times 10^{10}\ p^{+}/cm^{2}$*, (c) de* $200\ MeV$ *à une fluence de* $5{,}16 \times 10^{10}\ p^{+}/cm^{2}$*.*

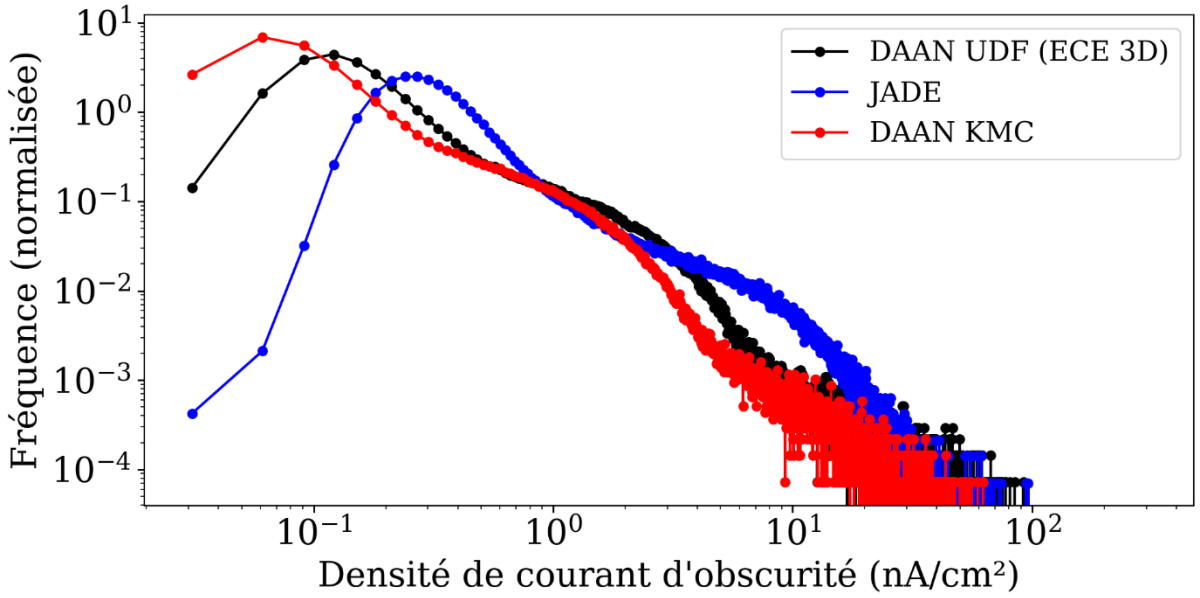
En ce qui concerne l'estimation de l'augmentation du courant d'obscurité pour des protons de $72{,}8\ MeV$ et $200\ MeV$ (population de pièges et facteur de guérison correspondant à des PKA de $10\ keV$), les distributions de courant d'obscurité issues de la méthode KMC montrent une réduction des forts courants d'obscurité situés en queue de distribution (supérieurs à $3\ nA/cm^2$) par rapport à la méthode UDF. Cette réduction est de l'ordre d'un facteur 1,5 pour des protons de $72{,}8\ MeV$, d'un facteur 1,2 pour des protons de $200\ MeV$. Dans chaque cas, la simulation des courants d'obscurité par la méthode KMC ne permet pas d'estimer le dernier canal de la distribution expérimentale, contenant les quelques pixels les fortement dégradés. En dehors de cet unique point, la queue de distribution (courants supérieurs à environ $2-3\ nA/cm^2$) est bien prédite par la méthode KMC de *DAAN*. Selon les paramètres considérés, le nouveau modèle permet d'estimer le nombre et l'intensité des pixels chauds de manière cohérente avec la distribution expérimentale par rapport à la méthode UDF pour des courants supérieurs à $0{,}9\ nA/cm^2$.

En revanche pour les courants plus faibles, la DCNU simulée ne coïncide pas tout à fait avec la DCNU expérimentale. Cela est certainement dû au fait que dans cette partie de la distribution du courant d'obscurité, la contribution de la dose ionisante cumulée (TID, cf chapitre II paragraphe II.3.3) n'est pas prise en compte. Un modèle simple de TID est proposé pour améliorer la forme de la DCNU pour les faibles courants d'obscurité plus loin dans ce chapitre. Hormis ce seul canal, la méthode KMC permet d'estimer une distribution de courant d'obscurité plus proche de la distribution expérimentale.

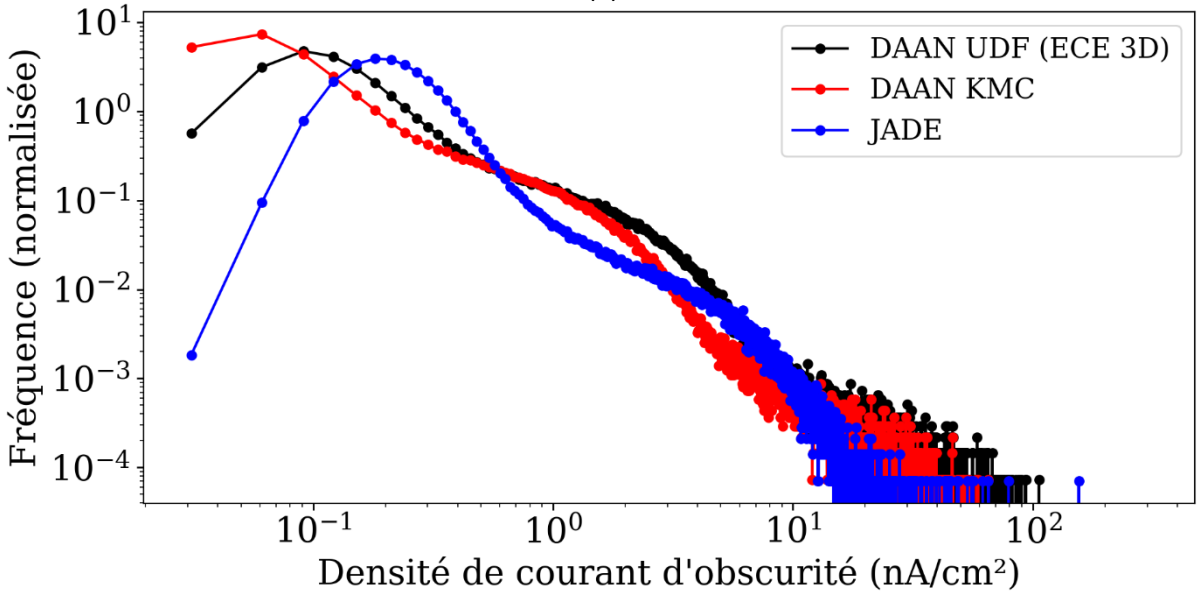
En résumé, la population de pièges et le facteur de guérison utilisés pour des PKA de $1\ keV$ surestiment légèrement les courants d'obscurité simulés par la méthode UDF. A l'inverse, la population de pièges et le facteur de guérison utilisés pour des PKA de $10\ keV$ sous-estiment légèrement les courants d'obscurité calculés par la méthode UDF. Malgré ces légers écarts, pour les paramètres de pièges considérés pour la population de défauts estimée par le KMC, la méthode KMC semble être une alternative à la méthode UDF. Cette conclusion sera discutée dans le paragraphe VI.4.2.

VI.3.2.3 Analyse des résultats de simulation pour le JADE

Les informations issues des simulations KMC ont également été utilisées pour modéliser l'augmentation du courant d'obscurité dans les composants JADE. Puisque l'énergie minimale des protons est égale à 30 MeV, seule la population de défauts engendrée par des PKA de 10 keV a été considérée. Les comparaisons entre les distributions expérimentales et simulées pour 60 MeV, 120 MeV et 185 MeV sont présentées en Figure VI.9 :



(a)



(b)

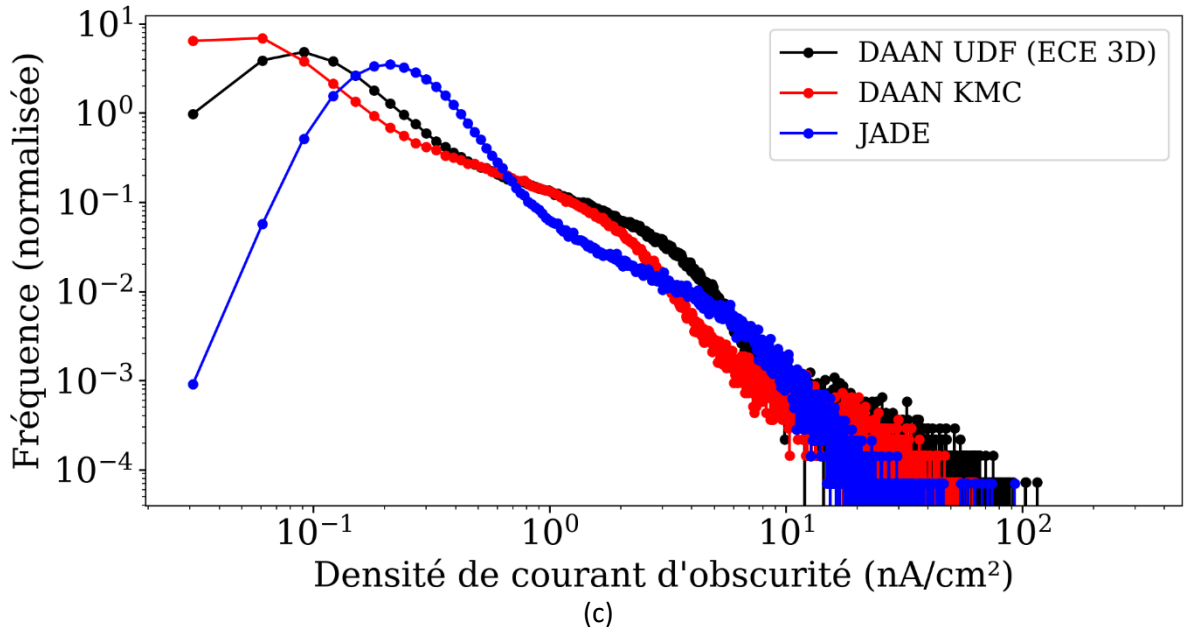


Figure VI.9 : Comparaison des distributions des courants d'obscurité simulés selon les informations fournies par le KMC (en rouge), simulés au moyen du facteur de dommage universel (UDF, en noire) avec les effets de champs électriques 3D (ECE 3D) et mesurés expérimentalement (en bleue) pour le composant JADE à $296{,}15\ K$ *1 mois après irradiation pour des protons (a) de* $60\ MeV$ *à une fluence de* $7{,}28 \times 10^{10}\ p^+/cm^2$*, (b) de* $120\ MeV$ *à une fluence de* $1{,}20 \times 10^{11}\ p^+/cm^2$*, (c) de* $185\ MeV$ *à une fluence de* $1{,}66 \times 10^{11}\ p^+/cm^2$*.*

D'après la Figure VI.9, pour n'importe quelle énergie de proton et pour les paramètres de pièges considérés, la méthode KMC semble réduire d'un facteur 1,5 à 1,7 l'intensité du courant d'obscurité. Une réduction du même ordre de grandeur de l'amplitude du courant d'obscurité a été observée pour le composant SAPPHIRE (voir paragraphe VI.3.2.2). Cette réduction engendre une sous-estimation des courants d'obscurité des pixels situés dans la queue de distribution.

Pour la population de pièges et le facteur de guérison considérés pour la méthode KMC, l'estimation la plus proche des données expérimentales (du point de vue de la queue de distribution) est obtenue pour le composant SAPPHIRE pour les irradiations aux protons de $72{,}8\ MeV$ et de $200\ MeV$. Pour le SAPPHIRE irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$, la simulation surestime légèrement la distribution du courant d'obscurité, tandis que pour les composants JADE, la simulation sous-estime légèrement les courants d'obscurité expérimentaux. Cette différence peut s'expliquer par plusieurs facteurs. Tout comme pour la méthode UDF, la méthode KMC est sensible aux paramètres de pièges. Par conséquent, le taux de génération de paires électron-trou calculé et le facteur d'amplification lié au champ électrique sont impactés par la variation des paramètres de pièges. De plus, nous avons établi une proportion moyenne de défauts pour chaque espèce de défauts à une énergie de PKA donnée, mais nous savons d'après l'étude statistique que le nombre de défauts de chaque espèce présent au bout d'un mois peut varier. Cette variation n'est pour l'instant pas prise directement en compte dans le calcul du courant d'obscurité et peut expliquer en partie la différence entre les mesures expérimentales et les résultats de simulation. Nous notons toutefois le fait que la méthode KMC fournit des résultats similaires à la méthode UDF.

Afin d'analyser la sensibilité de la méthode de calcul du courant d'obscurité utilisant les résultats de l'algorithme Kinetic Monte Carlo, nous procédons à une étude de sensibilité paramétrique sur les sections efficaces de capture d'électrons et de trous des pièges.

VI.3.2.4 Etude de sensibilité paramétrique pour le SAPPHIRE

Puisque la méthode KMC surestime légèrement les courants d'obscurité en queue de distribution dans le cas du composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV (voir Figure VI.8.a), nous avons modifié la section efficace de capture de trous de la tri-lacune et de la bilacune afin d'optimiser les résultats de simulation (Tableau VI.6). Le choix s'est porté sur ce paramètre en particulier car la tri-lacune et la bilacune étant des pièges accepteurs, l'effet du champ électrique s'appliquera à l'émission des trous (cf chapitre IV, paragraphe IV.1.1) et donc la sensibilité paramétrique en sera accrue.

	$E_t\ (eV)$	$\sigma_n\ (m^2)$	$\sigma_p\ (m^2)$
$V_2^{-/0}$	$E_v + 0{,}71$	$5 \times 10^{-19}\ m^2$	$2{,}4 \times 10^{-19}\ m^2$
$V_3^{-/0}$	$E_v + 0{,}665$	$2{,}4 \times 10^{-19}\ m^2$	$5 \times 10^{-19}\ m^2$
I_3	$\emptyset$	$\emptyset$	$\emptyset$

Tableau VI.6 : Inventaire des paramètres de piège « optimisés » utilisés pour simuler l'augmentation du courant d'obscurité dans DAAN pour le composant SAPPHIRE irradié à 6,5 MeV avec une fluence de $3{,}89 \times 10^9\ p^+/cm^2$.

Pour cette étude, la section efficace de capture de trous est divisée d'un facteur 2 pour chaque défaut pour diminuer le taux de génération de paires électrons-trous. Cependant, les valeurs sélectionnées restent dans la gamme de sections efficaces rencontrée dans la littérature (cf chapitre II, Tableau II.3).

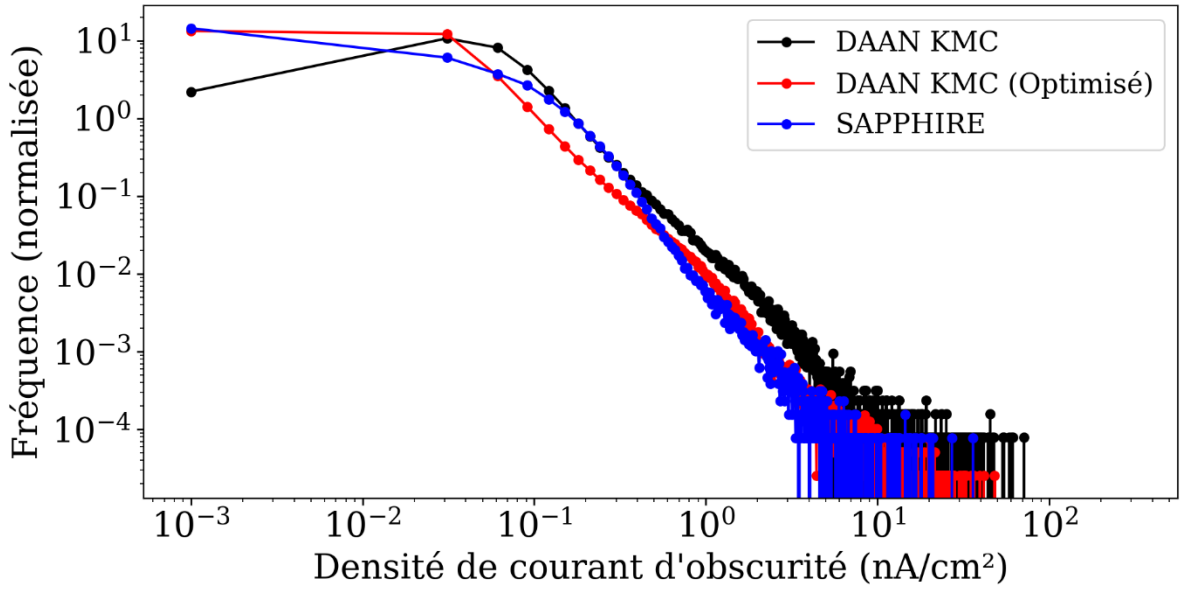


Figure VI.10 : Distributions du courant d'obscurité mesurée expérimentalement à 294,15 K 1 mois après irradiation pour le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^9$p+/cm² (courbe bleue) et simulée avec DAAN avec les données fournies par l'algorithme KMC avec les paramètres par défaut (courbe noire) et optimisées (courbe rouge).

La population de défauts et les paramètres de pièges optimisés permettent de reproduire de manière satisfaisante la DCNU expérimentale. Les courants intermédiaires et les forts courants d'obscurité (supérieurs à $0{,}5\ nA/cm^2$) sont très légèrement surestimés mais la prédiction est proche de la distribution expérimentale. La tendance pour les plus faibles courants est cohérente avec la distribution expérimentale même si la distribution simulée ne coïncide pas complètement.

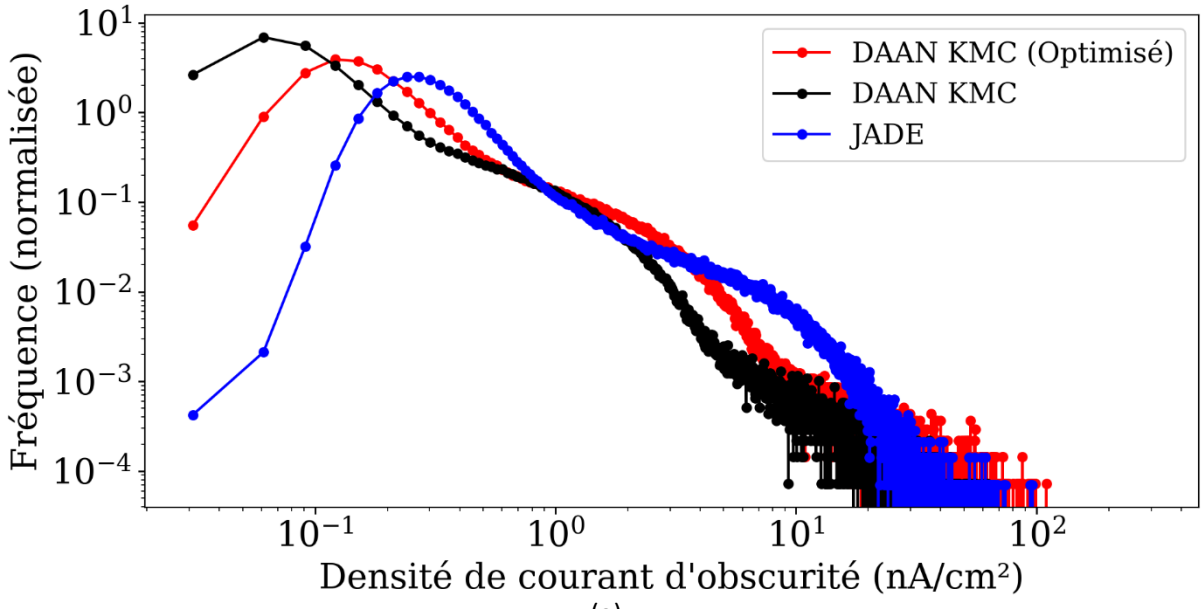
VI.3.2.5 Etude de sensibilité paramétrique pour le JADE

Les paramètres de pièges pour ces simulations sont répertoriés dans le tableau suivant (Tableau VI.7) :

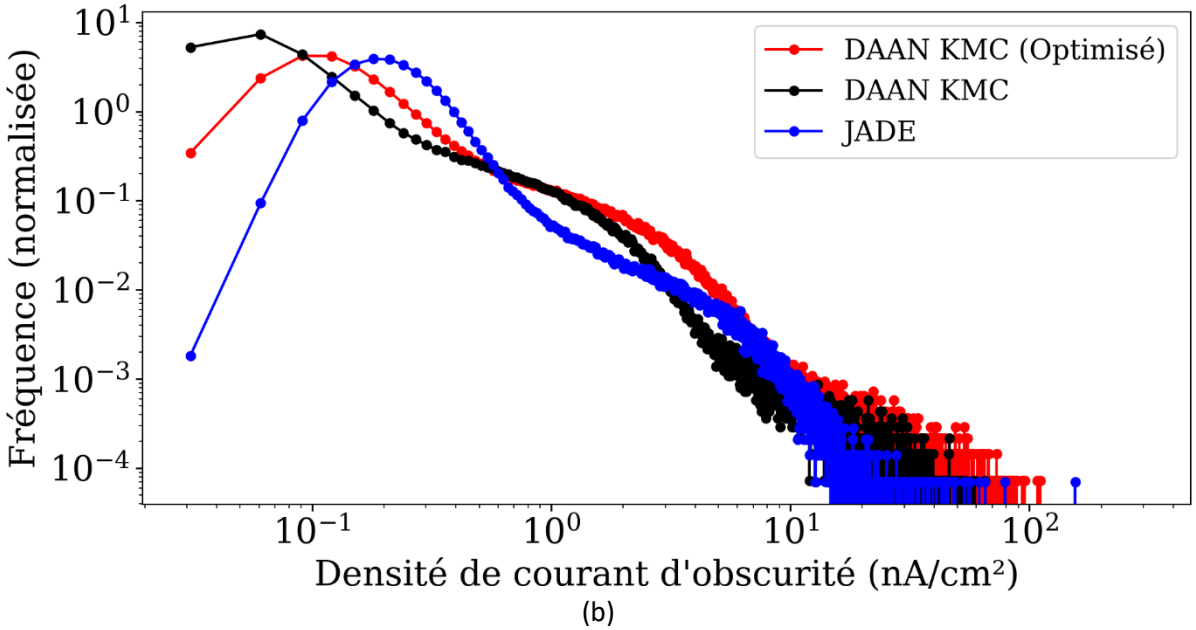
	$E_t\ (eV)$	$\sigma_n\ (m^2)$	$\sigma_p\ (m^2)$
$V_2^{-/0}$	$E_v + 0{,}71$	$5 \times 10^{-19}\ m^2$	$5 \times 10^{-19}\ m^2$
$V_3^{-/0}$	$E_v + 0665$	$2{,}4 \times 10^{-19}\ m^2$	$2 \times 10^{-18}\ m^2$
I_3	$E_v + 0{,}92$	$1 \times 10^{-18}\ m^2$	$1 \times 10^{-18}\ m^2$

Tableau VI.7 : Inventaire des paramètres de piège « optimisés » utilisés pour simuler l'augmentation du courant d'obscurité dans DAAN pour le composant JADE.

Contrairement au cas précédent, pour le JADE, la section efficace de capture de trous de la tri-lacune $V_3^{-/0}$ a été multipliée d'un facteur 2 par rapport à celle considérée par défaut (Tableau VI.5). Les paramètres de pièges de la bilacune sont inchangés par rapport au cas référence.



(a)



(b)

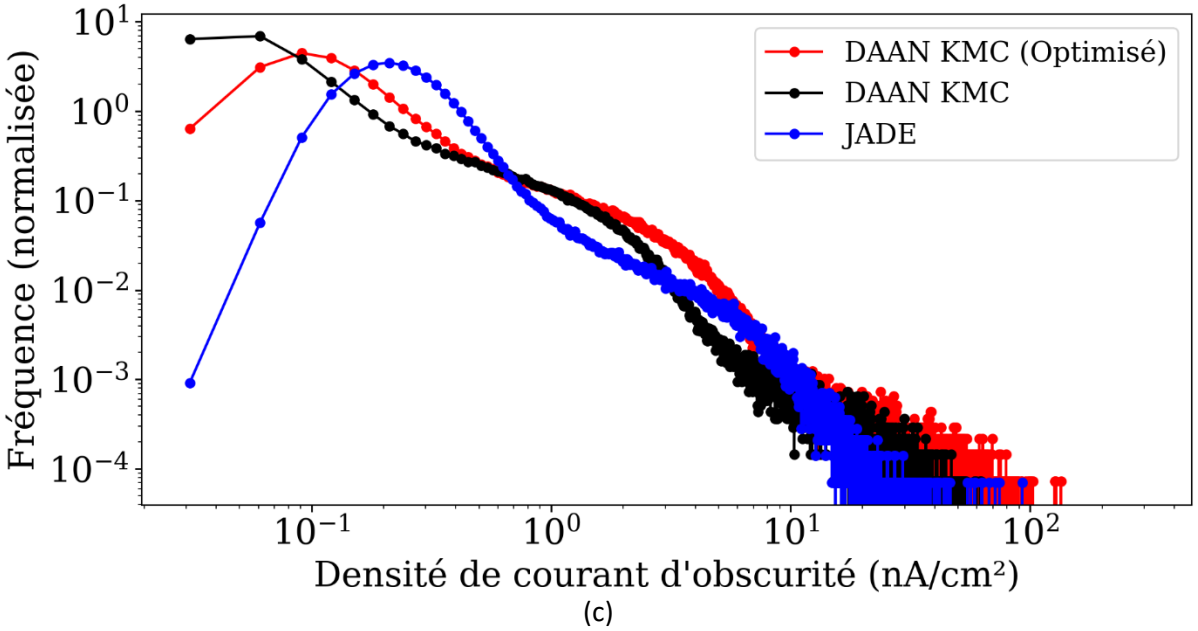


Figure VI.11 : Distributions du courant d'obscurité après irradiation pour mesurée expérimentalement à 296,15 K 1 mois après irradiation (courbe bleue) et simulée avec DAAN avec les données fournies par l'algorithme KMC avec les paramètres de pièges par défaut (courbe noire) et optimisés (courbe rouge) pour le composant JADE irradié avec des protons de (a) 60 MeV à une fluence de $7{,}28 \times 10^{10}$ p+/cm², (b) 120 MeV à une fluence de $1{,}20 \times 10^{11}$ p+/cm², (c) 185 MeV à une fluence de $1{,}66 \times 10^{11}$ p+/cm².

Hormis pour le dernier canal de la distribution expérimentale pour les protons de 120 MeV, les DCNU simulées avec les nouveaux paramètres surestiment très légèrement l'intensité des pixels chauds mesurés expérimentalement, soit d'un facteur 1,1 à 1,3 dans le pire cas. En revanche, le nombre de pixels chauds (courants supérieurs à 10 nA/cm^2) prédits est 2 à 4 fois plus élevé que le nombre mesuré expérimentalement pour n'importe quelle énergie de protons. Les courants intermédiaires (compris entre 0,7 et 6 nA/cm^2) prédits sont surestimés, et les faibles courants calculés ne coïncident pas avec ceux mesurés. Tout comme pour le composant SAPPHIRE, la différence à faible niveau de courant (inférieur à 1 nA/cm^2) est en partie expliquée par le fait que la contribution de la TID n'est pas prise en compte dans *DAAN*. Grâce à cette optimisation des paramètres de pièges, l'intensité des pixels chauds est bien prédite, mais leur nombre est clairement surestimé, et le reste de la distribution ne coïncident pas de manière satisfaisante avec les données expérimentales.

Conclusions des études de sensibilités paramétriques

Nous avons constaté dans ces études que même si les valeurs de sections efficaces de capture de trous sont en accord avec la littérature, elles ont dû être ajustées pour faire coïncider au mieux la queue de distribution simulée et expérimentale. C'est principalement la valeur de la section efficace de capture de trous de la tri-lacune qui a servi de paramètre d'ajustement, car ce défaut est un fort contributeur du courant d'obscurité grâce à son niveau d'énergie selon la théorie SRH. De plus, il n'existe que deux jeux de données disponibles dans la littérature à notre connaissance pour évaluer ces sections efficaces.

Le fait que les résultats de simulation fournis par notre méthode KMC ne concordent pas entièrement avec les résultats expérimentaux provient certainement de la méthode de calcul. Nous avons considéré en première approximation que chaque interaction nucléaire produisait en moyenne une population type de défauts représentée

avec des proportions fixées. Cependant, nous savons d'après les études statistiques réalisées sur les résultats de l'algorithme Kinetic Monte Carlo que la proportion finale de défauts varie suivant les simulations. Cette variation, représentée par un écart-type, n'est pas prise en compte dans notre méthode de calcul. Une méthode de calcul plus fine utilisant cet écart-type fait partie des perspectives de la thèse.

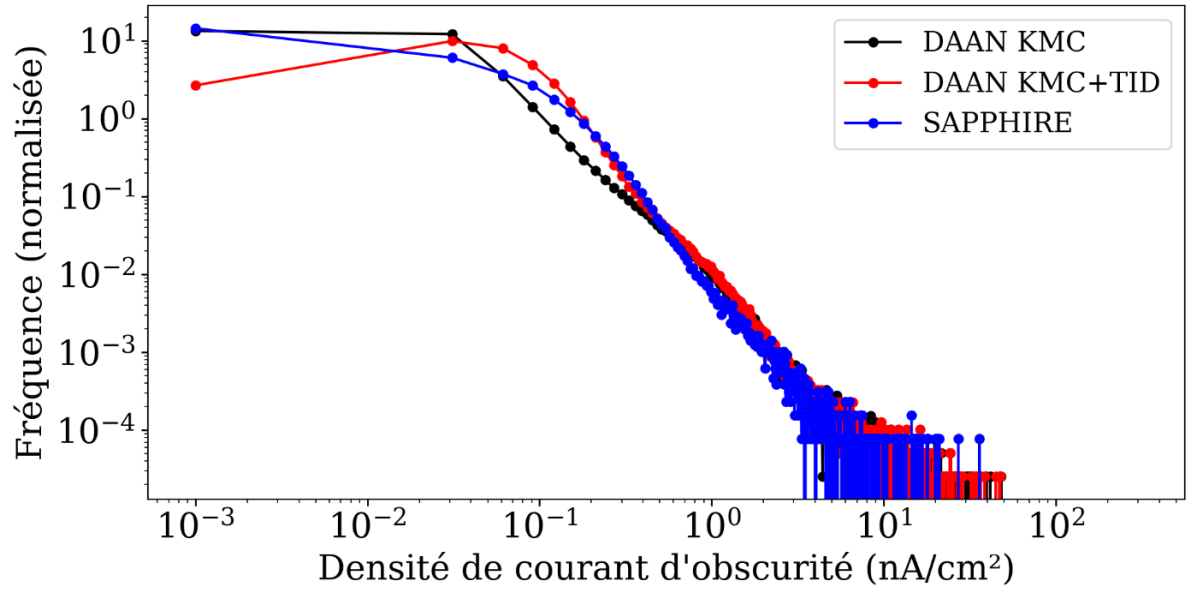
Nous pouvons également mettre en cause la population de défauts utilisée pour estimer l'augmentation du courant d'obscurité. Tout comme le souligne *Jay et al.* [4] dans leurs travaux, nous pensons également qu'une étude approfondie qui tiendrait compte des impuretés cristallines comme le carbone ou l'oxygène serait intéressante. En effet, d'après l'étude bibliographique proposée dans le chapitre II de ce manuscrit, nous savons que des complexes à base d'impuretés peuvent présenter des taux de génération de paires électron-trou élevés, et donc participer de manière non négligeable à l'augmentation du courant d'obscurité. Nous n'avons pas ajouté d'impuretés dans nos simulations KMC car leur prise en compte dans le cas de cascade de dommage est plus difficile que pour une répartition uniforme de défauts (voir chapitre V). En effet, il faudrait tout d'abord être sûr que les impuretés soient situées suffisamment près de la cascade de dommage pour interagir avec elle. La plupart des interactions se déroulant près de la cascade, les impuretés auraient très peu de chance d'interagir avec les autres défauts si elles sont trop éloignées de la cascade. Ensuite, pour prendre en compte les impuretés de manière rigoureuse, il faudrait effectuer une étude statistique. Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre V, la concentration en impuretés est tellement faible par rapport à la taille des volumes simulés qu'il faut réaliser un traitement particulier pour inclure leur influence dans nos simulations. En effet, nous avons une certaine probabilité de rencontrer une impureté dans le volume étudié à cause de leur faible concentration. Une méthode pour inclure l'influence des impuretés sur le taux de guérison serait de réaliser des simulations où l'on place volontairement un nombre d'impuretés défini en fonction de leur concentration, puis d'effectuer une moyenne sur un grand nombre de simulations pour lesquelles les volumes ne contiennent pas d'impuretés. Ce calcul spécifique fait également partie des perspectives de la thèse.

Que ce soit pour le composant JADE ou SAPPHIRE, la distribution des faibles courants d'obscurité est souvent mal estimée pour n'importe quelle énergie de proton considérée. Pour tenter d'amener quelques éléments d'amélioration à nos simulations, nous proposons d'ajouter la contribution de la dose ionisante cumulée (TID) à nos simulations dans le paragraphe suivant.

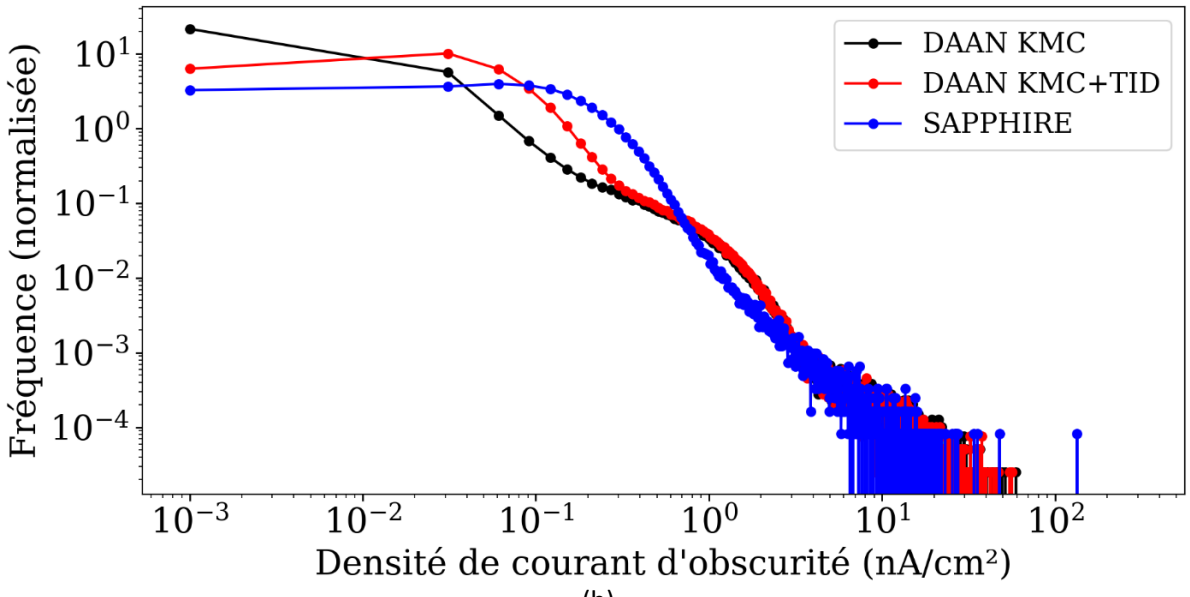
VI.3.2.6 Prise en compte de la dose ionisante cumulée (TID)

Un modèle de TID a été développé au cours des travaux de thèse. Ce modèle ainsi que les conditions de simulations sont détaillés en Annexe C. Il consiste à ajuster les mesures de l'augmentation du courant d'obscurité à l'issue d'une irradiation aux photons gamma, particules connues pour induire presque exclusivement des phénomènes de TID dans les imageurs [18], [19], selon une loi de Weibull. Ce modèle permet donc d'estimer la contribution de la TID sur l'ensemble de la matrice de pixels. Cette contribution a été ajoutée à la dégradation produite par la dose de dommage de déplacements (DDD, cf chapitre II), estimée par *DAAN*. Cette modélisation n'est valable que pour le composant SAPPHIRE, car le JADE n'a pas été irradié aux gammas. Les résultats de simulation sont ensuite comparés aux données expérimentales pour évaluer l'apport du modèle de TID (Figure VI.12). Les paramètres de pièges utilisés pour le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de $6{,}5\ MeV$

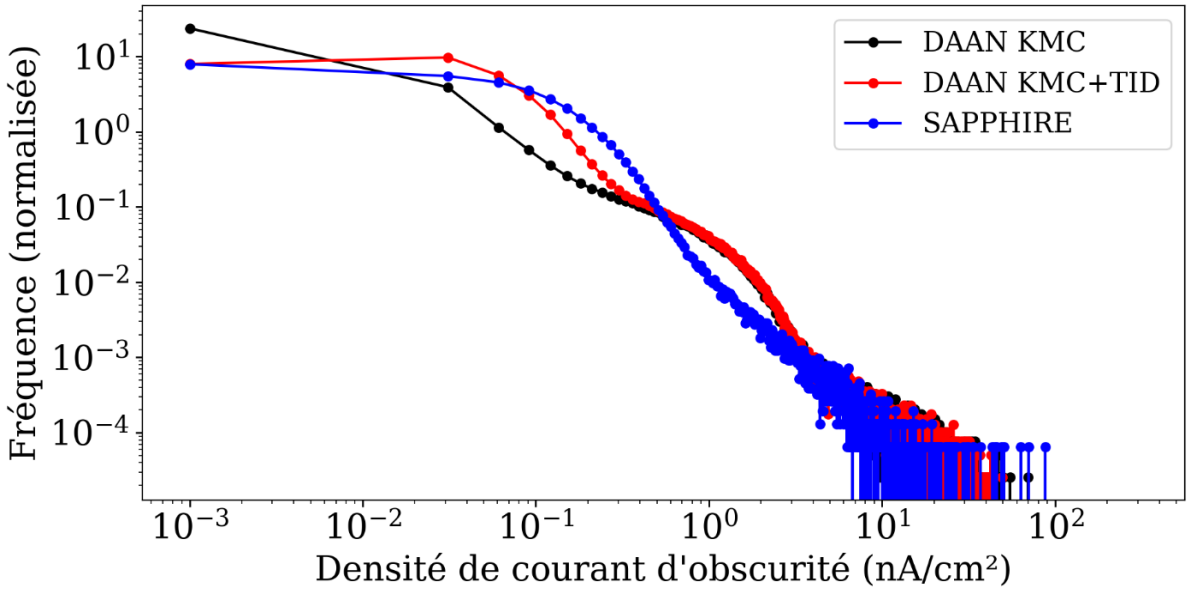
sont ceux du Tableau VI.6, tandis que les paramètres utilisés pour les irradiations aux protons de 72,8 MeV et 200 MeV sont ceux répertoriés dans le Tableau VI.5.



(a)



(b)



(c)

Figure VI.12 : Comparatifs entre les distributions de courant d'obscurité expérimentales du SAPPHIRE (courbes bleues) et de celles simulées tenant compte de la contribution de la TID (courbes rouges) et celles simulées sans la contribution de la TID (courbes noires) pour (a) $6{,}5\ MeV$ *à une fluence de* $3{,}89 \times 10^{9} p+/cm^2$*, (b)* $72{,}8\ MeV$ *à une fluence de* $2{,}52 \times 10^{10} p+/cm^2$*, (c)* $200\ MeV$ *à une fluence de* $5{,}16 \times 10^{10} p+/cm^2$*.*

Pour n'importe quelle énergie de proton, le fait d'ajouter la contribution de la TID sur la distribution du courant d'obscurité semble bénéfique. En effet, nous remarquons que la distribution des faibles courants d'obscurité (inférieurs à $0{,}7\ nA/cm^2$) est mieux prédite pour chaque distribution. Seul le premier canal de la distribution de courant d'obscurité engendrée par des protons de $6{,}5\ MeV$ semble sous-estimé. Le premier canal est toujours entaché d'une incertitude de mesure assez importante, ce qui limite la pertinence de la comparaison. Toutefois, la forme globale de la distribution pour la gamme de courants étudiés semble plus réaliste car elle est moins abrupte.

En conclusion, le modèle de TID permet à la distribution de courant d'obscurité simulée de se rapprocher de la distribution expérimentale. Un outil supplémentaire est donc proposé pour tenter d'affiner les simulations du courant d'obscurité.

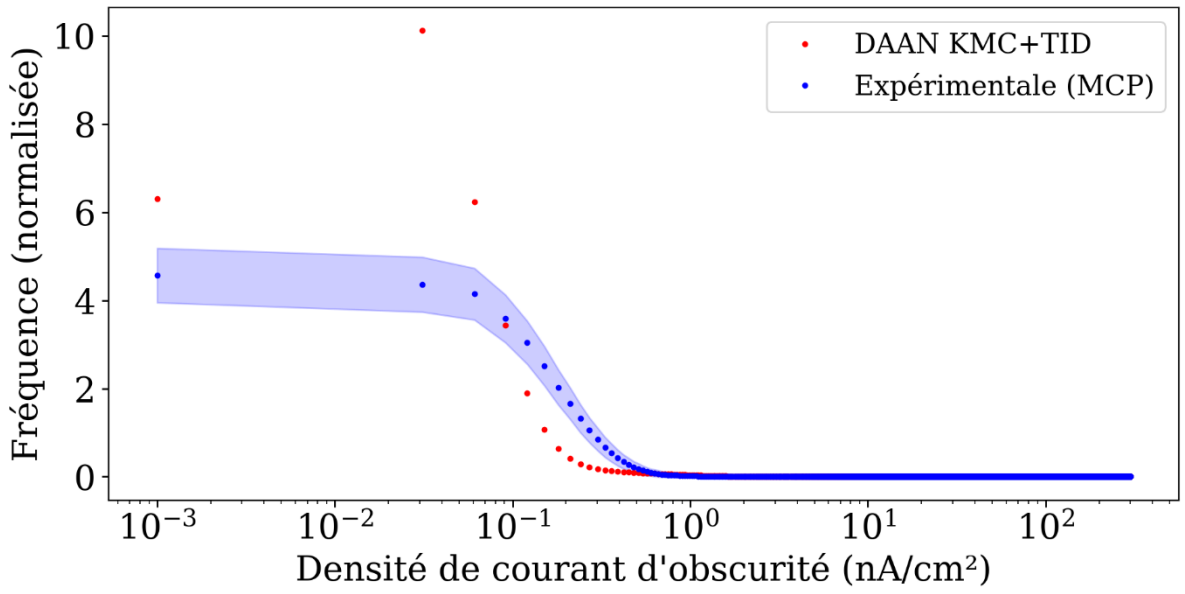
Pour finir nous allons revenir sur les incertitudes de mesures que nous mentionnons juste au-dessus. En effet, les mesures sont inévitablement entachées d'incertitudes ou d'erreurs, en partie commises par les bruits liés à la nature des signaux mesurés ou aux systèmes de mesures (cf chapitre I). Ces incertitudes sont particulièrement pénalisantes pour les faibles courants d'obscurité, sur lesquels l'endommagement lié à l'irradiation peut rester faible au regard de ces incertitudes. C'est pourquoi, avant d'effectuer le bilan de ce chapitre, nous proposons d'évaluer l'erreur potentiellement commise sur l'échantillonnage des courants d'obscurité expérimentaux et de comparer cette incertitude aux résultats de simulations obtenus dans ce chapitre.

VI.3.2.7 Evaluation de l'incertitude sur la distribution expérimentale du courant d'obscurité

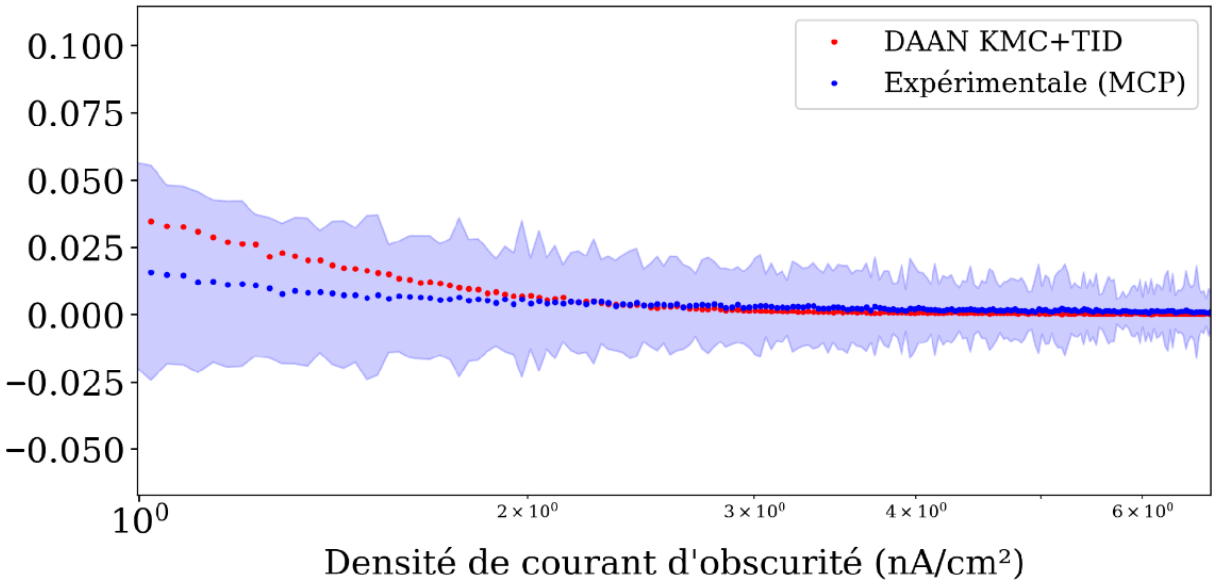
Une méthode d'estimation de l'erreur commise sur l'échantillonnage des courants d'obscurité mesurés expérimentalement est proposée en Annexe A. Elle consiste à évaluer dans un premier temps l'incertitude sur la mesure du courant d'obscurité dans un pixel. Dans un second temps, l'erreur que l'on peut commettre sur le nombre d'évènements contenus dans un canal de l'histogramme en fonction de l'incertitude de mesure sur chaque pixel est évaluée.

Tout d'abord, l'incertitude sur l'échantillonnage du courant d'obscurité est calculée pour les composants irradiés avec des protons de 6,5 MeV, 72,8 MeV et 200 MeV. Cette incertitude est ensuite ajoutée sous forme de barre d'erreur en chaque point de la distribution expérimentale. Ainsi, une « enveloppe » est créée autour de cette distribution expérimentale. De cette manière, nous pouvons déterminer si les résultats de simulation sont dans la zone d'incertitude des mesures ou non. Concernant les simulations, nous reprenons les courbes des Figure VI.12, dans le cas où l'on tient compte de la TID.

La représentation en échelle logarithmique pour les axes X et Y peut être trompeuse pour l'interprétation de l'incertitude sur ces courbes. En effet, à cause de cette représentation, les barres d'erreur pour les forts courants d'obscurité semblent très grandes comparées aux plus faibles courants alors que ce n'est pas le cas en réalité. Ceci s'explique par le fait que nous ne pouvons pas représenter de valeurs négatives, or il arrive qu'avec les barres d'erreur, l'amplitude peut être inférieure à 0. C'est pourquoi nous représentons la DCNU en échelle semi-logarithmique en X. La comparaison entre les simulations et les données expérimentales avec les incertitudes associées est présentée en Figure VI.13 pour des protons de 72,8 MeV :



(a)



(b)

Figure VI.13 : (a) Comparatif des distributions expérimentales (en bleues) et simulées (en rouges) pour des protons de $72{,}8\ MeV$ (fluence de $2{,}52 \times 10^{10}\ p^+/cm^2$, mesures réalisées 1 mois après irradiation à $294{,}15\ K$) en échelle semi-logarithmique en X. La surface bleue correspond à « l'enveloppe » d'incertitude calculée grâce à la méthode proposée en Annexe A. Cette enveloppe est délimitée par la barre d'erreur en chaque point de la distribution. Le zoom (b) permet de constater que le reste des points de simulation sont situés dans l'incertitude expérimentale.

D'après la Figure VI.13, les premiers points de la distribution ne sont pas situés dans l'enveloppe d'incertitude estimée selon notre méthode. Cela signifie qu'il semble nécessaire d'améliorer la prédiction sur les faibles courants d'obscurité (1,4 à 2,75 fois trop de pixels comptabilisés dans les premiers canaux de la distribution dans le pire cas). En revanche pour les courants plus élevés, les points de simulation sont situés dans l'intervalle d'incertitude des données expérimentales. Pour des courants d'obscurité plus élevé (supérieurs à $1\ nA/cm^2$), les points de simulation sont proches de l'expérimentale et ne sortent pas de l'enveloppe d'incertitude.

Malgré les divergences observées entre les distributions expérimentales et simulées au cours des paragraphes précédents, les points de simulations se trouvent dans l'enveloppe d'incertitude que nous avons déterminée à partir de la méthode proposée en Annexe A. Le même constat a été effectué pour les composants SAPPHIRE irradiés avec des protons de $6{,}5\ MeV$ (présenté en Annexe A) et $200\ MeV$. Cela nous encourage à penser que notre outil de simulation progresse pas à pas vers la distribution expérimentale réelle.

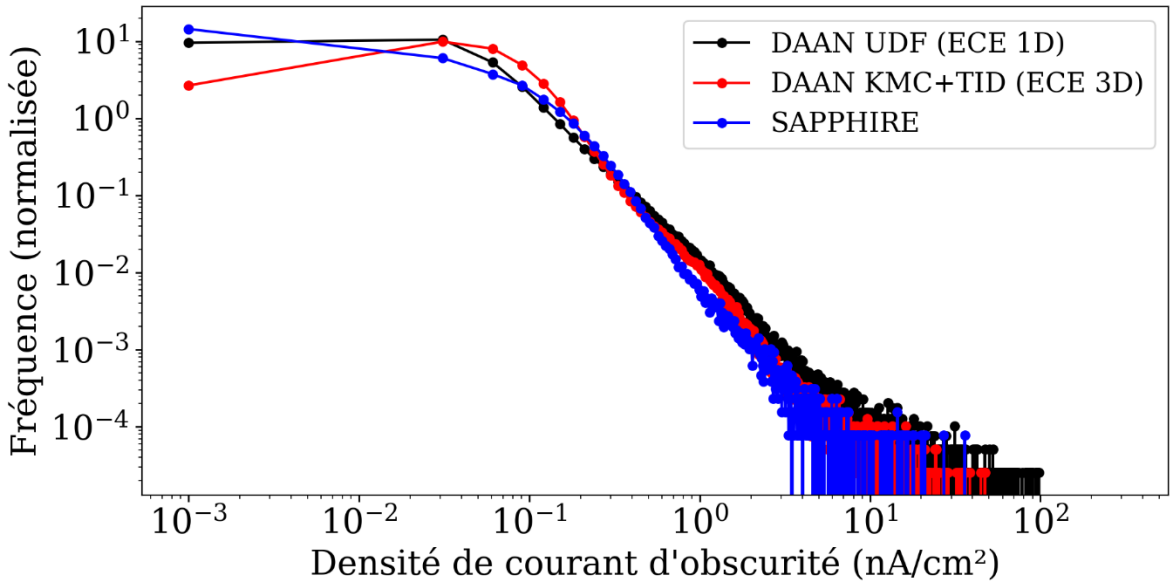
VI.4 Bilan sur les différentes méthodes de calcul du courant d'obscurité

VI.4.1 Evolution de la méthode de calcul du courant d'obscurité

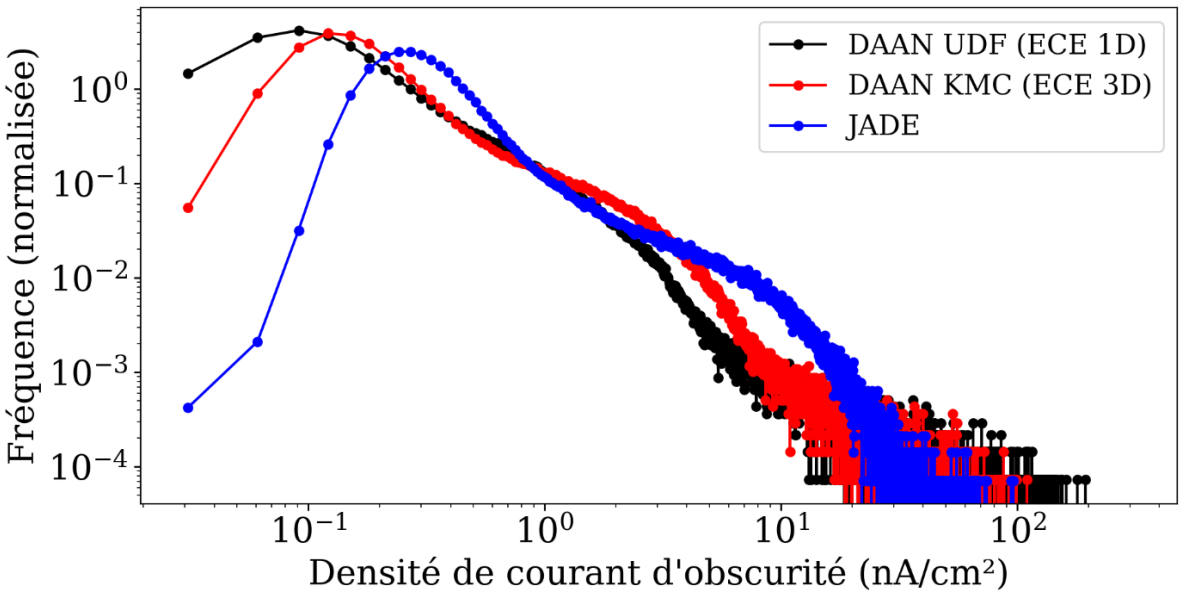
La méthode de calcul d'estimation de l'augmentation du courant d'obscurité a évolué progressivement au cours des travaux de thèse. Dans un premier temps, les effets du champ électrique sont passés d'une modélisation en une dimension à trois dimensions (cf chapitre IV). Puis nous avons considéré une nouvelle manière de convertir le nombre de déplacements atomiques en courant d'obscurité. Cette nouvelle méthode repose sur une population type de défauts et un taux de guérison moyen fournis par l'algorithme Kinetic Monte Carlo. En utilisant le taux de génération de paires électron-trou de chaque piège, un tirage aléatoire d'un facteur de guérison et des effets de champ électrique en trois dimensions, nous obtenons un nouveau facteur de conversion. Nous proposons

dans la dernière partie de ce chapitre et de ce manuscrit de comparer les résultats de simulation avec les précédentes versions de *DAAN*.

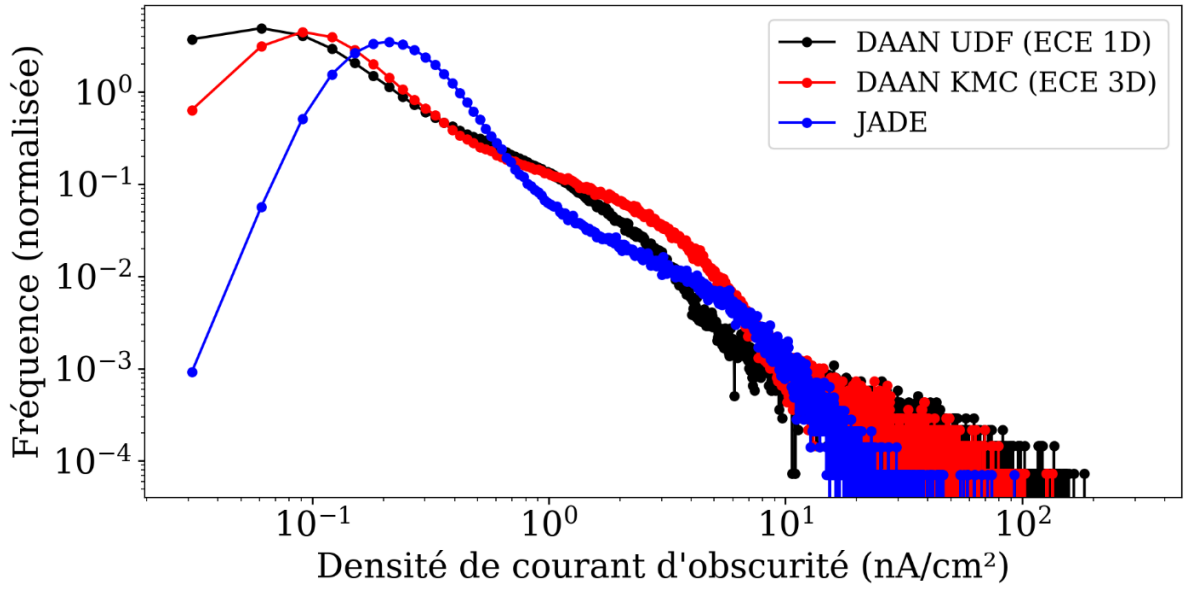
Tout d'abord, nous comparons les résultats de simulation de *DAAN* où nous utilisions le modèle d'effets de champ électrique en une dimension et le facteur de dommage universel (cf chapitre III) avec la méthode de calcul proposée dans ce chapitre (paramètres de pièges optimisés). Pour évaluer le facteur d'amplification lié aux effets de champs électriques utilisé dans l'ancienne version de *DAAN*, nous avons repris les paramètres de pièges standards, à savoir une bilacune située à $E_v + 0{,}71\ eV$ avec des sections efficaces de capture d'électrons et de trous égales à $5 \times 10^{-19}\ m^2$. Ce comparatif est présenté en Figure VI.14 :



(a)



(b)

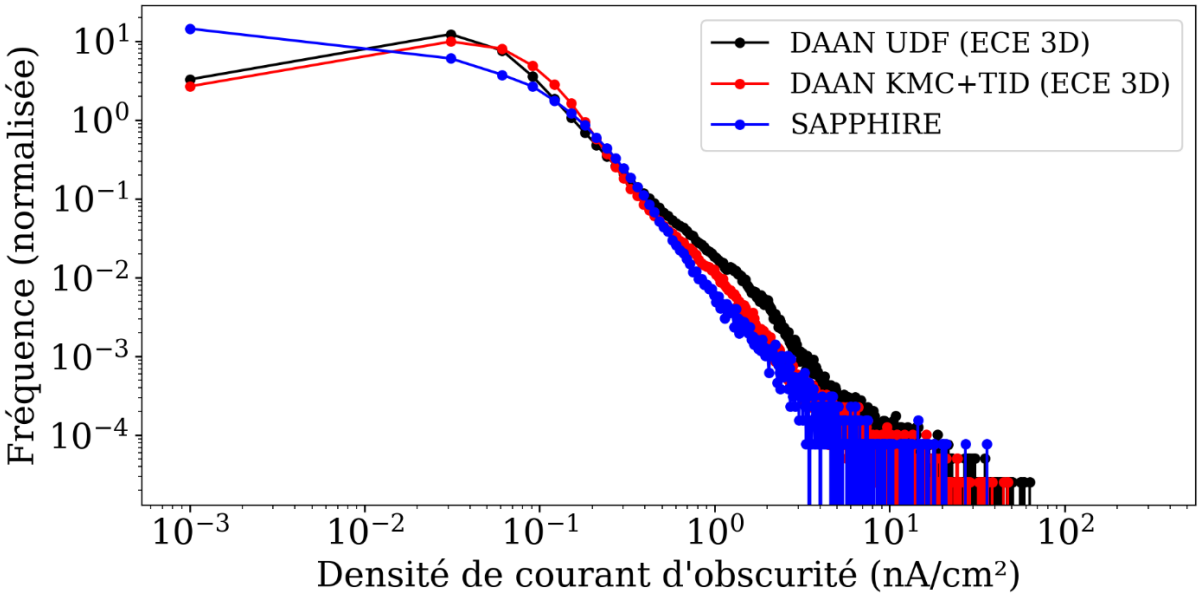


(c)

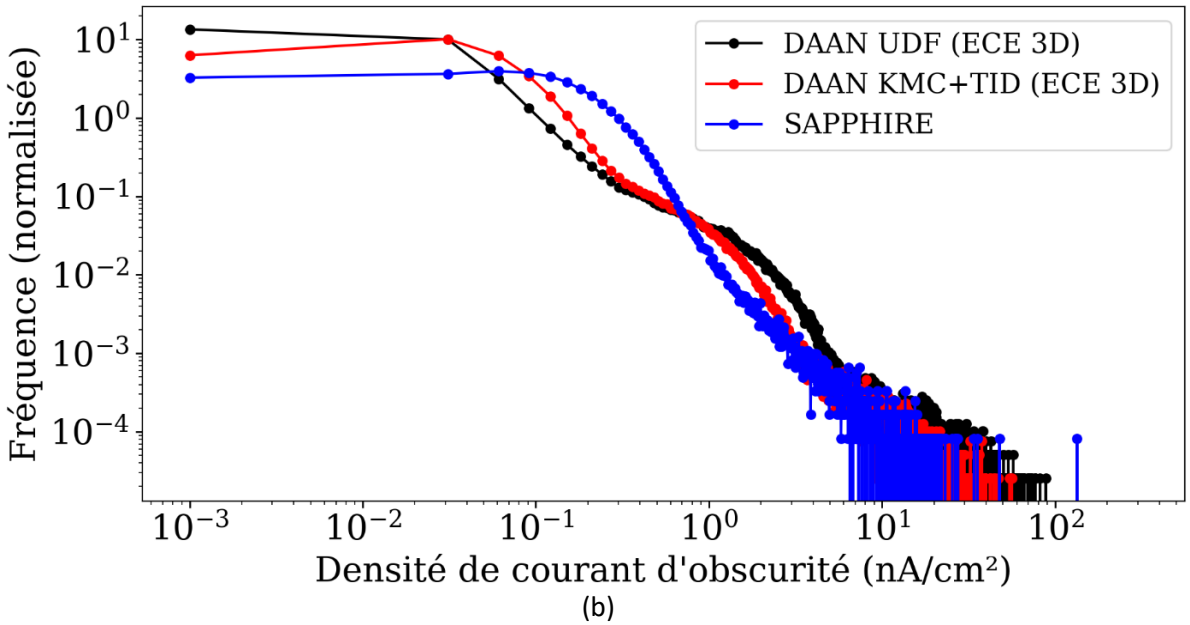
Figure VI.14 : Comparaison entre le modèle d'estimation du courant d'obscurité utilisé avant la thèse et celui décrit dans ce chapitre avec les paramètres de pièges optimisés pour (a) le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^9\ p+/cm^2$*, (b) pour le composant JADE irradié avec des protons de 60 MeV, (c) pour le composant JADE irradié avec des protons de 185 MeV. Les températures de mesure pour le SAPPHIRE et le JADE sont respectivement de 294,15 K et 296,15K. Les paramètres de pièges utilisés pour l'ancien modèle sont les paramètres standards d'une bilacune décrits dans le chapitre IV. La contribution de la TID est ajoutée au nouveau modèle pour le composant SAPPHIRE uniquement.*

Les conséquences des nouvelles hypothèses de calcul sont clairement visibles sur ces courbes. Par rapport à la méthode d'estimation utilisée avant les travaux de thèse, le nombre et l'intensité des pixels chauds est réduit d'un facteur 1,1 à 2,5 environ suivant les simulations. Ceci est la conséquence directe de la modélisation en 3D des effets de champ électrique. La forme globale de la DCNU est également améliorée, puisque la nouvelle prédiction des courants est plus proche des données expérimentales que l'ancienne méthode.

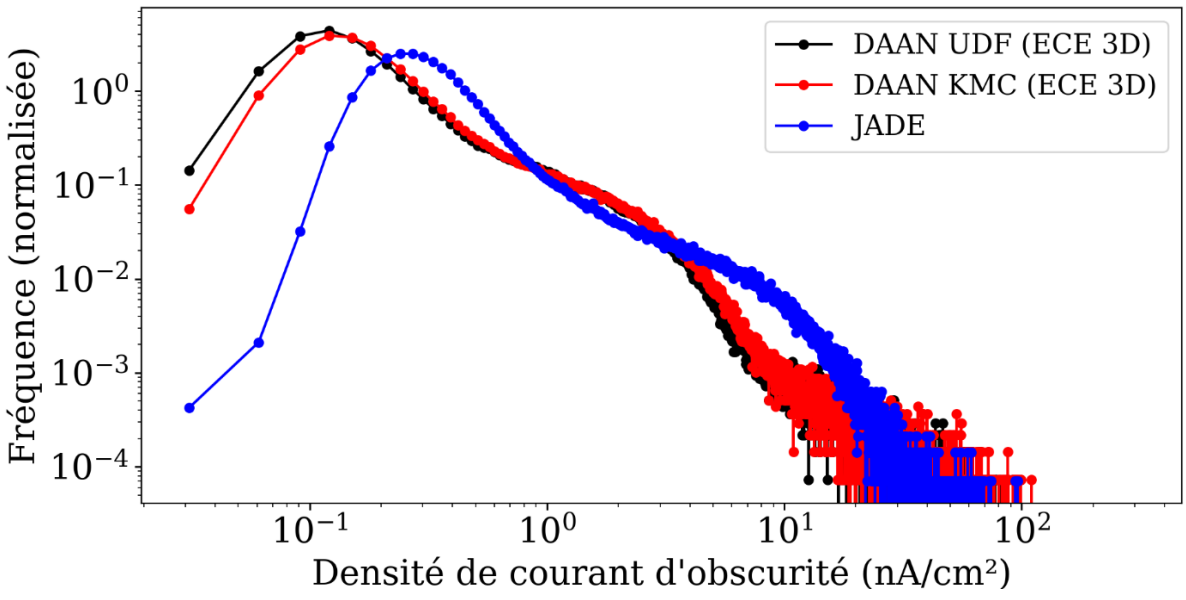
Enfin, il est intéressant de comparer les résultats de simulation fournis par la méthode d'estimation décrite dans ce chapitre avec celle proposée dans le chapitre IV. Pour rappel cette méthode considère des effets de champ électrique en 3D et utilise le facteur de dommage universel pour convertir le nombre d'atomes déplacés en courant d'obscurité. Pour calculer les effets de champ électrique pour cette méthode, nous reprenons les paramètres de pièges standards utilisés pour la méthode UDF pour tracer les Figure VI.14 :


DAAN UDF (ECE 3D)
DAAN KMC+TID (ECE 3D)
SAPPHIRE
Fréquence (normalisée)
Densité de courant d'obscurité (nA/cm²)

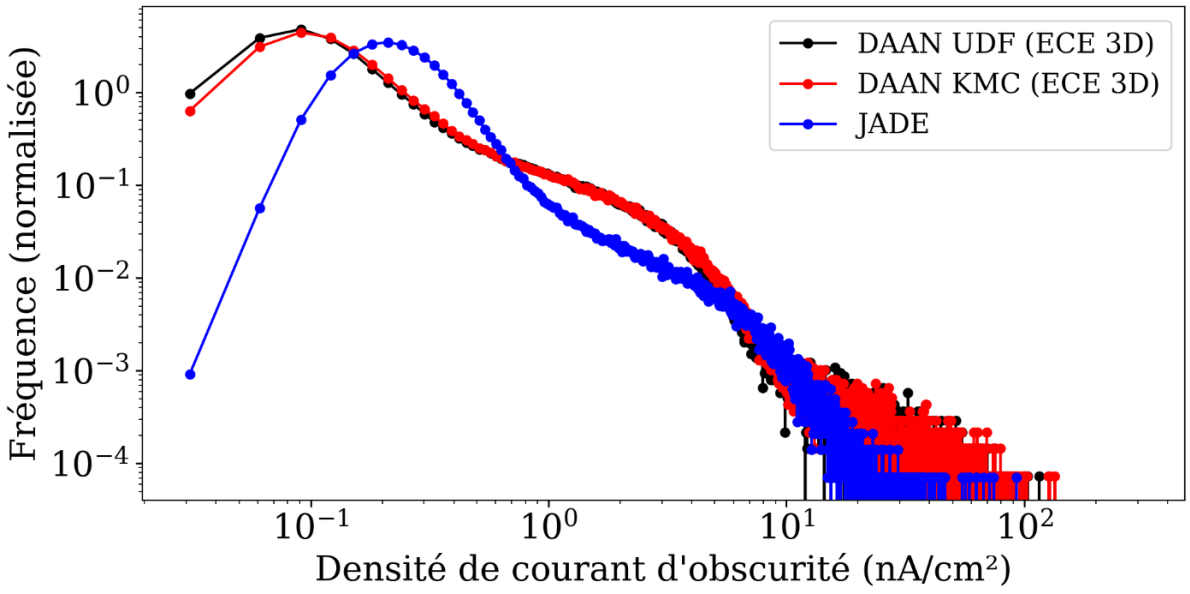
(a)


DAAN UDF (ECE 3D)
DAAN KMC+TID (ECE 3D)
SAPPHIRE
Fréquence (normalisée)
Densité de courant d'obscurité (nA/cm²)

(b)


DAAN UDF (ECE 3D)
DAAN KMC (ECE 3D)
JADE
Fréquence (normalisée)
Densité de courant d'obscurité (nA/cm²)

(c)



(d)

Figure VI.15 : Comparaison entre le modèle d'estimation proposé dans le chapitre IV et celui décrit dans ce chapitre pour (a) le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^{9}\ p+/cm^{2}$*, (b) le composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 72.8 MeV à une fluence de* $2{,}52 \times 10^{10}\ p+/cm^{2}$ *(c) pour le composant JADE irradié avec des protons de 60 MeV à une fluence de* $7{,}28 \times 10^{10}\ p+/cm^{2}$*, (c) pour le composant JADE irradié avec des protons de 185 MeV à une fluence de* $1{,}66 \times 10^{11}\ p+/cm^{2}$*. Les températures de mesure pour le SAPPHIRE et le JADE sont respectivement de 294,15 K et 296,15K. Les paramètres de pièges utilisés pour le modèle du chapitre IV sont les paramètres standards d'une bilacune décrits dans ce chapitre. La contribution de la TID est ajoutée au nouveau modèle pour le composant SAPPHIRE uniquement.*

D'après les Figure VI.15, des résultats similaires entre les deux méthodes sont obtenus. De légères différences sont observées sur la queue de distribution ou sur les faibles courants d'obscurité, par exemple pour le SAPPHIRE, la nouvelle méthode réduit le nombre et l'intensité des pixels chauds d'un facteur d'environ 1,6 dans le pire cas, mais pour les deux méthodes et les paramètres considérés les résultats sont proches. Cela signifie que la chaîne de simulation alliant l'application *GEANT4 ARAMIS*, l'algorithme Kinetic Monte Carlo et *DAAN* avec le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions conduit à des estimations de courants d'obscurité équivalentes à celles réalisées par l'intermédiaire du facteur de dommage universel proposé par *Srour*. Cette chaîne de simulation constitue ainsi une alternative analytique au facteur de dommage universel qui est une méthode empirique. Les analyses de ce chapitre peuvent indiquer que le facteur de dommage universel est un coefficient correspondant à une dégradation moyenne du courant d'obscurité, causée par une population de défauts hétérogène et dominée par la bilacune [1], [20].

VI.4.2 Discussion sur le facteur de dommage universel

La comparaison entre les DCNU simulées par l'intermédiaire de notre chaîne de simulation (*ARAMIS*, algorithme KMC, *DAAN*, modèle d'effets de champ électrique 3D) et celles simulées utilisant le facteur de dommage universel proposé par *Srour* et *Lo* (K_{dark}) et notre modèle d'effets de champ électrique 3D (cf chapitre IV) montre que les deux méthodes fournissent des résultats similaires. Cela signifie qu'en moyenne le coefficient permettant de convertir le nombre de déplacements atomiques N_d en densité de courant d'obscurité ΔJ est du même ordre de grandeur pour les deux méthodes. En reprenant les équations (III.18) et (III.45) du chapitre III, nous exprimons l'augmentation de la densité de courant d'obscurité ΔJ_j calculée pour chaque interaction nucléaire j selon la méthode

UDF (facteur de dommage universel amplifié avec les effets de champ électrique modélisés en 3D) exprimé en nA/cm^2 :

$$\Delta J_j(UDF) = N_{d,j} \times qWK_{dark}(t,T)\frac{2T_d}{V_{dép.}\rho} \times \left(\frac{\lambda_{g_j}}{\langle\lambda_g\rangle}\right) \times 10^9 \quad \text{(VI.3)}$$

En réécrivant l'équation (VI.2), nous obtenons également l'expression du calcul d'une densité de courant d'obscurité par la méthode KMC :

$$\Delta J_j(KMC) = N_{d,j} \times \frac{q}{S_{dép.}} \times \langle g' \rangle_j \times (1 - AF_j) \times 10^9 \quad \text{(VI.4)}$$

Avec pour rappel q la charge élémentaire, W la profondeur du pixel (en cm), $V_{dép.}$ la taille du volume en déplétion du pixel (en cm^3), $S_{dép.}$ la surface du volume en déplétion (en cm^2), T_d l'énergie seuil de déplacement (eV) et ρ la masse volumique du silicium (g/cm^3). Le facteur de conversion correspondant à chaque méthode est donc obtenu en supprimant le terme $N_{d,j}$ des équations (VI.3) et (VI.4). Nous avons évalué la moyenne du facteur de conversion pour la méthode KMC et pour la méthode UDF. Nous notons ce coefficient de conversion moyen α (exprimé en $nA/cm^2\ pour\ 1\ dépl.atom.$). Ce coefficient moyen est calculé en prenant le nombre total d'interactions nucléaires N qui se sont produites dans la matrice de pixels. Pour la méthode UDF, nous obtenons :

$$\alpha(UDF) = \langle qWK_{dark}(t,T)\frac{2T_d}{V_{dép.}\rho} \times \left(\frac{\lambda_{g_N}}{\langle\lambda_g\rangle}\right)\rangle \times 10^9 \cong qWK_{dark}(t,T)\frac{2T_d}{V_{dép.}\rho} \times 10^9 \quad \text{(VI.5)}$$

L'équation (VI.5) a pu être simplifiée car le terme $K_{dark}(t,T) \times \left(\frac{\lambda_{g_N}}{\langle\lambda_g\rangle}\right)$ est en moyenne égal à $K_{dark}(t,T)$ puisque le facteur d'amplification normalisé (cf chapitre IV) n'ajoute qu'un effet dispersif au facteur $K_{dark}(t,T)$. Nous exprimons également le coefficient moyen de conversion pour la méthode KMC :

$$\alpha(KMC) = \langle\frac{q}{S_{dép.}} \times \frac{\sum_{i=0}^{N_{déf.}} \lambda_{g,N,i} \times g_i}{N_{déf.}} \times (1 - AF_N)\rangle \times 10^9 \quad \text{(VI.6)}$$

Nous avons également évalué le facteur de conversion de la méthode KMC dans le cas simplifié où le champ électrique est nul (le terme $\lambda_{g,j,i}$ de l'équation (VI.6) est par conséquent égal à 1). Pour cette étude, nous utilisons les paramètres de pièges optimisés (Tableau VI.6) correspondant à une irradiation aux protons de 6,5 MeV (Figure VI.15.a) et le taux de guérison associé à des PKA de 1 keV (Tableau VI.1). Nous avons choisi ce cas car c'est avec ces jeux de paramètres que nous obtenons la meilleure correspondance entre simulation et mesure. Le facteur de conversion moyen de chaque méthode est présenté dans le Tableau VI.8 (exprimé en nA/cm^2 par déplacement atomique) :

$\alpha(KMC)$	$\alpha(UDF)$	$\alpha(KMC, \emptyset\ ECE)$
$8{,}22 \times 10^{-4}$	$1{,}35 \times 10^{-3}$	$3{,}74 \times 10^{-4}$

Tableau VI.8 : Facteur moyen de conversion calculé pour la méthode KMC, la méthode UDF et la méthode KMC sans effets de champ électrique. Le facteur moyen est exprimé en $nA/cm^2\ pour\ 1\ déplacement\ atomique$.

En moyenne, le facteur de conversion de la méthode UDF est 1,66 fois plus grand que celui de la méthode KMC. A titre de comparaison, pour les jeux de paramètres considérés, le facteur de conversion de la méthode KMC est en moyenne 2,2 fois plus élevé que pour la méthode KMC sans effets de champ électrique. Sachant que la méthode KMC et la méthode UDF donnent des résultats similaires, il est possible de se demander si le facteur de dommage universel ne comporte pas une faible contribution des effets de champ électrique. Cette contribution serait faible étant donné que ce coefficient a été mesuré principalement sur des composants CDD, capteurs présentant en général des champs électriques moins intenses que dans les composants CMOS. Si elle existait, cette contribution serait également moyennée, puisqu'elle dépend des composants testés et des pièges qui ont été introduits au cours du bombardement énergétique. Même si la simulation de la DCNU par la méthode KMC est sensible aux paramètres de pièges (voir paragraphe VI.3.2.4 et VI.3.2.5), les résultats fournis par cette méthode sont du même ordre de grandeur que ceux de la méthode UDF. En utilisant des paramètres de pièges représentatifs de la littérature et une méthodologie validée par comparaison avec d'autres travaux de recherche, la méthode KMC développée au cours de la thèse constitue une alternative potentielle à la méthode UDF.

VI.5 Conclusion du chapitre

Dans le dernier chapitre de ce manuscrit, une chaîne de simulation originale dédiée au calcul du courant d'obscurité est proposée puis comparée aux mesures expérimentales. Le premier maillon de cette chaîne est l'application *GEANT4 ARAMIS*. Avec cet outil, nous sommes en mesure de modéliser les cascades de dommage engendrées par un proton ou un noyau de recul de silicium (PKA).

Le deuxième élément de cette chaîne de simulation est l'algorithme Kinetic Monte Carlo (KMC). Au moyen de ce programme, nous pouvons évaluer le facteur de guérison et la population finale de défauts au bout d'un mois après que la cascade ait été créée. Nous avons fait le choix de réaliser des simulations KMC sur des cascades de dommage issues de PKA plutôt que de protons. Cette stratégie permet de réduire le temps de calcul de l'algorithme KMC. Afin de définir quelle est l'énergie du PKA la plus représentative, une étude bibliographique ainsi que des simulations *GEANT4* avec des protons couvrant un large spectre en énergie ont été réalisées. L'énergie typique des PKA produits par des protons inférieurs à $10\ MeV$ a été estimée au keV. Cette énergie croît avec l'énergie des protons incidents. Elle a été estimée à $10\ keV$ pour des protons de plusieurs dizaines de MeV. Nous avons également fait des calculs avec des PKA de $100\ keV$ pour être plus représentatif des produits issus des réactions nucléaires. Il ne nous a pas été possible de monter plus haut en énergie pour des raisons de temps de calcul. Ensuite, afin de connaître la population type de défauts et le facteur de guérison moyen et son écart-type associé pour une énergie de PKA donnée, une étude statistique a été effectuée sur les résultats de simulation KMC.

Ces informations sont ensuite fournies au dernier maillon de la chaîne de simulation, l'outil de prédiction du courant d'obscurité après irradiation *DAAN*. Grâce à ces données, il est possible d'estimer quelle est la population type de pièges que l'on peut retrouver après des temps de guérison longs. Afin de s'affranchir du facteur de dommage universel, utilisé dans les versions précédentes de *DAAN*, un nouveau coefficient de conversion entre le nombre de déplacements atomiques et le courant d'obscurité est proposé. Ce coefficient correspond à un taux de génération de paires électron-trou moyen de la population type de défauts estimée par le KMC. Comme nous considérons que le champ électrique a une influence sur le taux de génération de charges des pièges, le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions décrit au cours du chapitre IV est utilisé. Le taux de génération de chaque piège de la population est donc amplifié selon ce modèle d'effets de champ électrique. Enfin, un facteur de guérison est tiré aléatoirement dans un gaussienne de moyenne et d'écart-type

définis par les études statistiques sur le taux de guérison. Il permet ainsi de connaître la proportion de défauts survivants après le processus de réorganisation de la cascade de dommage.

Cette nouvelle méthode de calcul a ensuite été comparée aux mesures expérimentales du courant d'obscurité. Ces nouvelles hypothèses de calcul permettent d'obtenir des résultats similaires à la méthode utilisant le facteur de dommage universel de *Srour*. Nous constatons même une amélioration globale de la forme de la DCNU pour certaines irradiations. De cette manière, nous avons montré que cette chaîne de simulation est une alternative possible au facteur de dommage universel.

De plus, la contribution de la dose ionisante cumulée a également été ajoutée au moyen d'un modèle proposé en annexe, et permet de mieux simuler la forme de la DCNU pour les faibles courants d'obscurité dans le cas spécifique du composant SAPPHIRE. Enfin, une méthode d'estimation de l'incertitude sur la distribution expérimentale de courant d'obscurité est également proposée en annexe. Elle a été utilisée pour affiner notre comparaison entre les mesures et les simulations. Grâce à ce calcul d'incertitude, nous avons constaté que la plupart des points de simulations issues de ce chapitre étaient situés dans la zone d'incertitude de la distribution de courant d'obscurité, sauf les faibles courants. Cette dernière analyse nous encourage donc à penser que notre outil numérique de prédiction du courant d'obscurité tend progressivement vers la distribution réelle mesurée.

Cependant, davantage d'efforts doivent être fournis pour résoudre certaines limitations à cette chaîne de simulation. En premier lieu, même si les simulations KMC nous permettent d'estimer quelle sera la nature des défauts présents à l'état final, l'algorithme en l'état actuel ne permet de prédire dans quel état de charge seront ces défauts. Or l'état de charge est une information importante, puisqu'elle détermine en partie les propriétés électriques des défauts, et donc leur contribution à l'augmentation du courant d'obscurité. De manière similaire, les données disponibles dans la littérature concernant les sections efficaces de capture d'électrons et de trous des petits amas de défauts comme les tri-lacunes ou tri-interstitiels sont peu nombreuses voire inexistantes à notre connaissance. Ce manque de données conduit à une incertitude sur le calcul du taux de génération de paires électron-trou de ce type de défauts. Il est donc difficile d'évaluer avec précision leur contribution à la génération du courant d'obscurité. Enfin, nous avons considéré que pour les hautes énergies de protons (supérieures à $100\ MeV$), l'énergie d'un PKA était de l'ordre de $10\ keV$. Cependant, ce choix peut prêter à discussion, car une énergie de PKA plus élevée est peut-être plus représentative des protons de hautes énergies. En conséquence, la population de type de défauts et le facteur de guérison utilisé ne correspondent peut-être pas tout à fait à la dégradation réellement subie par le composant à ces énergies. Il faut rappeler cependant que l'utilisation de PKA de $10\ keV$ est contraint par le temps de calcul qui nous empêche de monter plus haut en énergie pour les PKA. D'autres voies d'amélioration de cette chaîne de simulation sont proposées dans les perspectives de ces travaux de thèse.

Bibliographie du chapitre

[1] J. R. Srour et D. H. Lo, « Universal damage factor for radiation-induced dark current in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, n° 6, p. 2451–2459, 2000.

[2] M. Raine *et al.*, « Simulation of Single Particle Displacement Damage in Silicon; Part I: Global Approach and Primary Interaction Simulation », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 133-140, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2615133.

[3] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single Particle Displacement Damage in Silicon; Part II: Generation and Long-Time Relaxation of Damage Structure », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 64, n° 1, p. 141-148, janv. 2017, doi: 10.1109/TNS.2016.2628089.

[4] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single-Particle Displacement Damage in Silicon; Part III: First Principle Characterization of Defect Properties », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 2, p. 724-731, févr. 2018, doi: 10.1109/TNS.2018.2790843.
[5] S. Wood *et al.*, « Simulation of Radiation Damage in Solids », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 28, n° 6, p. 4107-4112, déc. 1981, doi: 10.1109/TNS.1981.4335684.
[6] J. R. Srour et J. W. Palko, « Displacement Damage Effects in Irradiated Semiconductor Devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 60, n° 3, p. 1740-1766, juin 2013, doi: 10.1109/TNS.2013.2261316.
[7] C. Inguimbert, S. Duzellier, T. Nuns, et F. Bezerra, « Using Subthreshold Heavy Ion Upset Cross Section to Calculate Proton Sensitivity », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 54, n° 6, p. 2394-2399, déc. 2007, doi: 10.1109/TNS.2007.909983.
[8] G. D. Watkins, « Intrinsic defects in silicon », *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 3, n° 4, p. 227-235, août 2000, doi: 10.1016/S1369-8001(00)00037-8.
[9] K. Nordlund *et al.*, « Primary radiation damage: A review of current understanding and models », *J. Nucl. Mater.*, vol. 512, p. 450-479, déc. 2018, doi: 10.1016/j.jnucmat.2018.10.027.
[10] A. O. Evwaraye et E. Sun, « Electron-irradiation-induced divacancy in lightly doped silicon », *J. Appl. Phys.*, vol. 47, n° 9, p. 3776-3780, sept. 1976, doi: 10.1063/1.323260.
[11] I. D. Konozenko, A. K. Semenyuk, et V. I. Khivrich, « Radiation Defects Created by Co60 γ-Rays in p- and n-Type Si of High Purity », *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys. - PHYS STATUS SOLIDI B-BASIC SO*, vol. 35, p. 1043-1052, janv. 1969, doi: 10.1002/pssb.19690350257.
[12] K. Gill, G. Hall, et B. MacEvoy, « Bulk damage effects in irradiated silicon detectors due to clustered divacancies », *J. Appl. Phys.*, vol. 82, n° 1, p. 126-136, juill. 1997, doi: 10.1063/1.365790.
[13] P. Arnolda, « La création de défauts de déplacements atomiques dans le silicium et son impact sur les composants électroniques à applications spatiales », ISAE Toulouse, 2011.
[14] P. W. Marshall, C. J. Dale, et E. A. Burke, « Proton-induced displacement damage distributions and extremes in silicon microvolumes charge injection device », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 37, n° 6, p. 1776-1783, déc. 1990, doi: 10.1109/23.101191.
[15] V. P. Markevich *et al.*, « Structure and electronic properties of trivacancy and trivacancy-oxygen complexes in silicon », *Phys. Status Solidi A*, vol. 208, n° 3, p. 568-571, 2011, doi: 10.1002/pssa.201000265.
[16] C. Virmontois, « Analyse des effets des déplacements atomiques induits par l'environnement radiatif spatial sur la conception des imageurs CMOS », Toulouse, ISAE, 2012.
[17] J. W. Palko et J. R. Srour, « Amorphous Inclusions in Irradiated Silicon and Their Effects on Material and Device Properties », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 6, p. 2992-2999, déc. 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.2006751.
[18] T. Nuns, « Etude du comportement des capteurs d'images CCD commerciaux en ambiance spatiale », p. 142.
[19] E. Martin, « Etude physique de la dégradation et modèles pour l'assurance durcissement des capteurs d'image en environnement spatial », PhD Thesis, Toulouse, ISAE, 2012.
[20] C. Tivarus et W. C. McColgin, « Dark Current Spectroscopy of Irradiated CCD Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 3, p. 1719-1724, juin 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.919263.

Conclusions et Perspectives

Les capteurs d'image embarqués dans les satellites ont des fonctions de premier plan qui permettent la réalisation des objectifs scientifiques et d'assurer l'intégrité des satellites au cours de leurs missions. Cependant, ces composants électroniques sont sensibles au rayonnement énergétique issu des différentes sources qui composent l'environnement spatial. Les interactions entre le rayonnement énergétique et la matière vont détériorer les fonctionnalités de l'imageur, parfois jusqu'à un niveau critique. Cette dégradation est en partie due aux nombreux atomes éjectés le long du parcours d'une particule énergétique. Cette perturbation cristalline va engendrer une réorganisation de ces défauts cristallins, qui peuvent devenir électriquement actifs quelques instants après irradiation. En conséquence, une augmentation du courant d'obscurité moyen et de la dispersion de ce courant sur l'ensemble de la matrice de pixels est observée. Certains pixels sont tellement dégradés qu'ils sont complètement saturés par les charges parasites. Ces pixels particuliers sont appelés pixels chauds et sont pénalisants pour le bon déroulement d'une mission spatiale.

Dans le but d'anticiper cette dégradation, la communauté scientifique a développé au cours des dernières décennies des méthodes pour estimer l'augmentation du courant d'obscurité après irradiation dans un imageur. L'une de ces méthodes, *DAAN*, repose sur la méthode de Monte Carlo. A partir des données géométriques du pixel, la distribution de déplacements atomiques est déterminée sur l'ensemble de la matrice de pixels. Le facteur de dommage universel est ensuite utilisé pour convertir le nombre de déplacements atomiques en courant d'obscurité. Les effets d'amplification du champ électrique sur l'augmentation du courant d'obscurité sont également pris en compte dans les simulations. La comparaison entre la distribution de courant d'obscurité expérimentale et celle simulée permet de valider le modèle.

Cet outil reproduit de manière correcte la forme de la distribution du courant d'obscurité, cependant le nombre et l'intensité des pixels chauds sont surestimés. Cela est en partie dû au fait qu'en première approximation les effets d'amplification du champ électrique ont été modélisés en une dimension. Une telle modélisation est connue pour surestimer l'influence du champ électrique sur le calcul du courant d'obscurité. C'est pourquoi un modèle original d'effets de champ électrique en trois dimensions a été développé au cours des travaux de thèse. Nous avons vu au cours du chapitre IV que ce modèle 3D est une extension du modèle 1D proposé par *Vincent et al.*. Dans ce modèle, nous considérons que l'effet Poole-Frenkel et son couplage avec le mécanisme d'effet Tunnel Assisté par Phonons dépendent de l'angle d'émission du porteur de charge depuis le piège. Ce modèle 3D permet de réduire l'amplitude du facteur d'amplification lié aux effets du champ électrique. En conséquence, pour une même gamme de champ électrique, les valeurs possibles du facteur d'amplification sont moindres pour le modèle 3D. Autrement dit, ce nouveau modèle réduit la dispersion des valeurs du facteur d'amplification lié à l'influence d'un champ électrique. Dans la littérature, le facteur d'amplification est généralement déterminé pour un niveau de piège unique avec des sections efficaces de capture d'électron et de trous fixées. Or cette situation n'est pas représentative de la variété de pièges qui existent et de l'incertitude qui règne sur la valeur exacte des paramètres de pièges. C'est pourquoi cette thèse s'est en partie attelée à étudier la variation du facteur d'amplification lié aux effets du champ électrique en fonction des paramètres de pièges, à savoir le niveau d'énergie du piège et ses sections

efficaces de capture d'électrons et de trous. Les différentes études paramétriques ont montré que le passage du modèle 1D au 3D réduit légèrement la sensibilité du facteur d'amplification à la variation des paramètres de pièges. Cependant, si ces paramètres varient sur plusieurs ordres de grandeur, le facteur d'amplification peut varier d'un facteur 2 à 10 pour des champs électriques raisonnables. Cette dépendance du facteur d'amplification aux paramètres de piège est une donnée importante à prendre en considération dans l'interprétation des effets du champ électrique sur l'augmentation du courant d'obscurité. Ensuite, le modèle d'effets de champ électrique en 3D a été incorporé à l'outil de calcul du courant d'obscurité *DAAN*. Nous avons constaté que le passage d'un modèle 1D à 3D conduit à une réduction du nombre de pixels chauds ainsi qu'à leur intensité. Le modèle 3D induit également une diminution de l'effet dispersif du champ électrique sur la queue de distribution du courant d'obscurité. Cette diminution de l'effet dispersif provient de la baisse de sensibilité du facteur d'amplification. Enfin, les travaux disponibles dans la littérature ne considèrent que le cas d'une population homogène de défauts, c'est-à-dire une population composé d'un défaut de nature unique avec des paramètres de pièges fixés. Puisqu'une population homogène de défauts ne reflète pas la dégradation réelle d'un composant, les recherches effectuées au cours de la thèse ont considéré l'hypothèse d'une population hétérogène de défauts. Cette étude a permis de montrer qu'une telle hypothèse a une conséquence directe sur le calcul du courant d'obscurité. En effet, une modulation de la queue de distribution est observée en fonction de la population considérée

Même s'il a été prouvé qu'une population hétérogène de défauts influe l'estimation du courant d'obscurité, la nature et le nombre de pièges qui constituent cette population sont choisis arbitrairement. De plus, la méthode de prédiction du courant d'obscurité repose sur l'utilisation du facteur de dommage universel de *Srour* [1]. Ce coefficient a été déterminé pour un grand nombre de composants différents irradiés dans des conditions différentes. Ce facteur de proportionnalité est donc un coefficient de dégradation moyenne et masque les mécanismes de réorganisation qui se mettent en place au cours du temps. Dans le but de s'affranchir de ce coefficient empirique, et de ne plus sélectionner les défauts contributeurs du courant d'obscurité de manière arbitraire, un modèle de réorganisation de la matière a été développé pour les besoins spécifiques de la thèse. Ce modèle repose sur un algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) et simule la guérison des paires de Frenkel créées après irradiation dans un volume donné. En première approximation, ces paires de Frenkel sont réparties de manière uniforme dans le volume de simulation. En faisant migrer de manière aléatoire ces défauts primaires, l'algorithme simule deux interactions possibles : la recombinaison ou l'association de défauts. Au cours du temps, des défauts disparaissent et de nouvelles espèces sont créées. A l'état final, nous obtenons ainsi une population de défauts unique, et le taux de guérison peut être évalué. Selon les hypothèses considérées, l'algorithme KMC a montré que le nombre de défauts survivants est proportionnel au nombre de défauts à l'état initial suivant le taux de guérison pour plusieurs taux d'amorphisation. Nous en déduisons de cette manière une loi simple permettant de relier le nombre de défauts à l'état initial et à l'état final.

Cependant, le taux de recombinaison initiale et le taux de guérison final semblent être surestimés par rapport aux données disponibles dans la littérature dans le cas de cascades de dommage. C'est pourquoi une amélioration de la modélisation nous a semblé nécessaire. Nous supposons que cette surestimation est liée à l'hypothèse d'une

répartition uniforme de défauts dans le volume, qui augmente la probabilité que des défauts interagissent ensemble. C'est pour cette raison que dans un dernier temps, nous avons modélisé des cascades de dommages via notre application *GEANT4*, pour lesquelles la réorganisation des défauts est ensuite simulée. En revanche, plutôt que d'appliquer l'algorithme KMC sur une cascade de dommage engendrée par un proton, nous avons opté pour une stratégie moins coûteuse en temps de calcul. Nous simulons des cascades de dommage créées par les atomes de recul primaires (PKA) qui ont été impactés par les protons. Le choix de l'énergie de ces PKA est appuyé par des études menées dans la littérature mais également par des simulations *GEANT4* réalisées pour les besoins de la thèse. Nous avons donc considéré que des PKA de $1\,keV$ à $10\,keV$ étaient suffisamment représentatifs des cascades de dommages induites par les protons situés dans la gamme d'énergie étudiée pendant la thèse. Afin d'extraire un taux de guérison et une population de défauts qui sont représentatifs des simulations KMC, une étude statistique a été menée. Elle consiste à répéter plusieurs fois des simulations KMC dans des conditions similaires et à calculer la moyenne et l'écart-type de chaque donnée. Grâce à cela, nous avons pu extraire un taux de guérison moyen et une population type de défauts pour des PKA de $1\,keV$ et $10\,keV$. Ces informations sont ensuite utilisées pour calculer l'augmentation du courant d'obscurité associée à cette population de défauts. Afin de s'affranchir du facteur de dommage universel, un nouveau coefficient de conversion permettant de convertir les déplacements atomiques en courant électrique est calculé. Ce coefficient correspond au taux de génération de paires électron-trou moyen correspondant à la population type de pièges fournie par les simulations KMC. Un nouveau facteur de conversion est tiré aléatoirement à chaque interaction nucléaire qui se produit dans le pixel. Le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions développé au cours de la thèse est également utilisé pour tenir compte de l'influence du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou moyen. De plus, un taux de guérison est tiré aléatoirement à chaque interaction nucléaire dans une loi gaussienne, de moyenne et d'écart-type définis grâce à l'étude statistique réalisée sur le résultat des simulations KMC. L'exploitation de ces données montre que cette nouvelle méthode de calcul du courant d'obscurité fournit des résultats proches des distributions expérimentales. D'un point de vue plus global, la chaîne de simulation développée au cours de la thèse, composée de l'application *GEANT4*, de l'algorithme Kinetic Monte Carlo et de l'outil *DAAN* avec le modèle d'effets de champ électrique 3D a permis de réduire légèrement le nombre et l'intensité des pixels chauds par rapport à la méthode utilisant le facteur de dommage universel. Un modèle de dose ionisante cumulée (TID) est également proposé dans ce chapitre. Ce modèle calcule la contribution de la TID dans chaque pixel, et améliore la forme de la DCNU pour les faibles courants d'obscurité. L'ensemble de ces méthodes de calcul ont permis d'apporter des éléments de compréhension sur les mécanismes régissant la forme de la distribution du courant d'obscurité. Par le biais de cette séquence de simulations, une alternative au facteur de dommage universel est proposée.

Malgré les efforts de recherche fournis au cours de la thèse, la distribution de courant d'obscurité simulée ne correspond pas encore pleinement aux mesures expérimentales. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer cet écart. Tout d'abord, la distribution de champ électrique utilisée pour tirer aléatoirement un champ électrique à chaque interaction est en une dimension. En effet, nous ne possédons que l'intensité du champ électrique en fonction de la profondeur dans le pixel (axe Z). En réalité, un pixel ne présente pas une symétrie cylindrique, et donc le champ électrique n'est pas égal en tout

point X et Y à un point Z donné. En conséquence, les effets du champ électrique peuvent être sous-estimés ou surestimés dans certaines régions du pixel. De plus, notre modèle de champ électrique considère que la barrière de potentiel que doit franchir ou traverser le porteur de charge est de forme hyperbolique. Cependant, cette forme est choisie pour simplifier les calculs, et la barrière de potentiel peut en réalité être différente. *Martin et al.* [2] ont notamment étudié différentes formes de barrières de potentiel, et ont montré par exemple qu'un potentiel de Yukawa affectait l'amplitude du facteur d'amplification lié au champ électrique. Enfin dans certaines régions d'un pixel, le gradient de champ électrique est tellement important qu'il n'est pas impossible que cela influe sur le taux de génération de paires électron-trou, en accélérant les porteurs de charge par exemple. Aussi, les simulations TCAD réalisées au cours du chapitre IV ont montré qu'à l'interface entre la zone en déplétion et les zones neutres, une certaine densité de porteurs minoritaires peut exister. Si cette densité est suffisamment élevée, elle peut réduire le taux de génération de paires électron-trou des défauts cristallins situés près de cette frontière. Il faut donc garder à l'esprit que notre outil de prédiction considère que tous les défauts sont créés dans une un volume parfaitement déplété, alors que cela n'est pas exactement le cas aux limites de la zone de charge d'espace. D'un point de vue plus technologique, il serait intéressant de connaître les procédés de fabrication des imageurs utilisés. Ces informations peuvent être intéressantes pour connaître par exemple le taux d'impuretés moyen auquel on peut s'attendre dans un pixel, ainsi que la nature des contaminants. La nature du dopage (dopage N ou P) et les espèces dopantes peuvent également entrer en ligne de compte, puisque nous savons que la création de certains défauts sera favorisée en fonction de la nature du dopage et des dopants utilisés. Il serait possible ainsi d'affiner la simulation du courant d'obscurité.

En ce qui concerne le programme basé sur l'algorithme Kinetic Monte Carlo, il est possible d'optimiser sa vitesse d'exécution. En outre, la méthode d'optimisation appelée « binning » traite tous les objets avec des fréquences de sauts identiques de manière groupée. Cette méthode réduirait le temps d'exécution de chaque simulation, mais cette optimisation n'a pu être mise en place au cours de la thèse, faute de temps. Aussi dans l'algorithme KMC, plutôt que de choisir le défaut le plus proche comme étant le meilleur candidat pour une interaction, il serait intéressant d'utiliser les énergies potentielles que doit franchir l'un de deux défauts pour interagir avec lui. Avec ces données, il serait possible de déterminer quelle est l'interaction la plus probable en fonction de sa fréquence. Cette information est accessible notamment grâce à des simulations de Dynamique Moléculaire, qui permettent de connaître la hauteur des barrières de potentiel ou la profondeur des puits de potentiel en tout point du volume de simulation. De plus, une étude statistique réalisée avec un échantillon plus grand et avec des énergies de PKA plus élevée permettrait d'affiner l'estimation du taux de guérison et des espèces rencontrées à la fin du processus de réorganisation. Le temps de calcul de l'algorithme KMC étant également un point faible, trouver un critère définissant la taille optimale du volume de simulation permettrait de réduire considérablement le temps de calcul tout en restant représentatif des interactions qui peuvent se dérouler dans ce volume.

Dans la méthode de calcul du courant d'obscurité présentée dans le chapitre VI, nous utilisons les proportions moyennes de défauts indiquées les études statistiques effectuées sur les résultats de notre outil KMC pour paramétrer les proportions de défauts à mettre en entrée de *DAAN*. Cependant, nous n'utilisons pas l'écart-type sur ces proportions de défauts, information qui représente le fait que chaque interaction nucléaire

ne va pas engendrer exactement la même population de défauts. Une méthode de calcul tenant compte de cette variation permettrait d'être plus représentatif des divers processus de réorganisation qui interviennent après irradiation. Pour obtenir une simulation très poussée du courant d'obscurité, il serait très intéressant de modéliser la cascade de dommage dans le pixel et sa guérison directement dans l'outil de simulation du courant d'obscurité. Cela permettrait de connaître précisément le champ électrique a appliqué sur chaque défaut, plutôt que de considérer que tous les défauts créés lors d'une interaction nucléaire subissent le même champ électrique, qui est une de nos hypothèses de calcul. Par extension, une telle méthode de calcul permettrait d'estimer à chaque interaction la population exacte de défauts et leur nombre au bout d'un temps de guérison donné, plutôt que de considérer une population type avec un taux de guérison variant selon une loi normale. De cette manière, cela nous autoriserait également à considérer l'hypothèse qu'un proton va engendrer un spectre en énergie de PKA, plutôt que de discrétiser l'énergie du PKA selon une valeur seuil d'énergie de proton ($10\ MeV$ dans notre cas).

Il semble également nécessaire d'améliorer nos connaissances sur les caractéristiques électriques des défauts cristallins, notamment leur niveau d'énergie dans la bande interdite mais surtout leurs sections efficaces de capture d'électrons et de trous. En effet, soit les valeurs des sections efficaces s'étendent sur plusieurs ordres de grandeurs, ou à l'inverse certains défauts manquent cruellement de données. C'est surtout le cas des petits clusters de défauts comme les tri-interstitiels, les tri-lacunes et les complexes à base d'impuretés. Ce manque de précision conduit à une incertitude sur le calcul du taux de génération de paires électron-trou, élément essentiel pour évaluer la contribution d'un piège à l'augmentation du courant d'obscurité. Nous avons montré notamment dans les chapitres IV et VI que ces paramètres de pièges influent directement sur le résultat de nos modélisations. Tout comme le souligne *Jay et al.* dans leurs travaux [3], prendre en compte les impuretés dans les simulations KMC permettrait d'affiner les simulations du courant d'obscurité, car certains défauts liés aux impuretés présentent un fort taux de génération. Si plusieurs de ces défauts sont présents à l'échelle d'un pixel, ils peuvent fortement augmenter le niveau de courant d'obscurité. Cependant, modéliser ces impuretés dans une simulation KMC n'est pas évident, car la concentration d'impuretés est souvent très faible par rapport à la densité atomique du matériau (1000 ou 10000 fois plus petite). Par conséquent une méthode statistique doit être appliquée pour modéliser l'influence des impuretés de manière rigoureuse.

Nous avons montré que dans le cas d'une répartition uniforme de défauts, le nombre de défauts survivants suit une loi simple de proportionnalité entre le taux de guérison et le nombre de défauts à l'état initial. Il pourrait être utile d'étendre cette étude au cas des cascades de dommage. Cependant, les paires lacune-interstitiel n'étant pas réparties uniformément dans le volume dans le cas d'une cascade de dommage, établir une loi simple est plus complexe et nécessite d'établir un critère supplémentaire. Ce critère pourrait consister par exemple en une densité moyenne de défauts évaluée pour une énergie de PKA donnée. Pour déterminer cette densité de défauts, il faudrait par exemple discrétiser le volume de simulation contenant la cascade et calculer le nombre de paires de Frenkel par unité de volume. Cette loi simple entre énergie du PKA, densité de défauts et taux de guérison permettrait d'estimer combien de défauts en moyenne survivent à un processus de guérison, sans effectuer des simulations KMC.

Finalement, il ne faut pas oublier qu'à la base l'outil de prédiction *DAAN* se concentre exclusivement sur la dose de dommage de déplacement (DDD). Cependant, nous comparons nos simulations avec des composants réellement irradiés aux protons. Or nous savons que les protons induisent également une dose ionisante cumulée (TID) dans les composants. Certes, un modèle de TID est proposé dans ce manuscrit, mais une modélisation plus poussée de la contribution de la TID dans un pixel permettrait d'affiner la DCNU pour les plus faibles valeurs de courant d'obscurité, notamment au niveau du pic de la distribution.

Bibliographie

[1] J. R. Srour et D. H. Lo, « Universal damage factor for radiation-induced dark current in silicon devices », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 47, n° 6, p. 2451–2459, 2000.

[2] P. A. Martin, B. G. Streetman, et K. Hess, « Electric field enhanced emission from non-Coulombic traps in semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 52, n° 12, p. 7409- 7415, déc. 1981, doi: 10.1063/1.328731.

[3] A. Jay *et al.*, « Simulation of Single-Particle Displacement Damage in Silicon; Part III: First Principle Characterization of Defect Properties », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 65, n° 2, p. 724- 731, févr. 2018, doi: 10.1109/TNS.2018.2790843.

Annexe A : Calcul de l'incertitude sur la distribution du courant d'obscurité

Dans la communauté scientifique, les chercheurs comparent fréquemment la distribution expérimentale de courant d'obscurité avec celle simulée. Cela permet d'affirmer ou d'infirmer leurs hypothèses de calcul. Cependant, l'incertitude sur la distribution expérimentale n'est jamais indiquée. Pourtant il est courant dans le domaine de la physique de fournir une incertitude sur les mesures. Cette incertitude indiquerait si les résultats de simulation sont dans la gamme d'incertitude des mesures ou non. Cela permet également d'évaluer la fiabilité avec laquelle la comparaison entre simulation et données expérimentales peut être effectuée.

Pour répondre à cette problématique, un formalisme pour calculer l'incertitude sur la distribution de courant d'obscurité est proposé dans ce manuscrit de thèse. Ce calcul se déroule en deux parties. Tout d'abord, il faut déterminer l'incertitude sur la mesure du courant d'obscurité mesuré dans un pixel. Dans un deuxième temps, cette incertitude sur cette mesure servira à calculer l'erreur standard pour chaque canal de l'histogramme. Chaque partie du calcul sera détaillée dans les paragraphes suivant.

Détermination de l'incertitude sur la mesure du courant d'obscurité

Pour commencer, il faut rappeler comment est déterminé le courant d'obscurité dans un pixel. Tout d'abord, le capteur est placé dans le noir total pour ne mesurer que la contribution du courant d'obscurité. Dans notre cas, le signal est mesuré 100 fois pour différents temps d'intégration compris entre 1 ms et 1000 ms. Ce signal « brut » est mesuré en LSB (Least Square Bit) et correspond donc à une amplitude, proportionnelle au nombre de charges électriques collectées. Si l'on trace ce signal en fonction du temps d'intégration, on obtient généralement une fonction affine, où l'intensité du signal est proportionnelle au temps d'intégration. Il peut arriver qu'un pixel soit saturé (quantité de charges mesurée dépassant la capacité maximale du pixel) pour un temps d'intégration donné. Dans ce cas, ce point de mesure n'est pas comptabilisé.

La grandeur mesurable qui nous intéresse est la quantité de charges collectées en fonction du temps, c'est-à-dire un courant électrique. Pour accéder à cette information, une régression linéaire est effectuée. Le fait de réaliser une régression linéaire par la méthode des moindres carrés permet d'accéder au coefficient directeur de la droite affine. Ce coefficient directeur correspond au courant électrique, et l'ordonnée à l'origine correspond quant à lui à l'offset. Pour être plus précis, la méthode des moindres carrés utilisée est la méthode dite « ordinaire » (méthode des moindres carrés ordinaires, abrégé MCO).

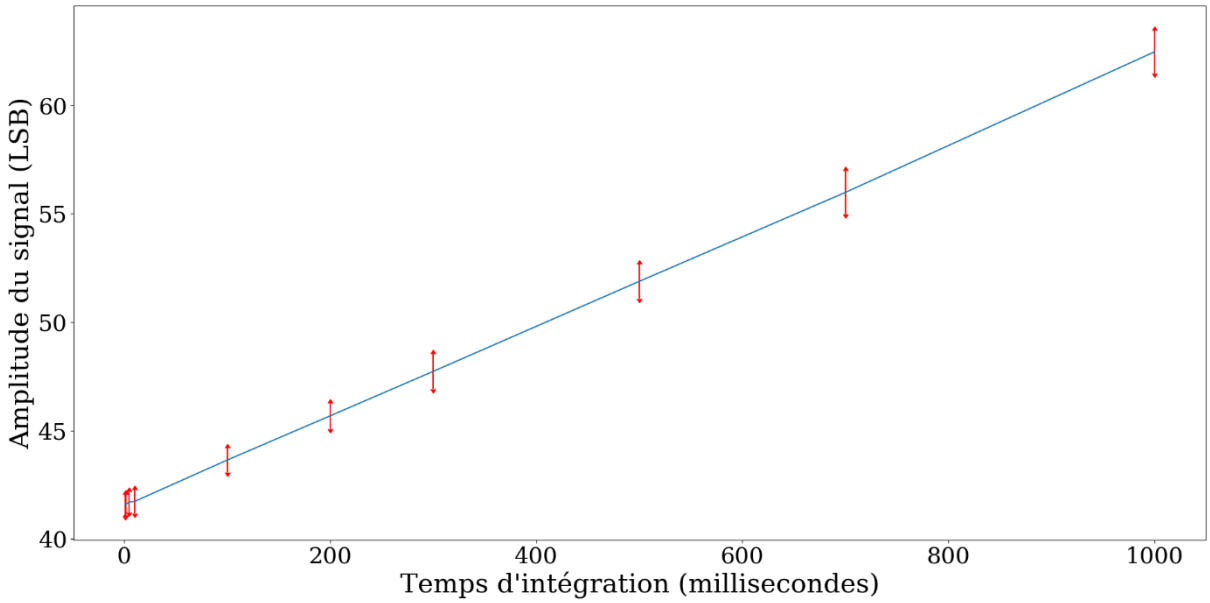


Figure A.1 : Signal moyen enregistré par un pixel en fonction du temps d'intégration après irradiation. L'écart-type est indiqué avec les barres d'erreur rouge. On observe une réponse linéaire du signal avec le temps d'intégration.

En mesurant le signal d'un même pixel un grand nombre de fois, nous pouvons en déduire le signal moyen mesuré et son écart-type. Pour chaque temps d'intégration, un signal moyen est donc calculé avec son écart-type associé. Lorsque la MCO est appliquée, seul le signal mesuré moyen est utilisé. L'écart-type de la mesure, assimilable à une incertitude, n'est donc pas pris en compte dans le calcul. Il existe une méthode des moindres carrés alternative plus complexe permettant d'arranger cela : la méthode des moindres carrés pondérés (abrégé MCP). La MCP tient compte de l'incertitude en chaque point de mesure pour estimer les meilleurs paramètres de la droite passe par tous ces points. La MCP permet également d'estimer l'erreur commise sur l'estimation des paramètres de la droite.

Nous avons donc N données expérimentales (c'est-à-dire N temps d'intégration), notées x_i et y_i, où x_i correspond au temps d'intégration et y_i à l'amplitude du signal mesuré. Les valeurs de x_i sont certaines alors que y_i est une variable aléatoire dont on connait l'écart-type σ_i [1]. Nous supposons donc que l'erreur sur la variable aléatoire y_i est répartie selon une loi normale de moyenne y_i et d'écart-type σ_i [2]. Nous nous plaçons également sous l'hypothèse d'hétéroscédasticité : cela signifie que l'erreur sur chaque mesure est indépendante et donc les erreurs ne sont pas corrélées entre elles.

De manière générale, la méthode des moindres carrés consiste à rechercher les paramètres a_n qui minimisent la fonction d'erreur $e(a_n)$. Dans notre cas, nous étudions une fonction affine, donc la fonction d'erreur doit être minimisée selon deux paramètres : le coefficient directeur de la droite a_1 et l'ordonnée à l'origine a_0. On cherche une fonction $f(x_i|a_0, a_1)$ comportant ces deux paramètres qui représente au mieux ces données expérimentales. La fonction d'erreur s'écrit selon la formulation suivante :

$$e(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - f(x_i|a_0, a_1)}{\sigma_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - a_0 f_0(x_i) - a_1 f_1(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

Dans le cas d'un problème linéaire, le minimum de la fonction d'erreur est obtenu sans équivoque par la condition d'annulation de ses dérivées partielles :

$$\frac{\partial e(a_0, a_1)}{\partial a_0} = 0 \; ; \; \frac{\partial e(a_0, a_1)}{\partial a_1} = 0$$

Après développement des dérivées partielles, on peut écrire le système linéaire que doivent minimiser les paramètres a_0 et a_1 :

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} \frac{f_0(x_i) f_0(x_i)}{\sigma_i^2} + a_1 \sum_{i=1}^{N} \frac{f_0(x_i) f_1(x_i)}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i f_0(x_i)}{\sigma_i^2}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} \frac{f_0(x_i) f_1(x_i)}{\sigma_i^2} + a_1 \sum_{i=1}^{N} \frac{f_1(x_i) f_1(x_i)}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i f_1(x_i)}{\sigma_i^2}$$

Avec $f_n(x_i)$ la décomposition linéaire de la fonction f selon le paramètre d'indice n. Afin de simplifier l'écriture, nous réécrivons ce système d'équations sous forme matricielle. Pour cela, nous introduisons les matrices A et b :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{f_0(x_0)}{\sigma_0} & \frac{f_1(x_0)}{\sigma_0} \\ \frac{f_0(x_1)}{\sigma_1} & \frac{f_1(x_1)}{\sigma_1} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{f_0(x_N)}{\sigma_N} & \frac{f_1(x_N)}{\sigma_N} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i f_0(x_i)}{\sigma_i^2} \\ \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i f_1(x_i)}{\sigma_i^2} \end{pmatrix}$$

La matrice A comporte N lignes (autant de lignes que de points de mesure) et possède autant de colonnes que de paramètres dans la fonction. Puisque nous étudions une fonction affine, la matrice A n'a que deux colonnes, mais pour une fonction quelconque avec n paramètres, cette matrice peut être généralisée à n colonnes. La matrice b est quant à lui un vecteur colonne de taille n paramètres. Pour une fonction affine, nous pouvons détailler les expressions de f_0 et f_1 :

$$f_0(x_i) = 1 \quad \text{et} \quad f_1(x_i) = x_i$$

En réintroduisant, $f_0(x_i)$ et $f_1(x_i)$ dans la décomposition linéaire de $f(x_i)$, on vérifie que l'on retrouve bien une fonction affine :

$$a_0 f_0(x_i) + a_1 f_1(x_i) = a_0 + a_1 x_i = f(x_i)$$

Avec a_0 l'ordonnée à l'origine et a_1 le coefficient directeur de la droite, qui pour rappel correspond au courant d'obscurité mesuré.

Nous pouvons maintenant réécrire le système à résoudre sous forme matricielle :

$$(A^T . A) \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = b$$

On notera également la matrice inverse C :

$$C = (A^T . A)^{-1}$$

La matrice C est importante dans notre cas puisqu'elle nous permet de déterminer les variances et covariances des paramètres a_0 et a_1. Pour être plus précis, les éléments diagonaux de la matrice C correspondent à la variance de ces paramètres. Cette variance est donc dépendante de la variance des variables aléatoires y_i :

$$\sigma^2(a_n) = C_{nn}$$

L'écart-type est calculé en prenant la racine carrée de cette variance. Cet écart-type nous renseigne donc sur la fiabilité des mesures : plus il est grand, plus l'incertitude sur la mesure est grande.

Une fois le système résolu par la MCP, nous connaissons le courant d'obscurité et son incertitude associée. Nous pouvons utiliser ces données pour passer à l'étape suivante : le calcul de l'erreur dans chaque canal de l'histogramme.

Calcul de l'incertitude sur un histogramme

Le but de ce calcul est d'estimer l'erreur que l'on commet sur l'échantillonnage de données présentant une incertitude. En effet, en fonction de sa valeur et de son incertitude, un évènement a une certaine probabilité d'être compté dans plusieurs canaux simultanément. Dans notre cas, l'incertitude est assez faible pour qu'évènement ne puisse être compté que sur deux canaux différents au maximum. Pour estimer cette erreur potentielle d'échantillonnage, nous allons calculer l'erreur standard. Il ne faut pas confondre l'erreur standard avec un intervalle de confiance. En statistiques, un intervalle de confiance définit l'incertitude avec laquelle l'estimation d'une variable aléatoire se trouve ou non dans cet intervalle. Par exemple, l'ensemble de la population étudiée peut être répartie selon une loi normale de moyenne et d'écart-type estimés, et l'intervalle de confiance défini avec quelle confiance on peut considérer que la variable aléatoire fait partie de l'intervalle étudié [3].

En revanche dans notre contexte, chaque observation (autrement dit chaque pixel) présente un courant d'obscurité moyen, avec une incertitude déterminée au cours du paragraphe précédent. Pour rappel, nous considérons que le courant d'obscurité mesuré est distribué selon une loi normale ayant pour moyenne le signal moyen mesuré et pour écart-type l'incertitude donnée par la MCP. Nous pouvons représenter la situation selon un schéma de Bernouilli, à l'image d'une expérience où l'on jette à pile ou face une pièce de monnaie : soit le pixel fait partie d'un canal, soit il n'en fait pas partie. Pour chaque canal, on peut calculer la probabilité qu'une observation donnée aurait pu être comptabilisée ou non dans un canal de l'histogramme. On note X_i la moyenne du signal mesuré de l'évènement d'indice i et $\sigma_{X,i}$ son écart-type associé. Le nombre d'observations dans un canal spécifique d'indice j est la somme d'une collection de variables aléatoires de Bernouilli notées $p_i(j)$. Pour un canal donné, $p_i(j)$ correspond à la section de l'aire située sous la distribution normale $N(X_i, \sigma_{X,i}^2)$ dans les limites du canal d'indice j.

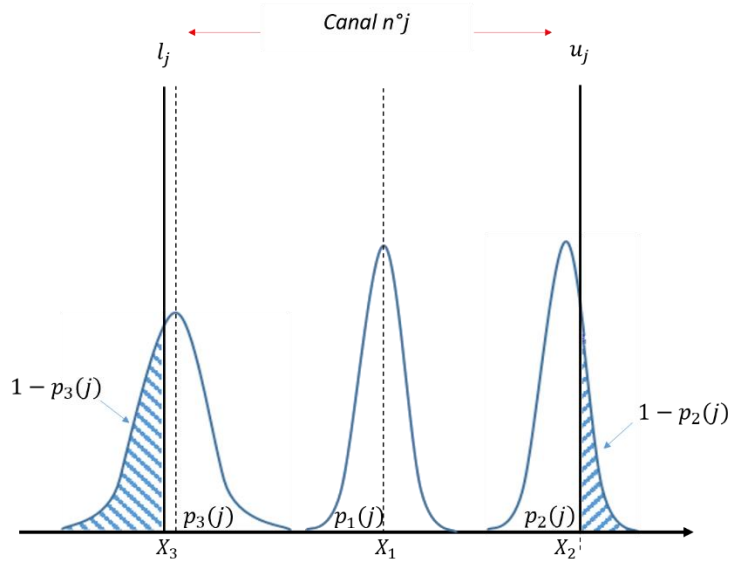


Figure A.2 : Représentation schématique d'un canal j d'un histogramme. Dans ce canal, 3 évènements sont comptabilisés car leur moyenne X est comprise entre la borne inférieure (l_j) et la borne supérieure (u_j). La probabilité que l'évènement se trouve dans ce canal est l'intégrale sous la courbe de la gaussienne comprise dans ce canal ($p_i(j)$). Le reste de l'intégrale de la gaussienne est la probabilité que cet évènement ne soit pas dans ce canal ($1 - p_i(j)$). On a trois cas possibles : soit un évènement et son incertitude sont entièrement compris dans le canal (X_1), soit une partie de la distribution déborde vers le canal suivant (X_2), soit dans le canal précédent (X_3).

La variance σ_s^2 du nombre d'évènements contenu dans un canal de l'histogramme est définie comme suit :

$$\sigma_s^2(j) = \sum_{i=1}^{k} p_i(j)(1 - p_i(j))$$

Où

$$p_i(j) = \int_{l_j}^{u_j} \frac{1}{\sigma_{X,i}\sqrt{2\pi}} exp\left(-\frac{(X_i - z)^2}{2\sigma_{X,i}^2}\right) dz$$

Avec u_j et l_j respectivement les limites supérieure et inférieure du canal d'indice j et k le nombre d'évènements comptabilisés dans ce canal. La variable dz correspond au pas d'intégration de l'aire située sous la gaussienne. D'après la Figure A.2, le terme $p_i(j)$ correspond à l'aire sous la gaussienne comprise dans les limites du canal, c'est-à-dire la probabilité que cet évènement se trouve dans le canal. Le terme $1 - p_i(j)$ est l'évènement opposé : c'est la probabilité que l'évènement i ne soit pas dans ce canal.

Enfin, l'erreur standard est obtenue en prenant la racine carrée de la valeur absolue de la variance σ_s :

$$\varepsilon_s(j) = \sqrt{|\sigma_s^2(j)|}$$

Dans notre cas, puisque la distribution du courant d'obscurité est normalisée selon le pas d'échantillonnage de l'histogramme et du nombre total d'évènements (nombre de pixels), l'erreur standard normalisée s'écrit :

$$\varepsilon_{s,norm.}(j) = \frac{\varepsilon_s(j)}{pas * N_{pixels}}$$

Où le *pas* correspond à la largeur du canal de l'histogramme et N_{pixels} le nombre total de pixels échantillonnés dans l'histogramme.

Ce formalisme permet de calculer l'incertitude du nombre d'évènements d'un canal d'indice j si chaque élément d'une population est distribué selon une loi normale de moyenne et d'écart-type connus. Au cours des travaux de thèse, nous nous sommes intéressés à la distribution de l'augmentation du courant d'obscurité sur une matrice de pixels après irradiation. Cette augmentation du courant d'obscurité est simplement obtenue en calculant la différence entre le courant après irradiation et avant irradiation. Nous sommes par conséquent dans le cas où il existe une incertitude sur le courant d'obscurité avant irradiation et une incertitude après irradiation. L'incertitude totale, c'est-à-dire l'incertitude sur l'augmentation du courant d'obscurité, est une combinaison de l'erreur sur la mesure du courant avant et après irradiation. Puisque nous travaillons sous l'hypothèse que le courant d'obscurité est distribué selon une loi normale, nous pouvons appliquer la propriété d'additivité de deux lois normales indépendantes [4]. Soit $X_1 \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$ et $X_2 \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ deux variables gaussiennes indépendantes alors :

$$X_1 + X_2 \sim N(\mu_1 + \mu_2\,, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

Cette expression n'est pas sans rappeler le fait que physiquement, le bruit total d'un système est la somme quadratique de tous les bruits du système (voir chapitre I). Une expression similaire existe dans le cas de la soustraction de deux variables gaussiennes :

$$X_1 - X_2 \sim N(\mu_1 - \mu_2\,, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

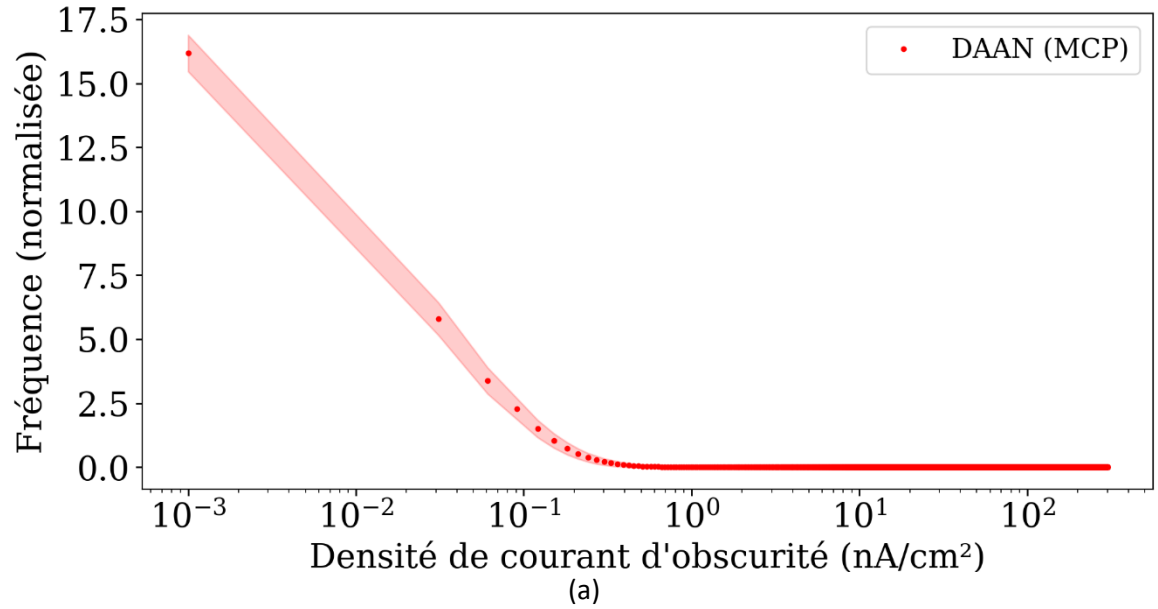
De manière similaire, le fait de soustraire des bruits n'ajoute que du bruit (cf chapitre I et II). Lorsque l'on applique cette propriété à notre problème l'augmentation du courant d'obscurité et son incertitude sont calculées comme suit :

$$\langle \Delta I \rangle_i = \langle I \rangle_{i,post\ irr.} - \langle I \rangle_{i,pre\ irr.} \qquad \text{et} \qquad \sigma_{i,\Delta I} = \sqrt{\sigma_{i,pre\ irr.}^2 + \sigma_{i,post\ irr.}^2}$$

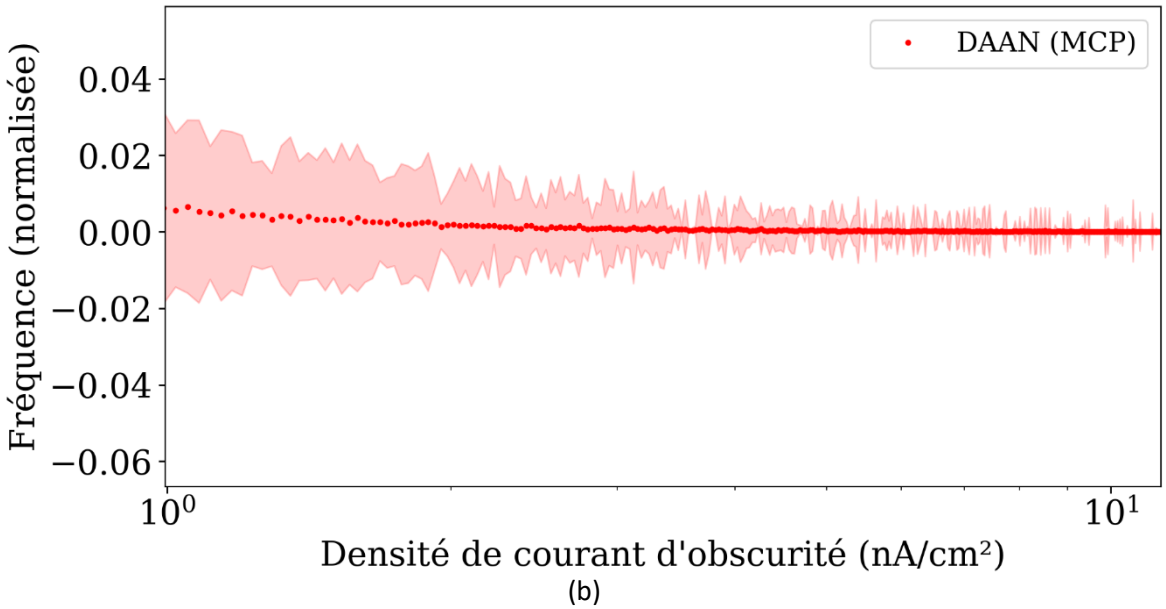
En réinjectant ces notations dans l'expression de l'erreur standard normalisée, nous obtenons le formalisme complet pour calculer l'incertitude pour un canal de l'histogramme :

$$\varepsilon_{s,norm.}(j) = \frac{\sqrt{\left|\sum_{i=1}^{k}\left\{\int_{l_j}^{u_j}\frac{1}{\sigma_{i,\Delta I}\sqrt{2\pi}}exp\left(-\frac{(\langle \Delta I \rangle_i - z)^2}{2\sigma_{i,\Delta I}^2}\right)\,dz \times \left(1 - \int_{l_j}^{u_j}\frac{1}{\sigma_{i,\Delta I}\sqrt{2\pi}}exp\left(-\frac{(\langle \Delta I \rangle_i - z)^2}{2\sigma_{i,\Delta I}^2}\right)\,dz\right)\right\}\right|}}{pas * N_{pixels}}$$

Cette incertitude est donc calculée pour chaque point de la DCNU expérimentale. Nous avons fait le choix de représenter cette incertitude sous la forme d'une surface qui enveloppe la distribution de courant d'obscurité. Du fait que pour les canaux faiblement remplis, l'incertitude peut mener à une ordonnée négative, nous représentons la DCNU en échelle semi-logarithmique selon l'axe X.



(a)



(b)

Figure A.3 : (a) Distribution du courant d'obscurité après irradiation, pour un composant SAPPHIRE irradié avec des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^{9}\ p+/cm^{2}$*, mesurée à une température de* $294{,}15\ K$ *1 mois après irradiation. La surface rouge représente l'incertitude calculée pour chaque point de la distribution (chaque canal) selon le formalisme développé dans cette annexe. (b) Zoom sur la même distribution du courant d'obscurité pour des valeurs comprises entre 1 et 10* nA/cm^{2}*.*

D'après la Figure A.3, cette erreur standard évolue de manière proportionnelle avec le nombre d'évènements contenus dans le pas de l'histogramme. Ceci est due au terme de somme de l'erreur standard normalisée : plus il y a d'évènements avec de l'incertitude, plus l'erreur est grande. Aussi logiquement, plus l'incertitude sur un évènement est grande, plus l'erreur estimée est grande.

Grâce à cette enveloppe, l'utilisateur peut évaluer si ses simulations sont situées dans la plage d'incertitude ou non.

Limitation de l'approche « incertitude par canal »

L'expression proposée ici pour calculer l'erreur standard présente une limite qui pourrait être résolue avec des calculs plus poussés. Cette limitation réside notamment notre approche correspondant à une « incertitude par canal ». Cela signifie que l'on évalue la probabilité qu'un évènement assigné à un canal se retrouve dans un canal voisin par rapport à sa propre incertitude. Mais dans ce cas, seule la contribution pour ce canal est déterminée. Un calcul plus réaliste consisterait à évaluer les contributions simultanées d'un même évènement dans les canaux situés dans sa plage d'incertitude. Ce calcul serait donc différent d'une approche « incertitude par canal », et correspondrait à une approche qui tient compte des canaux voisins. Ainsi, un même canal recevrait la contribution des canaux voisins et inversement. Ce niveau de précision peut être atteint en considérant des probabilités jointes entre les canaux avec des distributions normales multivariées [5], [6]. Cependant, nous considérons en première approximation que le niveau de précision développé dans cette annexe est suffisant pour les travaux de thèse.

Bibliographie de l'annexe

[1] F. Legrand, « Informatique Appliquée aux Sciences Physiques », févr. 26, 2018. https://www.f-legrand.fr/scidoc/docimg/index.html (consulté le août 18, 2020).

[2] J. Debord, « Méthode des moindres carrés généralisés ». avr. 30, 2003, Consulté le: sept. 20, 2019. [En ligne]. Disponible sur: https://www.unilim.fr/pages_perso/jean.debord/math/reglin/gls.pdf.

[3] P. Vermeesch, « Statistical uncertainty associated with histograms in the Earth sciences: HISTOGRAMS IN THE EARTH SCIENCES », *J. Geophys. Res. Solid Earth*, vol. 110, n° B2, févr. 2005, doi: 10.1029/2004JB003479.

[4] U. de la S. Laboratoire de Probabilités, Statistique et Modélisation (LPSM), « Chapitre 8 : Variables gaussiennes et Théorème de la limite centrale ». Consulté le: sept. 05, 2019. [En ligne]. Disponible sur: http://www.proba.jussieu.fr/users/lma/enseignement/DEUG/Introproba/intp8.PDF.

[5] D. C. Montgomery et G. C. Runger, *Applied statistics and probability for engineers*, 3rd ed. New York: Wiley, 2003.

[6] K. I. Park, *Fundamentals of probability and stochastic processes with applications to communications: including a concise review of mathematical pre-requisites of complex variables, matrix and set operations*. New York, NY: Springer Science+Business Media, 2017.

Annexe B : Démonstration du calcul du pas de temps Δt dans l'algorithme Kinetic Monte Carlo

Cette annexe est consacrée à la démonstration détaillée de l'étape 8°) de l'algorithme Kinetic Monte Carlo présenté dans le chapitre V de ce manuscrit. Cette étape consiste à calculer le temps qui s'est écoulé durant la migration d'un défaut. Cette étape est caractéristique d'un algorithme Kinetic Monte Carlo (KMC). Cette démonstration est inspirée du cours d'Olivier Pierre-Louis de l'Institut Lumière Matière (ILM) de Lyon [1]. Mes remerciements vont également à Christophe Inguimbert pour son aide pour établir cette démonstration.

Tout d'abord, définissons le temps écoulé τ entre l'instant initial à $t = 0$ lorsque le système est à l'état initial n et arrive l'état final. Logiquement à l'état initial, le temps écoulé vaut $\tau = 0$. Notons $Q(\tau)$ la probabilité qu'aucun évènement (c'est-à-dire aucune transition, aucun saut) ne se produise durant le temps τ, avec $Q(0) = 1$. La probabilité qu'aucun évènement ne se produise un court instant après $\tau + d\tau$ s'écrit :

$$Q(\tau + d\tau) = Q(\tau)(1 - R(n)d\tau)$$

Avec pour rappel $R_i = \sum_{i=1}^{N} W_i$ la fonction cumulative sur les fréquences de saut de tous les défauts du système et $R = R_N$. Le terme $R(n)$ correspond à la fonction cumulative du système lorsque celui-ci est dans l'état n. Développons maintenant cette expression :

$$Q(\tau + d\tau) = Q(\tau) - Q(\tau)R(n)d\tau$$

On retrouve la dérivée de $Q(\tau)$ en fonction du temps écoulé :

$$\frac{Q(\tau + d\tau) - Q(\tau)}{d\tau} = \frac{dQ(\tau)}{d\tau} = -Q(\tau)R(n)$$

Ensuite, la primitive de cette équation nous permet d'exprimer $Q(\tau)$:

$$Q(\tau) = exp(-R(n)\tau)$$

La fonction $Q(\tau)$ est assimilable à une fonction de répartition. Dans le cas des simulations KMC, nous nous intéressons à la fonction de distribution de probabilité du temps écoulé durant la transition de l'état initial à l'état final, notée $\rho(\tau)$. La probabilité qu'une transition se produise durant le temps τ est égale à $1 - Q(\tau)$. Par définition, la dérivée de la fonction de répartition nous conduit à l'expression de la fonction de distribution de probabilité [2]. Connaissant $Q(\tau)$, nous pouvons ainsi exprimer $\rho(\tau)$ [3]:

$$\rho(\tau) = R(n)exp(-R(n)\tau)$$

Enfin, nous introduisons le changement de variable suivant :

$$u = exp(-R(n)\tau)$$

Ce nouvelle variable à la même densité de probabilité que τ au signe près :

$$\rho(\tau)d\tau = -\rho(u)du$$

Finalement, nous pouvons isoler le temps écoulé τ durant la transition n :

$$\tau = -\frac{\ln(u)}{R(n)}$$

Le tirage aléatoire de u dans une loi uniforme comprise entre 0 et 1 est justifié par le fait que l'intégrale d'une fonction de distribution de probabilité est toujours comprise entre 0 et 1.

L'étape clé caractéristique d'un algorithme Kinetic Monte Carlo a été démontrée au cours de cette annexe.

Bibliographie de l'annexe

[1] O. Pierre-Louis, « Kinetic Monte Carlo Simulations », ILM - Lyon, France, oct. 06, 2017.

[2] A. F. Voter, « INTRODUCTION TO THE KINETIC MONTE CARLO METHOD », in *Radiation Effects in Solids*, Dordrecht, 2007, p. 1- 23, doi: 10.1007/978-1-4020-5295-8_1.

[3] M. Andersen, C. Panosetti, et K. Reuter, « A Practical Guide to Surface Kinetic Monte Carlo Simulations », *Front. Chem.*, vol. 7, 2019, doi: 10.3389/fchem.2019.00202.

Annexe C : Prise en compte de la dose ionisante cumulée dans l'estimation de la DCNU via *DAAN*

Au cours des travaux de thèse, nous nous sommes majoritairement intéressés à la dose de dommage de déplacements (DDD) et ses conséquences sur l'estimation du courant d'obscurité. Dans une moindre mesure, la dose ionisante cumulée (TID, cf chapitre II) a été également été étudiée. Le but de cette étude est de modéliser de manière simplifiée la contribution de la TID. Cette étude est justifiée par le fait qu'au cours des travaux de thèse, les données expérimentales auxquelles sont comparés les résultats de simulation sont issues d'irradiation aux protons. D'après le chapitre II, nous savons que les protons vont dégrader les capteurs d'image en déposant de la TID et de la DDD simultanément au cours de leurs interactions avec la matière. Cependant, notre outil de prédiction du courant d'obscurité DAAN ne tient compte que de la DDD. En conséquence, la comparaison entre les mesures expérimentales et les résultats de simulation souffre du manque de la contribution de la TID. Afin de pallier ce manque, un modèle simple d'estimation du courant d'obscurité lié à la contribution de la TID est proposé dans cette annexe.

Extraction des paramètres du modèle

Ce modèle repose sur le fit des mesures du courant d'obscurité pour des composants SAPPHIRE irradiés avec des photons gamma γ issus d'une source radioactive de Cobalt 60. Une approche similaire a été utilisée pour simuler la contribution de la TID mais selon une distribution gaussienne [1]. Certains composants ont reçu une dose de 30 Gy (3 krad) tandis que les autres ont reçu une dose de 100 Gy (10 krad). La DCNU expérimentale est tracée pour ces deux doses (voir Figure C.1).

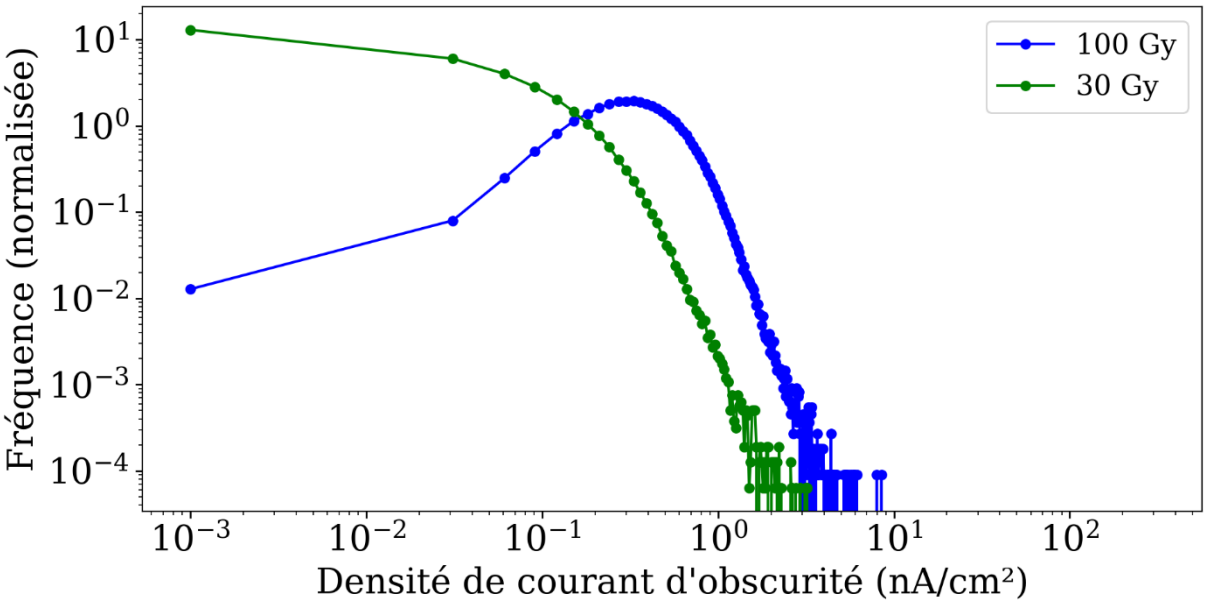


Figure C.1 : Comparaison des distributions expérimentales de courant d'obscurité pour des irradiations avec des photons gamma avec une dose de 30 Gy (courbe verte) et une dose de 100 Gy (courbe bleue).

Vu que ces DCNU présentent un profil asymétrique, nous avons décidé d'ajuster ces courbes selon une distribution de Weibull. La densité de probabilité d'une loi de Weibull s'exprime :

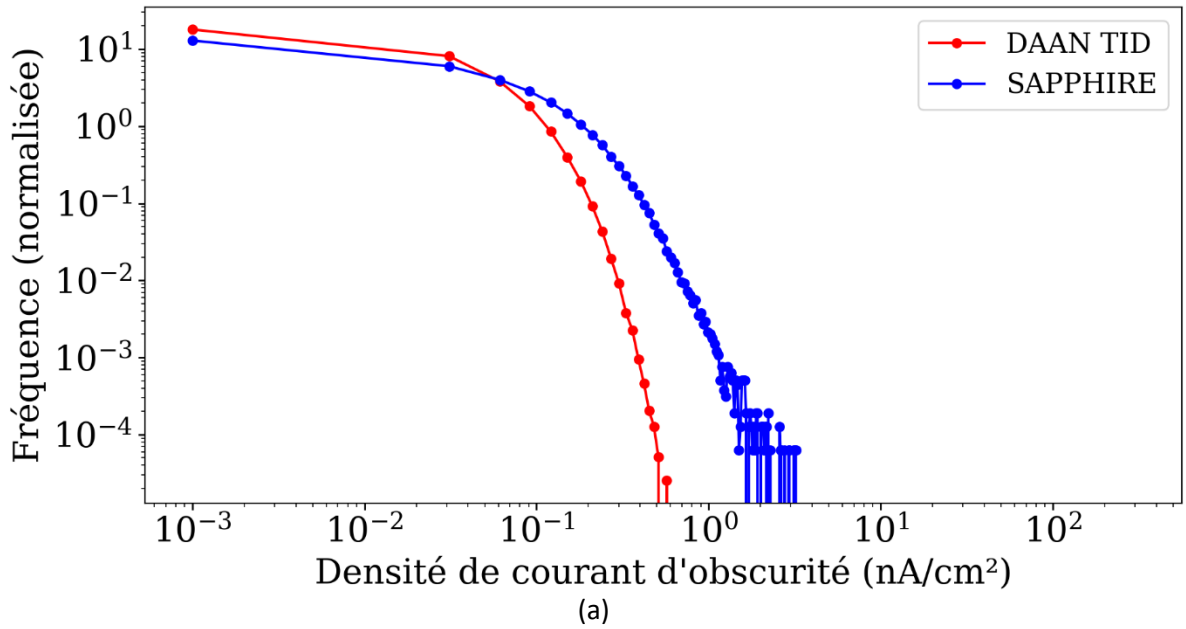
$$f(x;k;\lambda) = \frac{k}{\lambda}\left(\frac{x}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left(-\left(\frac{x}{\lambda}\right)^{k}\right)$$

Avec k le paramètre de forme et λ le paramètre d'échelle. Les composants SAPPHIRE ont été irradiés à 15°C, 21°C, 27°C et 35°C. Les paramètres k et λ ont été ajustés selon les mesures du courant d'obscurité. Les valeurs obtenues pour ces paramètres ont été récapitulés dans le tableau suivant (Tableau C.1):

30 Gy		
	k	λ
$15°C$	1.05	0.035
$21°C$	1.0	0.04
$27°C$	1.0001	0.08
$35°C$	1.005	0.095
100 Gy		
	k	λ
$15°C$	2.0	0.28
$21°C$	2.0	0.4
$27°C$	2.0	0.65
$35°C$	2.0	1.2

Tableau C.1 : Récapitulatif des paramètres obtenus par un ajustement selon une loi de Weibull pour les différentes températures de mesure pour les doses de 30 Gy et 100 Gy.

Les paramètres de la loi de Weibull évoluent avec la température et la dose. Pour chaque dose, le paramètre de forme k est quasiment constant sur l'intervalle de température étudié. Ce paramètre augmente avec la dose car la distribution est de plus en plus asymétrique. Le paramètre d'échelle λ augmente également en fonction de la température à une dose donnée. Un exemple de cet ajustement est présenté pour $30\,Gy$ et $100\,Gy$ (Figure C.2 (a) et (b) respectivement) :



(a)

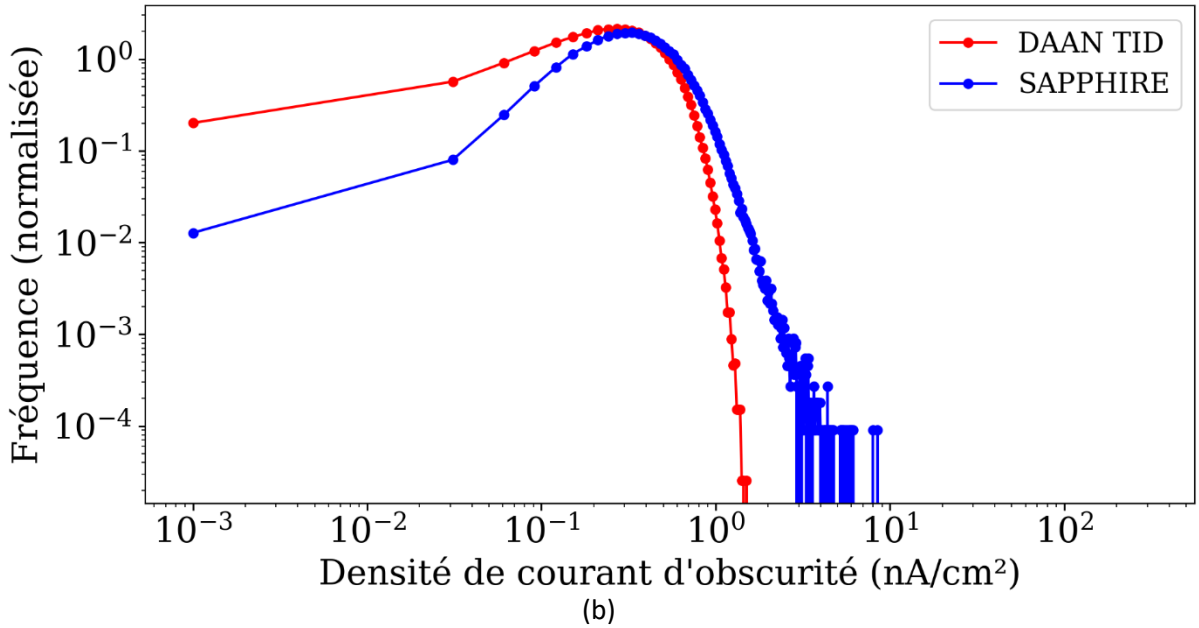


Figure C.2 : Comparaison entre la DCNU expérimentale et simulée pour une irradiation aux photons gamma issus d'une source de Cobalt 60 pour (a) une dose de 30 Gy et (b) une dose de 100 Gy.

Dans cette étude, les paramètres d'ajustement selon une loi de Weibull ont volontairement été minorés. De cette manière, la distribution de courant d'obscurité expérimentale est légèrement sous-estimée. Ce choix est justifié par le fait qu'une irradiation avec des photons gamma va surestimer l'effet de la TID sur le courant d'obscurité par rapport à une irradiation aux protons pour une même dose absorbée [2]. Cela est dû à la manière dont un photon et un proton vont créer des paires électron-trou dans le pixel (cf chapitre II). Un photon induit une production de paires électron-trou diffuse dans le volume (production homogène) alors qu'un proton (ou un ion lourd) va générer des paires électron-trou le long de sa trace (production localisée). En conséquence, la recombinaison de paires électron-trou est plus grande pour une particule tel qu'un proton par rapport à un photon car les paires sont en moyenne plus proches les unes des autres. Comme il reste plus de charges qui n'ont pas recombiné dans le cas d'une irradiation aux photons gamma, l'augmentation du courant d'obscurité associée est considérée comme un pire cas. En choisissant des paramètres qui sous-estiment la distribution de courant d'obscurité engendrée par des photons gamma, nous cherchons à refléter la contribution de la TID par des protons.

Enfin, concernant l'énergie d'activation moyenne du courant d'obscurité, cette dernière a été extraite des données expérimentales. Pour une dose de $30\ Gy$, l'énergie d'activation moyenne est d'environ $0{,}64\ eV$, et de $0{,}625\ eV$ pour $100\ Gy$. L'utilité de l'énergie d'activation sera explicitée dans le paragraphe suivant.

Méthodologie du modèle de TID

Pour modéliser la contribution de la TID à l'augmentation du courant d'obscurité, un tirage aléatoire est effectué dans la distribution de Weibull, paramétrée grâce aux ajustements réalisés dans le paragraphe précédent, pour chaque pixel. Cette valeur de courant d'obscurité est notée $\Delta I_{i,Weibull}$. Il ne faut pas oublier que ces paramètres de fit sont valables à une température donnée. De manière similaire au facteur de dommage universel (cf chapitre III), nous appliquons un facteur correctif en température sur le

courant d'obscurité tiré aléatoirement dans la distribution pour connaître sa valeur à n'importe quelle température. Ce facteur correctif s'exprime selon :

$$facteur\ correctif = exp\left(\frac{E_a}{k_B}\left(\frac{1}{T_{réf.}} - \frac{1}{T_{simu.}}\right)\right)$$

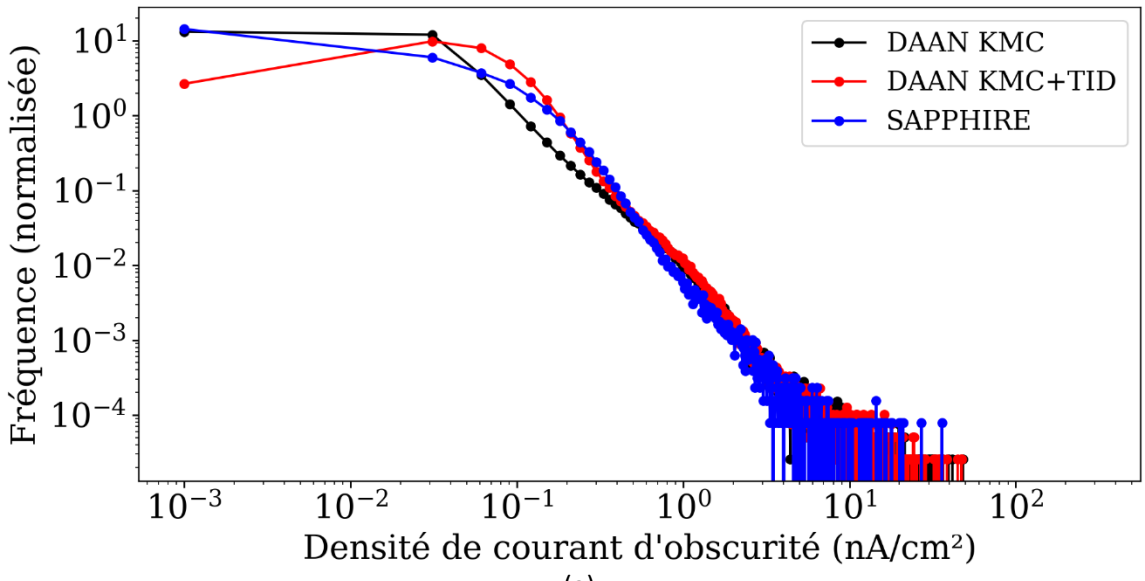
Où E_a est l'énergie d'activation moyenne extraite des données expérimentales, $T_{simu.}$ la température de simulation et $T_{réf.}$ la température de mesure la plus proche de la température simulée $T_{simu.}$. De cette manière nous pouvons exprimer l'augmentation du courant d'obscurité due à la dose ionisante simulée $\Delta I_i(TID)$ pour chaque pixel d'indice i:

$$\Delta I_i(TID) = \Delta I_{i,Weibull} \times facteur\ correctif$$

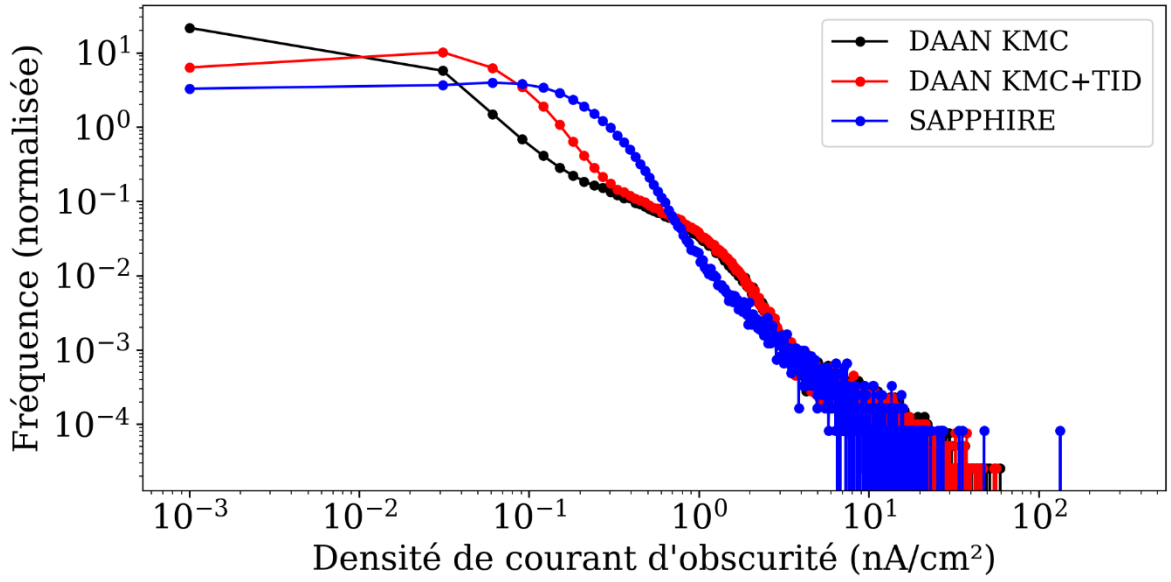
Dans *DAAN*, la TID est modélisée selon une méthode de Monte Carlo au moyen d'un fit expérimental. Ce modèle très simple nous permet en première approximation de tenir compte simultanément de la TID et de la DDD dans *DAAN*.

Comparaison entre mesures expérimentales et simulations pour des irradiations aux protons

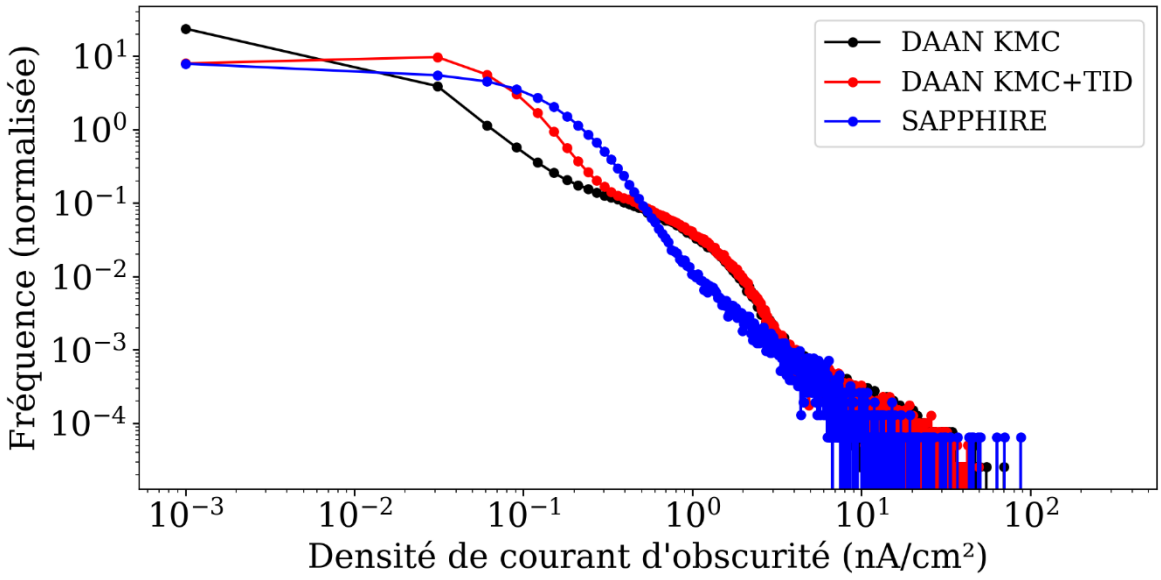
Afin d'évaluer la contribution de notre modèle de TID dans nos simulations *DAAN*, nous avons comparé des simulations avec et sans TID par rapport à des données expérimentales. Les simulations *DAAN* ont été effectuées selon les hypothèses de calcul développées dans le chapitre VI de ce manuscrit. Nous avons donc couplé les informations issues des simulations de l'algorithme KMC (cf chapitre V) avec le modèle d'effets de champ électrique en trois dimensions décrit dans le chapitre IV. Pour commencer, nous avons utilisé notre modèle de TID sur un composant SAPPHIRE, puisque c'est de ce même composant que sont issus les paramètres d'ajustement. Sachant que les composants irradiés aux protons ont reçu une dose de 30 Gy, nous avons choisi le jeu de paramètres correspondant à cette dose. Le courant d'obscurité a été mesuré à une température de $294{,}15\ K$, 1 mois après irradiation.



(a)



(b)



(c)

Figure C.3 : Distributions du courant d'obscurité simulée avec l'outil DAAN sans le modèle de TID (courbe noire), avec le modèle de TID (courbe rouge) comparées avec la distribution de courant d'obscurité expérimentale pour des composants SAPPHIRE irradiés avec (a) des protons de 6,5 MeV à une fluence de $3{,}89 \times 10^{9}\ p+/cm^2$, (b) des protons de 72,8 MeV à une fluence de $2{,}52 \times 10^{10}\ p+/cm^2$, (c) des protons de 200 MeV à une fluence de $5{,}16 \times 10^{10}\ p+/cm^2$.

L'apport de ce modèle est clairement visible pour les faibles courants d'obscurité. En effet, quel que soient les conditions d'irradiation, la DCNU semble gagner en réalisme, car le modèle TID « lisse » d'une certaine manière la courbe. Ainsi, plutôt que d'obtenir une distribution abrupte pour les faibles courants d'obscurité (considérés ici comme étant dans la gamme $[10^{-3}; 5 \times 10^{-1}]\ nA/cm^2$), une bosse est simulée grâce à l'apport du modèle de TID. Pour le cas des protons de 6,5 MeV, le modèle TID mène à une légère sous-estimation des très faibles courants d'obscurité ($\sim 10^{-3}\ nA/cm^2$), alors que le pic de distribution (autour de $2 \times 10^{-1}\ nA/cm^2$) est bien simulé pour le cas des protons de 72,8 MeV et 200 MeV. Ceci peut s'expliquer notamment par le choix des paramètres de pièges qui influe sur la prédiction du courant d'obscurité. De manière globale, l'avantage de ce modèle simple de dose ionisante est qu'il permet de mieux prédire l'allure de la

distribution pour les faibles courants d'obscurité. Le second avantage est qu'il n'impacte pas la queue de distribution, où les évènements sont dominés par la dose de dommage de déplacement [3]. Le choix des paramètres pour simuler la contribution de la TID semble cohérent avec les données expérimentales.

Limites du modèle

A cause de sa simplicité, ce modèle présente quelques limitations. La plus évidente est le fait que ce modèle ne peut pas être généralisé pour n'importe quel composant. En effet la TID est très dépendante de la technologie du pixel, donc les paramètres d'ajustement du modèle ne sont valables que pour le composant SAPPHIRE, et de manière limitée pour le JADE puisqu'ils sont basés sur des technologies similaires. De plus, aucune relation explicite n'est établie entre la TID et les paramètres d'ajustement, donc nous ne pouvons pas étendre le modèle à d'autres doses. Ce modèle permet simplement d'améliorer la forme de la distribution pour les faibles courants d'obscurité si une base de données de référence existe (comme des données expérimentales par exemple). Je tiens à remercier Thierry Nuns pour ses explications claires et précises sur les phénomènes à l'origine de la TID qui m'ont aidé à écrire cette annexe.

Bibliographie de l'annexe

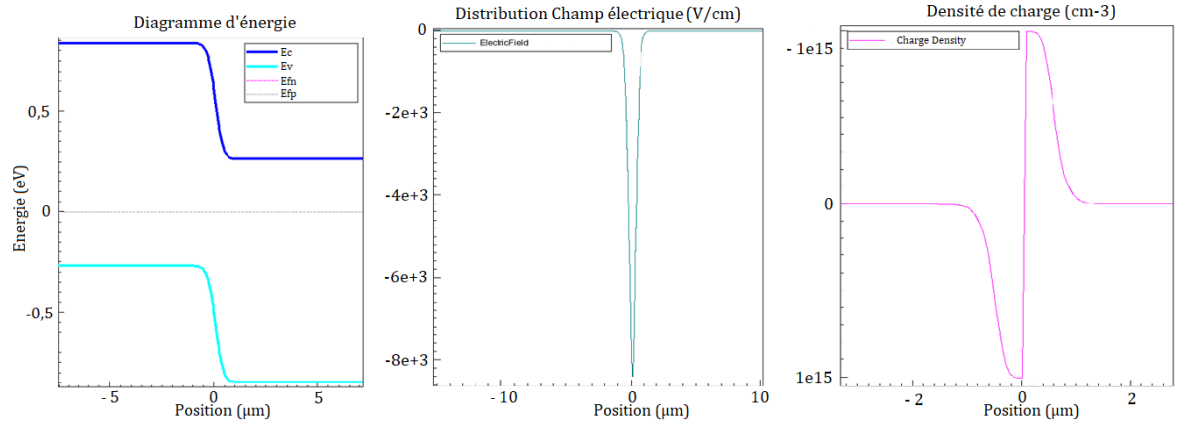
[1] A. L. Roch *et al.*, « Comparison of X-Ray and Electron Radiation Effects on Dark Current Non-Uniformity and Fluctuations in CMOS Image Sensors », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 67, n° 1, p. 268- 277, janv. 2020, doi: 10.1109/TNS.2019.2950086.

[2] E. Martin, « Etude physique de la dégradation et modèles pour l'assurance durcissement des capteurs d'image en environnement spatial », PhD Thesis, Toulouse, ISAE, 2012.

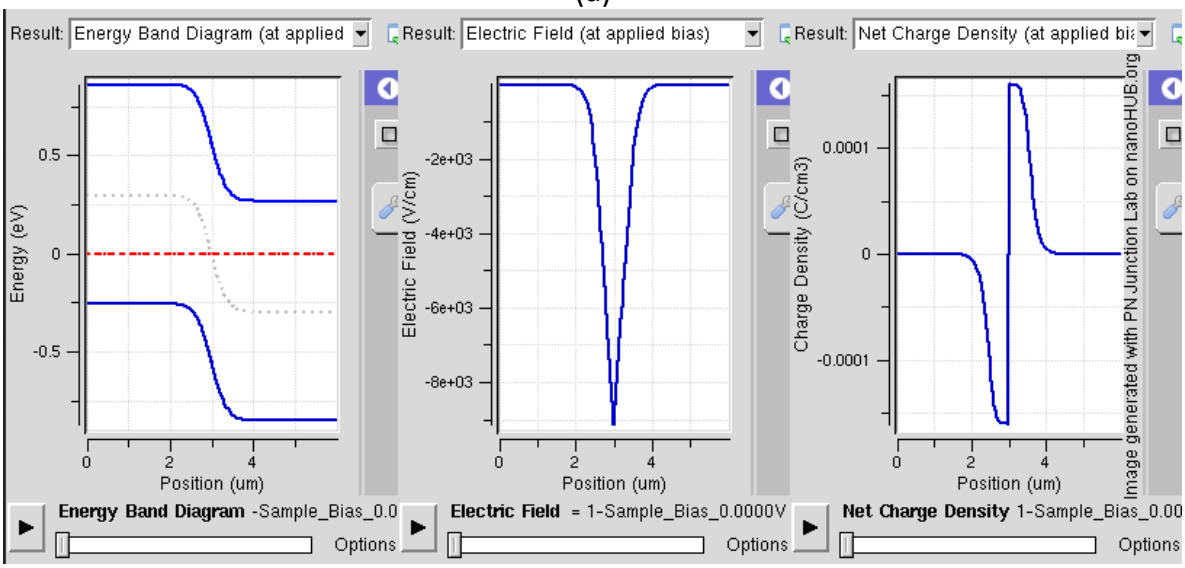
[3] M. Beaumel, D. Herve, et D. V. Aken, « Cobalt-60, Proton and Electron Irradiation of a Radiation-Hardened Active Pixel Sensor », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 57, n° 4, p. 2056- 2065, août 2010, doi: 10.1109/TNS.2010.2048043.

Annexe D : Validation du modèle TCAD de jonction PN

Un modèle test de jonction PN a été créé via un outil TCAD. Ce support de test permet de modéliser les effets du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou d'une population de pièges répartis uniformément dans la jonction PN. Les résultats de cette modélisation numérique sont ensuite comparés aux simulations issues de notre modélisation analytique des effets d'amplification du champ électrique sur le taux de génération de charges. Afin d'effectuer une comparaison correcte, il est nécessaire de vérifier que le support de test est conforme aux lois physiques qui régissent les propriétés des semi-conducteurs [1]. Dans un premier temps nous examinons les caractéristiques de la jonction PN test dans des conditions d'équilibre, c'est-à-dire sans polarisation appliquée à l'une des bornes de la jonction (0 V) :



(a)



(b)

Figure D.1 : Validation du modèle de test : tracés des caractéristiques physiques de la jonction PN non polarisée : à gauche la représentation en diagramme de bande d'énergie de la jonction, au centre le profil de champ électrique, à droite la densité nette de charge, (a) avec l'outil TCAD utilisé pendant la thèse) ; (b) avec l'outil simple disponible en ligne sur nanoHUB.org [2]

Nous constatons donc qu'à l'équilibre, la jonction PN simulée correspond de près aux caractéristiques d'une jonction idéale à l'équilibre fournies par l'outil disponible sur nanoHUB.org, une plate-forme pédagogique universitaire dédiée aux sciences à l'échelle micro et nanoscopique [2]. Afin de s'assurer de la validité de notre modèle de test, nous avons légèrement polarisé notre jonction PN en inverse, c'est-à-dire une tension négative

sur la cathode de $-0{,}5\,V$ pour sortir la jonction de sa condition d'équilibre. Nous reprenons donc la même jonction PN et nous regardons les mêmes caractéristiques, mais cette fois-ci lorsqu'elle est polarisé à $-0{,}5\,V$ (voir Figure D.2) :

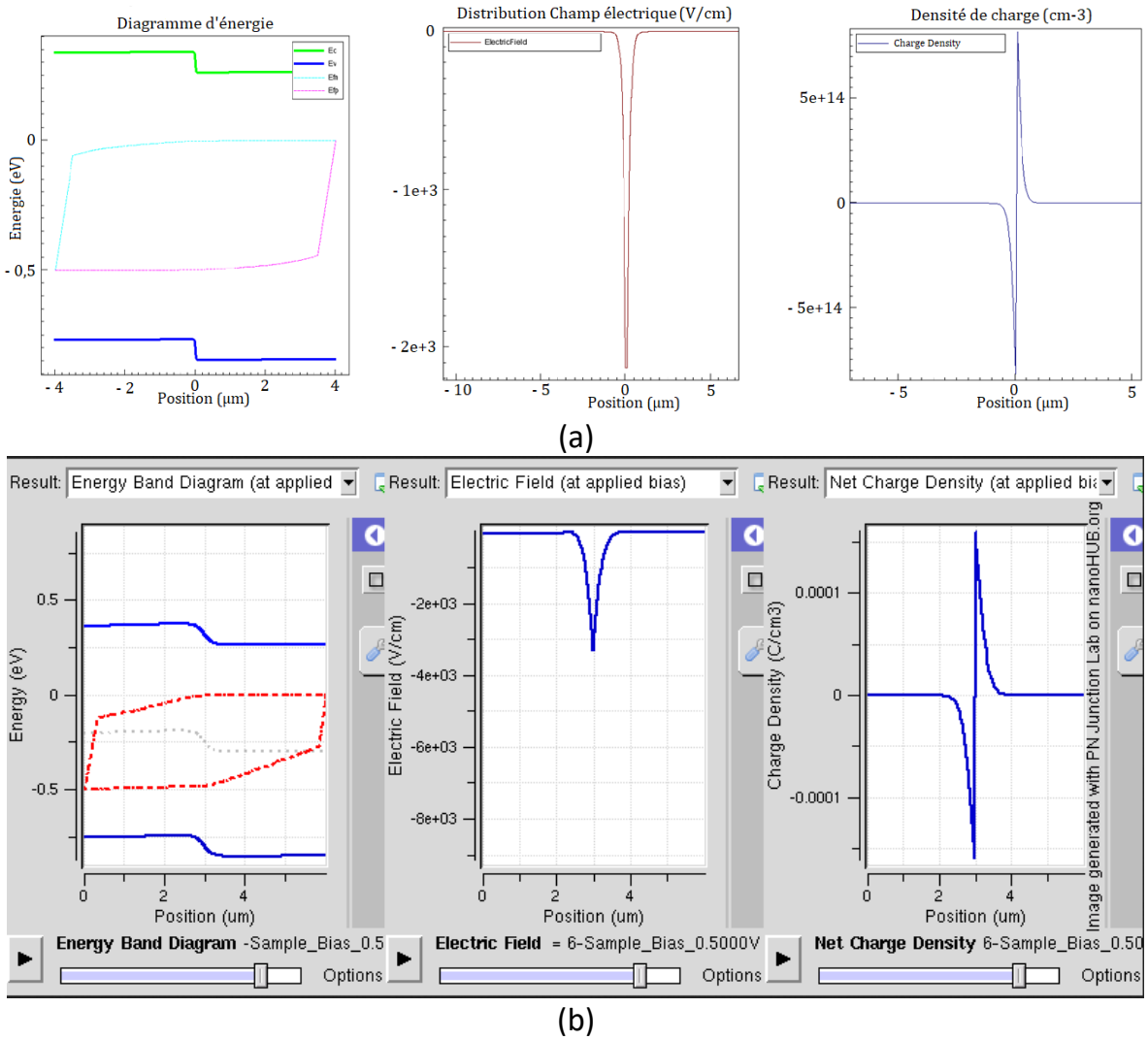


Figure D.2 : Tracés des caractéristiques physiques de la jonction PN polarisée à -0,5 V : A gauche la représentation en diagramme de bande d'énergie de la jonction, au centre le profil de champ électrique, à droite la densité nette de charge, (a) avec l'outil TCAD utilisé pendant la thèse) ; (b) avec l'outil simple disponible en ligne sur nanoHUB.org [2].

Que ce soit dans des conditions d'équilibre ou non, le modèle de test montre des caractéristiques très proches de celle d'une jonction PN idéale. Nous pouvons donc utiliser ce support de test pour comparer les modélisations numériques et analytiques des effets du champ électrique sur le mécanisme de génération de paires électron-trou.

Bibliographie de l'annexe

[1] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: Wiley, 1981.

[2] « nanoHUB.org - Resources ». https://nanohub.org/resources/ (consulté le juill. 07, 2020).

Réorganisation et effets des défauts en volume dans les imageurs irradiés

Les capteurs d'image embarqués à bord des satellites, également appelés imageurs, jouent un rôle crucial pour le bon déroulement des missions spatiales. Cependant, ces matrices de pixels sont sensibles aux particules énergétiques issues des diverses sources de rayonnement de l'environnement spatial. Dans certains cas, les interactions entre le rayonnement énergétique et la matière modifient la structure cristalline du semi-conducteur qui compose la zone sensible du pixel. Par la suite, les défauts cristallins produits lors de l'irradiation vont se réorganiser pour former des entités électriquement actives et stables dans le temps. Ces défauts, également appelés pièges, vont contribuer à augmenter le signal parasite intrinsèque à chaque pixel : le courant d'obscurité. Après irradiation et sans exposition lumineuse, une augmentation de l'amplitude moyenne du courant d'obscurité ainsi que sa disparité entre chaque pixel est observée. La distribution des courants d'obscurité (également appelée « Dark Current Non Uniformity » en anglais, abrégé DCNU) évolue dans le temps avec le niveau d'irradiation.

La thèse vise à apporter des éléments de compréhension pour améliorer l'estimation de l'augmentation du courant d'obscurité après irradiation. Les travaux de recherches menés au cours de cette thèse se focalisent en grande partie sur la prédiction du nombre et de l'intensité des pixels fortement dégradés, car ce sont les plus pénalisants pour le fonctionnement nominal d'un imageur. La méthode de prédiction des distributions de courant d'obscurité post-irradiation développée par l'ONERA (*DAAN*) a été améliorée par l'adjonction de nouveaux modèles.

La démarche des travaux de thèse a consisté dans un premier temps à améliorer la prise en compte des effets du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou des défauts électriquement actifs. En première approximation, les mécanismes physiques liés à l'influence du champ électrique étaient modélisés en une dimension. Cependant, une telle modélisation est connue pour surestimer l'impact du champ électrique sur le courant d'obscurité. C'est pourquoi nous avons développé un modèle original d'effets de champ électrique en trois dimensions. Ce nouveau modèle permet de réduire l'amplitude des effets du champ électrique sur le taux de génération de paires électron-trou, et par extension sur le courant d'obscurité.

La méthode de prédiction originale utilise le facteur de dommage universel. Ce coefficient empirique représente une dégradation moyenne, et masque les phénomènes de réorganisation qui se mettent en place au cours du temps. C'est pourquoi dans un second temps, un modèle de réorganisation des défauts dans la matière cristalline a été développé. Ce modèle repose sur un algorithme de type Kinetic Monte Carlo (KMC) optimisé par méthode dite « octree ». D'une part cet outil a pour but d'estimer la population type de pièges présente après des temps longs de guérison. D'autre part, cet algorithme est utilisé pour évaluer le nombre de défauts qui ont guéri au cours du temps par rapport à l'état initial. En première approximation, une répartition uniforme de ces défauts dans le volume de simulation est considérée à l'état initial.

Dans un dernier temps, les cascades de dommage sont modélisées avec *GEANT4* puis sont traitées par notre outil KMC pour estimer de manière la plus réaliste possible les processus de guérison. Les taux de guérison obtenus sont en accord avec la littérature. Ces informations sont ensuite utilisées dans l'outil de prédiction des courants d'obscurité, ce qui permet de s'affranchir de l'utilisation du facteur de dommage universel et d'estimer de manière la plus réaliste possible l'augmentation du courant d'obscurité après irradiation. Cette chaîne de modélisation simule des distributions de courant d'obscurité proches des mesures expérimentales. Nous proposons de cette manière une méthode analytique alternative au facteur de dommage universel.

Publications

- *Influence of a 3D electric field enhancement model on the Monte Carlo calculation of the dark current in pixel arrays,* **K. Lemière**, C. Inguimbert, T. Nuns, Journal of Applied Physics 128, 164502 (Octobre 2020)
- *A Kinetic Monte Carlo Algorithm to Model the Annealing Process and Compute the Dark Current Non Uniformity*, **K. Lemière**, C. Inguimbert, T. Nuns, en cours de review IEEE TNS
- *Statistical spread on the displacement damage degradation of irradiated semiconductors*, C. Inguimbert, A. Durand, T. Nuns, **K. Lemière**, en cours de publication Nuclear Instruments and Methods B
- *Optoelectronic sensors degradation induced by the radiations of the space environment*, C. Inguimbert, T. Nuns, **K. Lemière**, D. Hervé, A. Vriet, J. Barbero, J. Moreno, A. Nedelcu, S.Ducret, OPTRO 2020 Conférence (Janvier 2020)

Communications

- *A Kinetic Monte Carlo Algorithm to Model the Annealing Process and Compute the Dark Current Non Uniformity*, **K. Lemière**, C. Inguimbert, T. Nuns, présentation poster (vidéo), RADECS 2020
- Comparison of 1D and 3D Electric Field Enhancement Analytical Models to Calculate the Dark Current Non Uniformity, **K. Lemière**, C. Inguimbert, T. Nuns, presentation poster, NSREC 2019
- Présentation poster aux Entretiens de Toulouse, ISAE Supaéro, Toulouse, 2019
- Nuit Européenne des Chercheurs, atelier *Top Chrono pour ma thèse*, Cité de l'Espace, Toulouse, 2018